HAL
open science

Phases vitreuses, optimisation et grandes déviations

Olivier Rivoire

To cite this version:

Olivier Rivoire. Phases vitreuses, optimisation et grandes déviations. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Paris Sud - Paris XI, 2005. Français. NNT : . tel-00009956

HAL Id: tel-00009956

https://theses.hal.science/tel-00009956v1

Submitted on 22 Aug 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ORSAY

Numéro d'ordre : 7933

Université Paris-Sud

UFR Scientifique d'Orsay

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences
de l'Université Paris XI

Discipline : Physique Théorique

par

Olivier RIVOIRE

Phases Vitreuses, Optimisation et Grandes Déviations

Soutenue le 11 juillet 2005 devant la commission d'examen composée de

M. Andrea Cavagna	(Président)
M. David Dean	(Rapporteur)
M. Olivier Martin	(Co-directeur de thèse)
M. Marc Mézard	(Co-directeur de thèse)
M. Rémi Monasson	
M. Martin Weigt	(Rapporteur)

ORSAY

Numéro d'ordre : 7933

Université Paris-Sud

UFR Scientifique d'Orsay

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences
de l'Université Paris XI

Discipline : Physique Théorique

par

Olivier RIVOIRE

Phases Vitreuses, Optimisation et Grandes Déviations

Soutenue le 11 juillet 2005 devant la commission d'examen composée de

M. Andrea Cavagna	(Président)
M. David Dean	(Rapporteur)
M. Olivier Martin	(Co-directeur de thèse)
M. Marc Mézard	(Co-directeur de thèse)
M. Rémi Monasson	
M. Martin Weigt	(Rapporteur)

Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu les deux directeurs de thèse dont j'ai eu le privilège de bénéficier, Olivier Martin et Marc Mézard.

Je remercie également les étudiants et postdocs que j'ai côtoyé au cours des trois années de ma thèse, et avec lesquels j'ai eu l'occasion de discuter et collaborer sur les sujets présentés dans cette thèse, soit, dans un ordre chronologique, Markus Müller, Andrea Pagnani, Martin Kiemes, Matteo Palassini, Stefano Ciliberti et Thierry Mora. Je suis notamment reconnaissant aux deux derniers de leurs commentaires sur la première version du texte qui suit.

Mes remerciements vont aussi à David Dean et Martin Weigt, qui ont rempli les rôles de rapporteurs, et à Andrea Cavagna et Rémi Monasson qui ont accepté de participer à mon jury de thèse.

Table des matières

Avant propos **1**
Des systèmes vitreux à l'optimisation 1
Structure de la thèse 5
Notations 9

I Physique et optimisation **11**

1 Complexité algorithmique **13**
1.1 Calculabilité 13
1.2 Optimisation combinatoire 14
1.3 Algorithmes et complexité 15
1.4 Critiques de la théorie standard 17

2 Physique des systèmes désordonnés **21**
2.1 Principes de la physique statistique 21
2.2 Mathématique des systèmes décorrélés 27
2.3 Systèmes désordonnés 31
2.4 Physique de l'optimisation combinatoire 34

3 Phases vitreuses et cavité **37**
3.1 Modèle à énergies aléatoires 37
3.2 Température interne 39
3.3 Cavité et grandes déviations 41
3.4 Polymère dirigé sur arbre aléatoire 42

II Modèles sur graphes aléatoires **45**

4 Structures aléatoires **47**
4.1 Graphes aléatoires 47
4.2 Graphes et optimisation 49

4.3 Approximation des arbres 52
4.4 Transitions de phase 57

5 Optimisation sur les graphes 63
5.1 Des arbres aux graphes 63
5.2 Approche liquide 67
5.3 Température finie 73
5.4 Algorithmes et variationnalité 76

6 Grandes déviations externes 83
6.1 Graphes atypiques 83
6.2 Ensembles poissonniens 85
6.3 Graphes réguliers 90
6.4 Niveaux de désordre multiples 90

III Phases vitreuses 91

7 Grandes déviations internes 93
7.1 Approche à un pas 93
7.2 Factorisation 100
7.3 Transitions vitreuses 103
7.4 Enchaînement des pas 109

8 Critères de cohérence 115
8.1 Cohérence locale 115
8.2 Stabilités 122
8.3 Critères globaux 126
8.4 Au delà du premier pas 131

9 Géométrie des phases vitreuses 137
9.1 Un pas gelé 137
9.2 Contraintes dures 140
9.3 Taille des amas et dénombrement 145
9.4 Distances 150

Conclusion 159
Au delà des graphes aléatoires 159
De l'optimisation aux systèmes vitreux 160
Perspectives 162

Reproductions d'articles **167**

A Glass models on Bethe lattices **167**

B Properties of atypical graphs from negative complexities **193**

C Frozen glass phase in the multi-index matching problem **219**

D Random multi-index matching problems **225**

E The cavity method for large deviations **249**

F Landscape of solutions in constraint satisfaction problems **279**

Bibliographie **285**

Avant propos

Des systèmes vitreux à l'optimisation

Initialement développée pour rendre compte des propriétés de la matière en terme de ses constituants élémentaires, atomes et molécules, la physique statistique a engendré des méthodes dont le champ d'application dépasse aujourd'hui largement celui des seules sciences naturelles. Incidemment, le substantif « physique » tend désormais à qualifier davantage le type d'approche adopté pour aborder un problème que la nature même du problème.

Cette thèse traite ainsi de la physique des problèmes d'optimisation, un champ d'étude qui revient plus traditionnellement aux sciences informatiques. Bien qu'immatériels, ces problèmes n'en sont pas moins d'un intérêt pratique considérable, notamment pour l'industrie et les communications. Ils consistent très génériquement à déterminer, parmi un très grand nombre de possibilités, la (ou les) solution(s) qui minimise(nt) un certain coût global ; un exemple simple est le *matching bipartie*, présenté sur la figure 1. La question principale posée par les problèmes d'optimisation est très pragmatique : il s'agit de trouver un algorithme, c'est-à-dire une méthode pratique de calcul, qui retourne la solution optimale en fonction des données du problème.

Des efforts considérables consentis pour développer de tels algorithmes, il ressort que de nombreux problèmes d'optimisation, qualifiés de « NP-complets », n'admettent aucun algorithme performant (cette assertion est précisée à l'occasion du premier chapitre). Ainsi, un algorithme efficace est connu pour le matching bipartie (figure 1) mais son analogue tripartie, présenté sur la figure 2, appartient lui à la classe des NP-complets et aucun programme informatique n'est actuellement disponible qui puisse le résoudre lorsque sa taille est de l'ordre de $N = 30$. Une large part de la théorie de la complexité algorithmique se consacre à l'étude de la NP-complétude, mais démontrer que les problèmes NP-complets sont vraiment plus difficiles que, par exemple, le matching bipartie, reste une question ouverte majeure en

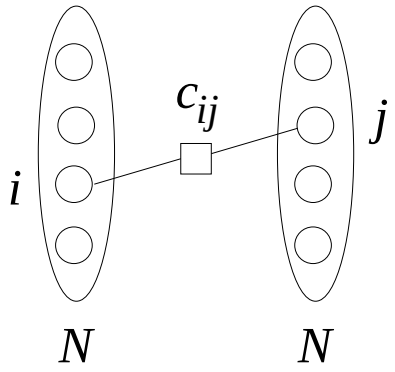

FIG. 1 – *Problème du matching bipartie.* Il s'agit d'associer chacune des N tâches (ensemble de gauche) à une des N machines (ensemble de droite) pour un coût total minimal, sachant que chaque machine j effectue la tâche i avec un coût c_{ij} (la donnée des c_{ij} définit une instance).

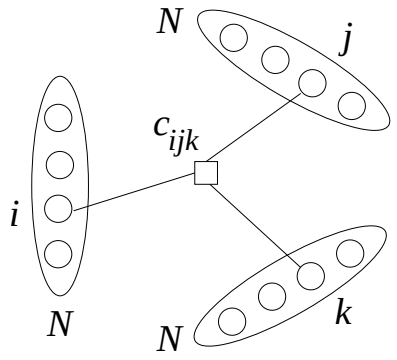

FIG. 2 – *Problème du matching tripartie.* Ce problème est analogue au problème bipartie, mais avec un troisième ensemble correspondant par exemple au lieu où la machine effectue la tâche. Un coût c_{ijk} est maintenant associé à chaque triplet formé par une tâche i, une machine j et un lieu k.

mathématiques (conjecture « NP $\overset{?}{\neq}$ P »).

Étant données les difficultés rencontrées pour développer des algorithmes performants sur certains problèmes, une question « théorique » naturelle porte sur la source de ces difficultés. L'espoir est qu'en élucidant leurs origines on parvienne ensuite à inventer les moyens de les surmonter. C'est à ce niveau que l'approche physique apporte sa contribution. En effet, la Nature elle-même est confrontée à des problèmes d'optimisation : un principe physique élémentaire est en effet qu'à basse température, l'énergie totale d'un système doit être minimisée. Ainsi, la conformation basse température de la matière est génériquement un cristal, telle que tous les atomes s'ordonnent pour diminuer leur énergie d'interaction, tandis qu'à plus haute température un système d'atomes est généralement dans un phase liquide, plus désordonnée.

Lorsqu'on refroidit soudainement un liquide (dans une opération appelée *trempe*), l'ensemble de ses molécules est donc soumis à un problème d'optimisation. Cette optimisation n'est pas immédiate à réaliser, et l'expérience montre que si la trempe est suffisamment rapide, le système n'adopte pas la solution optimale (le cristal), mais se bloque dans une conformation solide et désordonnée d'énergie supérieure, appelée *verre* ; le procédé de trempe est en

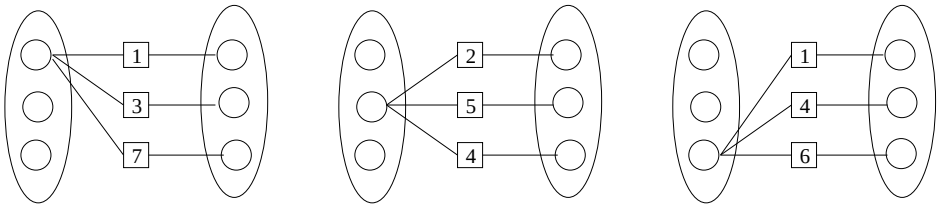

FIG. 3 – *Frustration dans le matching bipartie.* Une méthode de résolution naïve serait d'associer à chaque tâche la machine qui l'effectue au moindre coût. Cependant, ce procédé local (on ne regarde qu'une tâche à la fois) est incompatible avec la contrainte globale qui veut que chaque machine remplisse une tâche et une seule : en effet, il peut y avoir une machine qui soit la moins coûteuse pour plusieurs tâches. Cette figure illustre un tel cas : la première machine, en haut à droite, est la plus performante pour chacune des trois tâches de gauche. Ce conflit entre le local et le global est à l'origine des difficultés.

fait couramment utilisé pour obtenir les vitres de fenêtres à partir de silice liquéfiée à haute température. L'origine de la difficulté est ici un *effet de cage* : un atome est empêché de bouger par ses voisins, qui eux mêmes sont bloqués par leurs propres voisins, *etc.* Cet effet collectif contribue ainsi à priver les atomes d'un réarrangement global qui réduirait leur énergie. La compétition entre contraintes locales (la présence des voisins) et globales (la minimisation de l'énergie) est un mécanisme très général, appelé *frustration*, qui se retrouve sous diverses formes dans les problèmes d'optimisation difficiles (voir ainsi la figure 3 pour une illustration avec les problèmes de matching).

Cette analogie entre verres et optimisation est un thème directeur de cette thèse qui étudie la présence et la nature de *phases vitreuses* dans divers problèmes d'optimisation. Ainsi pour les matchings, il est montré que la version bipartie, réputée facile, a les caractéristiques d'une phase liquide, alors que la version tripartie, réputée difficile, présente une phase vitreuse. Un autre exemple étudié est celui du coloriage de graphes (voir figure 4) où, à la différence des matchings, un grand nombre de solutions peuvent être présentes simultanément : en étudiant comment ces différentes solutions sont reliées entre elles, on trouve de manière similaire que, selon le graphe considéré, facile ou difficile à colorier, les solutions forment des phases liquides ou vitreuses.

La relation entre physique et optimisation n'est pas à sens unique : les méthodes et concepts développés dans le cadre de problèmes d'optimisation sont aussi utiles à la résolution des modèles destinés à comprendre les phénomènes physiques. La *transition vitreuse*, par laquelle un liquide se transforme

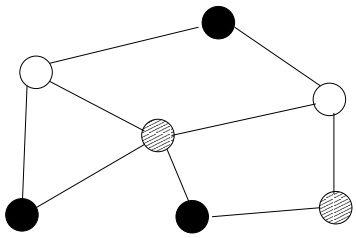

FIG. 4 – *Problème du coloriage de graphes.* Un graphe est un ensemble de N nœuds, avec un certain nombre M de liens entre eux (sur le schéma $N = 7$ et $M = 9$). Le problème du coloriage consiste, étant donné q couleurs (sur le schéma $q = 3$), à attribuer des couleurs aux nœuds sans jamais attribuer la même couleur à deux nœuds voisins.

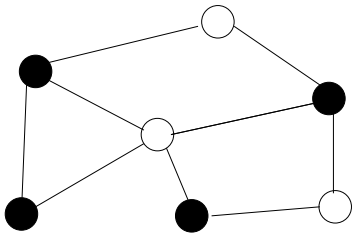

FIG. 5 – *Modèle de verre sur réseau.* Des particules peuvent occuper les nœuds du graphe ; pour modéliser l'effet de cage présent dans les verres, une particule admet au plus ℓ voisines [BM02] (sur le schéma $\ell = 1$). Ce modèle est associé au problème d'optimisation qui consiste, pour un graphe donné, à déterminer la densité maximale de particules réalisable.

en verre, est bien sûr un phénomène qui se prête particulièrement à une telle approche, et les modèles *sur réseau* (voir figure 5) de cette transition s'étudient en utilisant une méthode similaire à celle appliquée aux problèmes d'optimisation. D'autres phénomènes physiques, moins directement reliés à la transition vitreuse, peuvent aussi être formulés en terme d'optimisation : un exemple en est donné par le problème de l'adaptation des systèmes soumis à des contraintes mécaniques.

Plus généralement, on assiste actuellement à une convergence, et un enrichissement mutuel, des approches physique, mathématique et algorithmique dans une variété de domaines dont les problèmes d'optimisation fournissent le dénominateur commun.

Structure de la thèse

Cette thèse introduit et développe quelques uns des concepts et méthodes utilisés par la physique statistique pour explorer les problèmes d'optimisation. Elle est composée de trois parties, dont le contenu est résumé ci-dessous.

La première partie s'ouvre sur une courte introduction à la *théorie de la complexité algorithmique*, dont les problèmes fournissent matière au reste du texte. Elle se poursuit par une brève exposition du cadre théorique général, la *physique statistique des systèmes désordonnés*. Celle-ci est présentée du point de vue des *grandes déviations*, dont les concepts réapparaissent de manière récurrente au cours des chapitres suivants. L'outil principal dont il est fait usage, la *méthode de cavité*, est introduite sur quelques modèles simples, qui offrent les premiers exemples de systèmes *vitreux*.

Après avoir exposé les éléments principaux de la *théorie des graphes aléatoires*, la deuxième partie explique comment la méthode de cavité, par le biais de l'*approximation des arbres*, permet d'aborder les problèmes d'optimisation définis sur ce type de structure. La présentation est dans un premier temps limitée à l'approche la plus simple, dite *liquide*, dont les insuffisances sont cependant déjà discutées. Cette partie comprend également une étude des grandes déviations sur les ensembles de graphes, qui complète l'approche sur graphe donné.

La troisième et dernière partie est consacrée à la description de la méthode de cavité en présence de phases vitreuses, méthode dite *à un pas*, dont l'ensemble des chapitres précédents peut être vu comme une introduction progressive. La portée et les limites de cette approche forment un sujet de recherche encore très ouvert, dont quelques éléments seulement seront discutés. Enfin, le dernier chapitre concerne la description fine de la structure des phases vitreuses, pour laquelle diverses extensions du formalisme à un pas sont proposées.

Le but de ces différentes parties est de présenter en détail les principes sur lesquels s'appuient les articles écrits dans le cadre de cette thèse et reproduits en annexe. Les résultats exposés dans ces articles ne sont pas systématiquement repris dans le texte, aussi un rapide résumé en est-il donné ici.

L'article [RBMM04], écrit en collaboration avec Giulio Biroli, Olivier Martin et Marc Mézard, et reproduit en annexe A, développe l'étude sur réseaux de Bethe (graphes aléatoires réguliers) d'une classe de modèles de verres introduits par Biroli et Mézard [BM02] (voir la figure 5). Le diagramme de phase de ces modèles est étudié à l'aide de la méthode de cavité à un pas de brisure de la symétrie des répliques, qui sera expliquée au chapitre 7. En particulier, la stabilité de l'Ansatz de brisure à un pas est analysée en détail suivant une procédure initiée par Montanari et Ricci-Tersenghi [MRT03] pour laquelle sont proposées une description simplifiée et une interprétation physique, toutes deux reprises au chapitre 8. L'étude de ces modèles de verre sur réseau inclut également une analyse des conditions de blocage cinétique de la dynamique, dans l'esprit des travaux de Toninelli, Biroli et Fisher [TBF04] ; celle-ci permet de mettre en regard les rôles respectifs de la statique et de la dynamique dans ces modèles, qui constitue une des questions les plus vivement débattues de la physique des systèmes vitreux.

Les articles [MMR04, MMR05], écrits en collaboration avec Olivier Martin et Marc Mézard, et reproduits en annexes C et D, concernent l'étude des problèmes de matchings d-partie. Celle-ci généralise la solution du matching bipartie proposée il y a vingt ans par Mézard et Parisi *via* la méthode des répliques [MP85] et récemment rigoureusement confirmée par Aldous [Ald01]. Alors que le matching bipartie est polynômial et dépourvu de phase vitreuse, les matchings d-partie avec $d \geq 3$ sont NP-complets et leur analyse par la cavité révèle la présence d'une phase vitreuse. Celle-ci a la particularité d'être « gelée » (voir le chapitre 9), ce qui la distingue des phases vitreuses trouvées par des méthodes analogues dans d'autres problèmes d'optimisation. Pour l'heure, aucun formalisme mathématique ne corrobore les prédictions de la cavité, mais l'excellent accord avec l'analyse numérique de systèmes de taille réduite suggère qu'elles soient exactes. L'approche suivie, qui passe par l'intermédiaire des graphes aléatoires dilués, présente de plus l'intérêt d'entretenir un rapport étroit avec le formalisme introduit par Aldous, ce qui pourrait contribuer à la compréhension mathématique, encore très partielle, de la brisure de symétrie des répliques.

Les articles [Riv04, Riv05b] reproduits en annexe B et E, portent sur l'analyse des grandes déviations dans les modèles sur graphes aléatoires. Les

grandes déviations, qui constituent un fil directeur de cette thèse, seront introduites et motivées dès le deuxième chapitre : en bref, elles concernent les probabilités exponentiellement petites des réalisations atypiques du désordre. L'article [Riv04] met en évidence leur lien avec la méthode de brisure de symétrie des répliques à un pas en s'appuyant sur des calculs combinatoires explicites qui sont possibles dans un certain nombre de cas limites. L'article [Riv05b] justifie et développe cette observation, en la généralisant notamment à différentes classes de graphes aléatoires et aux systèmes présentant des phases vitreuses. Un prolongement de ces travaux est leur application à des modèles physiques de rigidité, selon une idée qui sera présentée en 6.1, et dont les développement font l'objet d'un article en préparation [Riv05a].

L'article [MPR05a], écrit en collaboration avec Marc Mézard et Matteo Palassini, et reproduit en annexe F, s'intéresse à la structure fine de la géométrie des phases vitreuses dans les problèmes de satisfaction de contraintes. La méthode développée, dont les détails figureront dans un article en préparation [MPR05b], seront exposés ici au chapitre 9. Une application en ait le comptage de solutions dans les problèmes de décision, qui, du point de vue de la théorie de la complexité algorithmique, est un problème notoirement plus difficile que celui de savoir si une solution existe ou non. Un autre aspect de ce travail concerne l'étude des distances entre solutions, qui présente par exemple un intérêt pour l'analyse des systèmes de codes correcteur d'erreur.

Cette thèse contient de plus un certain nombre de calculs originaux n'ayant pas fait l'objet de publication. Il s'agit essentiellement de problèmes classiques revisités sous un nouvel angle, dont le polymère dirigé sur arbre aléatoire et le κ-cœur rederivé en 3.4 et 4.3 avec la cavité, le coloriage repris en 7.3 avec des arguments probabilistes, et le perceptron binaire reformulé en 9.2 en terme de problème de satisfaction de contraintes. De même, l'étude comparée des critères de validité physiques et mathématiques est présentée au chapitre 8 pour la première fois.

Enfin, la plupart des problèmes abordés dans cette thèse admettent une formulation rigoureusement mathématique, et donc, en principe, une solution de même nature. Les méthodes et la présentation adoptées ici suivent cependant une approche physique qui, en s'attachant aux principes plutôt qu'au formalisme, ne prétend pas à la rigueur mathématique. Lorsqu'ils existent, les résultats mathématiques correspondant sont cependant mentionnés dans les notes qui concluent chaque chapitre. Ces notes sont également destinées à fournir les références sur lesquelles le texte s'appuie.

Notations

Les notations utilisées dans le texte qui sont les moins standards sont référencées ici :

$\asymp$	$\mathcal{N}(N) \asymp e^{K(N)}$ signifie $\lim_{N\to\infty} \frac{\ln \mathcal{N}(N)}{K(N)} = 1$
$\#$	$\#A =$ le nombre d'éléments de l'ensemble A
$\mathbb{P}$, $\mathbb{E}$	probabilité et espérance (moyenne) : $\mathbb{E}[X] = \int dx\ x\ \mathbb{P}[X = x]$
δ_x	distribution de Dirac, $\delta_x(y) = \delta(x - y)$
π_θ	distribution de Poisson de moyenne θ, $\pi_\theta(k) = \theta^k e^{-\theta}/k!$
$\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$	ensembles de graphes binomial et uniforme, *cf.* 4.1
$i \in a$	le nœud i est connecté à la clause a, et réciproquement pour $a \in i$
$i \in j$	les nœuds i et j sont voisins (réservé aux graphes simples)
$j \in i - 0$	j est connecté à i mais distinct de 0

La signification des principales abréviations et la référence de la section où elles sont introduites, sont :

P, NP	polynômial, polynômial non-déterministe	*cf.* 1.3
i.i.d.	indépendantes identiquement distribuées	*cf.* 2.2
REM	modèle à énergies aléatoires	*cf.* 3.1
SAT, non-SAT	satisfaisable, non satisfaisable	*cf.* 4.2
K-SAT	problème de K-satisfaisabilité	*cf.* 4.2
XOR-SAT	problème de satisfaisabilité avec *ou* (OR) niés (X)	*cf.* 9.2

Première partie

Physique et optimisation

Chapitre 1

Complexité algorithmique

Quelles sont les limites à la puissance de calcul des ordinateurs ? Une formalisation de la notion de complexité algorithmique est offerte par la théorie de la NP-complétude. Cette approche, dont les notions sont destinées à être reprises et discutées, est esquissée à grands traits dans ce premier chapitre.

1.1 Calculabilité

Les progrès constants de l'informatique, tant matériels que logiciels, pourraient laisser penser que tout problème, pourvu qu'il soit mathématiquement bien posé, sera un jour résolu par ordinateur. Cet espoir a cependant été battu en brèche par Turing dès les années 1930, avant même que les premiers ordinateurs ne voient le jour : certains problèmes sont en effet *indécidables* et aucun algorithme ne peut y venir à bout. La mise en évidence de cette forme extrême de complexité algorithmique repose sur une formalisation de la notion d'ordinateur (la *machine de Turing*) qui, bien qu'essentielle à un traitement rigoureux des limites de la calculabilité, sera ici éludée. On se contentera pour la suite de définir un ordinateur comme une machine capable d'effectuer des *algorithmes*, c'est-à-dire de suivre de façon séquentielle une suite d'instructions élémentaires.

Dans les cas où l'impossibilité de principe avancée par Turing ne s'applique pas, une impossibilité pratique peut néanmoins apparaître : si le temps mis par l'algorithme pour renvoyer une réponse dépasse certaines bornes, le problème est dans les faits insoluble. Attribuer un sens précis à cette idée intuitive requiert là encore d'introduire un formalisme qui, notamment, définisse le moment à partir duquel un temps de résolution cesse d'être acceptable. L'étude des origines de la complexité algorithmique associée à cette

limite « pratique » des ressources temporelles étant un des objets de cette thèse, une présentation sommaire de ce formalisme est fournie dans les sections suivantes. Cette présentation repose sur les *problèmes d'optimisation combinatoires*, une classe de problèmes décidables pour lesquels les temps de résolution des algorithmes connus peuvent varier, d'un problème à l'autre, de façon spectaculaire.

1.2 Optimisation combinatoire

Un problème d'optimisation est défini par un ensemble $\mathcal{I}$ d'*instances*. Chaque instance $I \in \mathcal{I}$ consiste en un couple $(\mathcal{C}_I, E_I)$ formé d'un ensemble $\mathcal{C}_I$ de *solutions possibles* et d'une *fonction de coût*, $E_I : \mathcal{C}_I \to \mathbb{R}$. Pour chaque instance I, le problème consiste à trouver une *solution optimale* $\sigma \in \mathcal{C}_I$ telle que $E_I[\sigma] \leq E_I[\tau]$ pour tout $\tau \in \mathcal{C}_I$.

La situation à laquelle toute la suite se limite est celle où l'ensemble des solutions possibles $\mathcal{C}_I$ est fini, auquel cas les problèmes d'optimisation sont qualifiés de *combinatoires*. Ces problèmes sont, par nature, décidables, un algorithme naïf consistant à évaluer successivement le coût de toutes les solutions possibles pour retenir finalement celle de plus bas coût. Le problème du matching bipartie, déjà évoqué en introduction, fournit un exemple de problème d'optimisation combinatoire :

Matching bipartie : Une instance I est spécifiée par un entier N et un ensemble $\{c_{ij}\}_{(i,j)\in\{1,\ldots,N\}^2}$ de réels positifs. Les solutions possibles sont les permutations $\pi : \{1,\ldots,N\} \to \{1,\ldots,N\}$ et le coût qui leur est associé est $E_I[\pi] = \sum_{i=1}^{N} c_{i\pi(i)}$.

Une formulation alternative du matching bipartie consiste à paramétriser chaque permutation π par un ensemble $\{\sigma_{ij}\}_{(i,j)\in\{1,\ldots,N\}^2}$ à valeurs dans $\{0,1\}$, satisfaisant les contraintes

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N} \sigma_{ij} &= 1 \quad \forall j \in \{1,\ldots,N\}, \\ \sum_{j=1}^{N} \sigma_{ij} &= 1 \quad \forall i \in \{1,\ldots,N\}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Le coût à minimiser s'écrit alors $E[\{\sigma_{ij}\}] = \sum_{ij} c_{ij}\sigma_{ij}$.

Une généralisation du matching bipartie, dont on verra qu'elle diffère par la complexité algorithmique, est le matching d-partie, où d est un entier ≥ 3.

Matching d-partie : Une instance I est spécifiée par un entier N et un ensemble $\{c_a\}_{a\in\{1,\dots,N\}^d}$ de réels positifs. Les solutions possibles sont des $(d-1)$-uplets de permutations $\pi_i : \{1,\dots,N\} \to \{1,\dots,N\}$, $i \in \{1,\dots,d-1\}$, et le coût qui leur est associé est $E_I[\{\pi_i\}] = \sum_{i=1}^{N} c_{i\pi_1(i)\dots\pi_{d-1}(i)}$.

Cette généralisation admet également une formulation algébrique,

$$\begin{aligned} &E_I[\{\sigma_a\}] = \sum_a c_a\sigma_a, \\ &\sigma_a \in \{0,1\} \quad \forall a \in \{1,\dots,N\}^d, \\ &\sum_{a\in i} \sigma_a = 1, \quad \forall i. \end{aligned} \tag{1.2}$$

La notation $a \in i$, reprise par la suite, signifie que i est un élément de la *clause* a, qui est elle-même ici un d-uplet, de la forme $a = (i_1,\dots,i_d)$.

1.3 Algorithmes et complexité

Une mesure naturelle de performance pour un algorithme est le temps mis pour retourner une réponse. Indépendamment de l'ordinateur sur lequel il est implémenté, le temps peut être compté en terme du nombre d'opérations élémentaires effectuées par l'algorithme. Pour obtenir une mesure pertinente de l'efficacité d'un algorithme, ce temps de résolution est rapporté à la taille de l'instance. La définition de la taille se fait à partir de la longueur de la suite de symboles nécessaire à encoder l'instance ; dans le cas du matching, où il s'agit de lister l'ensemble des $\{c_a\}$, il faut ainsi $N^d\ell$ symboles, où ℓ correspond au nombre de symboles nécessaire pour coder un des c_a.

Le temps de résolution d'un algorithme varie d'une instance à l'autre au sein d'un même problème d'optimisation, et une définition commode, dont la pertinence sera discutée plus bas, consiste à définir la complexité d'un algorithme par le plus grand de ces temps (critère du *pire des cas*). La taille N des instances est prise en compte en définissant la complexité d'un algorithme comme la façon dont ce temps croît en fonction de N. Suivant ce critère, un algorithme est considéré efficace si ce taux de croissance est asymptotiquement borné par un polynôme en N ; l'algorithme est alors dit *polynômial* et sa complexité est notée $O(N^a)$ où a correspond au degré dominant du polynôme. Dans le cas contraire, l'algorithme est dit *exponentiel*, signifiant, qu'en pratique, il n'est utilisable que sur des instances de petite taille. De ce

point de vue, les meilleurs algorithmes connus pour résoudre les problèmes de matching présentent des complexités très différentes : pour le cas bipartie, la « méthode hongroise » [PS82] fournit un algorithme de complexité $O(N^3)$, tandis que pour les cas d-partis avec $d \geq 3$, seuls des algorithmes exponentiels sont connus. Comprendre si une telle différence provient d'un manque d'imagination ou de la nature profonde des problèmes est une question fondamentale pour laquelle aucune réponse définitive n'est connue.

NP-complétude

À l'instar des matchings d-partie avec $d \geq 3$, beaucoup de problèmes d'optimisation combinatoires n'ont pas d'algorithme polynômial connu, et les efforts considérables consentis pour en obtenir suggèrent qu'il n'en sera jamais trouvé. La théorie de la *NP-complétude* présentée ci-dessous résume ce constat d'échec en une conjecture bien posée.

De même que le temps, l'espace est, pour tout calcul pratique, une ressource limitée. Ainsi, représenter chaque instance par l'ensemble des solutions possibles est certainement d'un coût rédhibitoire en terme de mémoire dès que la taille de l'instance devient grande. On suppose donc plutôt que les solutions possibles et leur coût sont implicitement déterminés par un algorithme $\mathcal{A}$ capable de déterminer si une solution potentielle σ est possible ($\sigma \in \mathcal{C}$ ou non), et dans l'affirmative, de calculer son coût $E[\sigma]$.

Le problème calculatoire associé à une instance d'un problème d'optimisation combinatoire consiste à trouver une solution optimale. Cette *version optimisation* peut être relaxée en une *version évaluation*, qui réclame seulement la valeur du coût optimal. Une troisième version est la *version décision*, où, étant donné un entier L, on demande s'il existe une solution possible $\sigma \in \mathcal{C}$ telle que $E[\sigma] \leq L$; la réponse est alors soit positive, et l'instance est dite *satisfaisable*, ou négative, et l'instance est dite *non-satisfaisable*. Chacune de ces version est plus simple que la précédente, et, en procédant par dichotomie, on peut aussi facilement, c'est-à-dire en temps polynômial, remonter d'une solution du problème de décision à celle du problème d'optimisation.

La classification traditionnellement opérée en théorie de la complexité algorithmique se fait au niveau des problèmes de décision. Ainsi la *classe P* rassemble tous les problèmes de décision qui peuvent être résolus par un algorithme en temps polynômial ; elle définit les problèmes (relativement) faciles. Un élément de la classe P est par exemple le matching bipartie. La *classe NP* (pour *Non-deterministic Polynomial*) est une classe plus riche, qui, par

définition, englobe tout problème de décision dont les instances satisfaisables admettent un *certificat concis*, c'est-à-dire dont on peut vérifier en un temps polynômial qu'elles sont satisfaisable à partir d'une solution σ. Pour les problèmes de décision associés à un problème d'optimisation, tel est le cas dès que l'algorithme $\mathcal{A}$ est lui-même polynômial. Pour les problèmes de matching, de tels algorithmes polynômiaux sont réalisables à partir des formules (1.2), de sorte que les versions décisions des matchings d-partie appartiennent à la classe NP. Clairement, $P \subset NP$, puisqu'un algorithme de résolution polynômial fournit un certificat concis. La question de savoir si P est un sous ensemble strict de NP formalise la question posée au début de cette section : certains problèmes sont-ils vraiment plus difficiles que d'autres ? $P \neq NP$ semble l'alternative la plus vraisemblable, mais une preuve formelle reste à ce jour un défi mathématique majeur.

Un aspect essentiel de la classe NP est l'existence d'une sous-classe de problèmes, dits *NP-complets*, dont chaque élément résume à lui seul la complexité de la classe NP toute entière. La définition de cette classe est fondée sur le concept de *réduction polynômiale* : on dit d'un problème de décision $\mathcal{P}_1$ qu'il se réduit polynômialement à un second problème de décision $\mathcal{P}_2$ si, par un algorithme polynômial, on peut transformer une instance I_1 satisfaisable (respectivement, non satisfaisable) de $\mathcal{P}_1$ en une instance satisfaisable (respectivement, non satisfaisable) I_2 de $\mathcal{P}_2$. Un problème de décision NP est alors dit NP-complet si tout problème dans NP peut se réduire polynômialement à lui.

Cette définition a un sens car il peut être montré que la classe NP-complète est effectivement non vide (*théorème de Cook*). De nombreux problèmes NP sont en fait connus pour être NP-complets, dont notamment les problèmes de matching d-partis lorsque $d \geq 3$. En conséquence, exhiber un algorithme polynômial pour le matching tripartie ($d = 3$) serait suffisant pour prouver $P = NP$, et donc résoudre du même coup en temps polynômial l'ensemble des problèmes NP.

1.4 Critiques de la théorie standard

La théorie de la NP-complétude présentée ci-dessus constitue une des tentatives les plus abouties de formalisation de la notion intuitive de difficulté algorithmique. Comme toute théorisation mathématique d'un phénomène « réel » cependant, ses principes sont largement ouverts à la critique.

Une première critique peut porter sur la définition même d'un problème d'optimisation comme ensemble d'instances, alors que tout problème pratique concerne inévitablement une instance particulière. Du point de vue adopté ci-dessus, fondé sur le temps mis par un algorithme pour résoudre une instance, ce recourt est incontournable : pour chaque instance donnée, il existe toujours en effet un algorithme *ad hoc*, dans lequel est directement codée la solution optimale, capable de résoudre l'instance en temps polynômial.

Une deuxième critique peut concerner le choix du temps mis à résoudre exactement une instance comme critère exclusif de complexité algorithmique. Ce choix conduit en effet à subsumer sous une unique classe, la classe NP, une variété de problèmes, qui, dès lors qu'une propriété autre que la résolution exacte est considérée, se révèle d'une grande diversité. Le degré d'*approximabilité*, c'est-à-dire la facilité avec laquelle une solution approchée à la solution optimale peut être obtenue, varie par exemple considérablement d'un problème à l'autre, à l'intérieur de la classe NP.

Une troisième critique est relative au choix de la dichotomie polynômial *vs* exponentiel comme critère de démarcation entre problèmes faciles et difficiles. Dans la pratique en effet, des algorithmes polynômiaux peuvent avoir des performances très variables et, pour des tailles N modérées, il se peut même qu'un algorithme exponentiel surpasse en efficacité un algorithme polynômial (pour le problème de programmation linéaire par exemple, l'algorithme du *simplex* est exponentiel dans le pire des cas mais surpasse dans la pratique l'algorithme de l'*ellipsoïde* dont il est pourtant prouvé qu'il est polynômial [PS82]). Le choix est cependant motivé par les propriétés de stabilité de la classe polynômiale, qui permettent de s'affranchir des détails de l'implémentation (dont seule une amélioration d'ordre polynômiale peut être espérée) ; ce critère apparaît donc inévitable si une théorie fondée sur une idéalisation de la notion d'ordinateur (la machine de Turing) veut présenter un certain degré d'universalité.

Une quatrième critique porte sur le choix du pire des cas comme représentant de la complexité de la totalité d'une classe d'instances. En effet, il est possible que seul un petit nombre d'instances soit effectivement difficiles tandis que la majorité, dont celles rencontrées en pratique, est soluble en temps polynômiale. Une alternative naturelle est de substituer un temps moyen au temps maximal ; ceci a toutefois l'inconvénient d'exiger un nouveau choix arbitraire, celui d'une mesure sur l'ensemble des instances, dont on peut à nouveau discuter la pertinence vis-à-vis des problèmes rencontrés en pratique.

L'approche fondée sur la physique statistique développée ci-après répond en partie à ces critiques. En adoptant comme critère de difficulté une propriété intrinsèque de l'instance (la présence de « phases vitreuses »), elle permet à la fois de s'affranchir de la notion de temps polynômial et d'envisager la complexité d'une instance donnée. De plus, lorsqu'un ensemble d'instance est considéré, elle conduit naturellement à s'intéresser au cas moyen (pour la mesure uniforme sur l'ensemble), identifié au cas *typique*, plutôt qu'au pire des cas. Cette approche n'est cependant certainement pas elle-même à exempte de défauts : elle ne fournit en particulier aucune information directe sur le comportement des algorithmes pour les problèmes qu'elle considère difficiles.

Notes et références

Les références utilisées pour écrire ce résumé de théorie de la complexité algorithmique sont [PS82, Pap94] ; une présentation plus détaillée que ce qui précède mais d'un niveau équivalent peut être trouvée dans [Mer02].

Le problème du matching bipartie est présenté dans [PS82], où figure également une description de la méthode hongroise pour le résoudre en temps polynômial. La généralisation au cas multipartie est due à Pierskalla [Pie68]. La présentation de ces problèmes sert à la fois d'illustration au concepts généraux et d'introduction aux travaux présentés dans les articles [MMR04, MMR05].

Les critiques adressées à la théorie de la NP-complétude ne sont pas les premières ; certaines sont mentionnées dans [Pap94].

Chapitre 2

Physique des systèmes désordonnés

La physique statistique des systèmes désordonnés fournit un cadre pour analyser les problèmes d'optimisation. Ses principes sont exposés ici sous un angle mettant en relief le rôle fondamental joué par les grandes déviations.

2.1 Principes de la physique statistique

Le propos de la physique statistique est de dériver les propriétés globales d'un système à partir des propriétés locales de ses constituants élémentaires. Son objectif initial était ainsi d'expliquer comment les caractéristiques macroscopiques de la matière émerge du comportement microscopique des atomes qui la composent. Les principes sur lesquels elle se fonde s'avèrent cependant largement indépendants de la nature du système étudié, et s'appliquent en particulier aux problèmes d'optimisation.

En toute généralité, un *système* est spécifié par la donnée de N *variables dynamiques*, notées σ_i, avec $i = 1, \ldots, N$; pour un système matériel, $\sigma_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$ décrit par exemple la position et la vitesse de l'atome i. Pour chaque i, les valeurs accessibles à σ_i sont sujettes aux *contraintes* que lui imposent les autres constituants $j \neq i$; ainsi un atome i peut être libre d'occuper n'importe quelle position $\mathbf{r}_i$ dans un volume donné, à l'exclusion toutefois d'une position déjà occupée par un autre atome : $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > d$, $\forall j$, où d est le diamètre des atomes. Une *configuration* σ correspond à la donnée des valeurs de l'ensemble des variables dynamiques du système, $\sigma \equiv \{\sigma_i\}_{i \in \{1,\ldots,N\}}$ et résume, à un instant donné, toute l'information nécessaire à la description du système. L'ensemble $\mathcal{C}$ des configurations permises forme *l'espace des*

phases, à l'intérieur duquel s'effectue l'évolution temporelle du système. Les configurations se distinguent fondamentalement par leur *énergie*, décrite par la fonction $E : \mathcal{C} \to \mathbb{R}$; ainsi pour un ensemble d'atomes, la valeur $E[\sigma]$ de l'énergie rend compte des interactions entre atomes dans la configuration σ : deux particules de même charge électrique contribuent par exemple davantage à l'énergie totale lorsqu'elles sont proches qu'éloignées.

Dans le cadre des problèmes d'optimisation, chaque instance I définit un système particulier, pour lequel, comme suggéré par les notations, l'énergie s'identifie avec la fonction de coût. Ainsi pour le matching d-partie, les variables dynamiques $\sigma_a \in \{0, 1\}$, présentes sur chacune des N^d clauses, peuvent être interprétées comme indiquant la présence ($\sigma_a = 1$) ou l'absence ($\sigma_a = 0$) d'une particule sur la clause a. Ces particules sont soumises aux contraintes (interactions) exprimées par les équations (1.2). La difficulté du problème peut être attribuée aux corrélations entre les σ_a qu'induisent ces contraintes.

Plusieurs idées essentielles de la physique statistiques se dégagent déjà d'un exemple simple, dépourvu de corrélation. Le système choisi ici pour servir d'illustration est spécifié par N variables σ_i (*spins*) pouvant prendre indépendamment, c'est-à-dire sans contrainte, q valeurs différentes, $\sigma_i \in \{1, \ldots, q\}$, où q est un entier ≥ 2. Chacun de ces états $\tau \in \{1, \ldots, q\}$ est associé une énergie élémentaire $\mathcal{E}[\tau]$, de sorte que l'énergie totale d'une configuration σ est donnée par

$$E[\sigma] = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{E}[\sigma_i]. \tag{2.1}$$

Une interprétation possible est le gain total d'un joueur après N lancés de dé, si chacune des $q = 6$ faces est associée à un gain, $\mathcal{E}[\tau] > 0$, ou une perte, $\mathcal{E}[\tau] < 0$. En termes plus géométriques, avec $q = 2$ et $\mathcal{E}[2] = -\mathcal{E}[1]$, l'énergie correspond aussi à la position d'un marcheur sur une droite après N pas, chacun pouvant être dans une des deux directions.

Une question posée par ces systèmes concerne leurs propriétés les plus probables : Quel gain peut espérer le joueur ? Où le marcheur se trouve-t-il typiquement après N pas ? La physique statistique fonde essentiellement ses réponses sur la loi des grands nombres, qui concerne la *limite thermodynamique* où la taille N du système tend vers l'infini. L'intérêt se porte alors sur la *densité* d'énergie du système, $\epsilon = E/N$, qui reste finie dans la limite $N \to \infty$ où l'énergie *extensive* donnée par (2.1) diverge.

Dans l'exemple considéré, la valeur de l'énergie ne dépend que des nombres N_τ de spins dans chacun des états $\tau \in \{1, \ldots, q\}$. La probabilité de ces différents nombres lorsqu'une configuration σ est choisie uniformément au hasard parmi toutes celles possibles s'exprime au moyen de la formule du multinôme,

$$\mathbb{P}_N[(N_1, \ldots, N_q)] = \binom{N}{N_1 \ldots N_q} q^{-N} \equiv \frac{N!}{N_1! \ldots N_q!} q^{-N}. \tag{2.2}$$

Le comportement asymptotique pour $N \to \infty$ du multinôme est fournie par la fonction *entropie de Shannon* $\mathcal{H}_q(x_1, \ldots, x_q)$, définie pour $x_1 + \cdots + x_q = 1$, *via* la formule de Stirling, par

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \binom{N}{Nx_1 \ldots Nx_q} \equiv \mathcal{H}_q(x_1, \ldots, x_q) = -\sum_{\tau=1}^{q} x_\tau \ln x_\tau. \tag{2.3}$$

Ce type de relation asymptotique, fréquemment rencontré dans la suite, sera désormais noté

$$\binom{N}{N_1 \ldots N_q} \asymp e^{N\mathcal{H}(N_1/N, \ldots, N_q/N)}. \tag{2.4}$$

On obtient ainsi pour la probabilité d'une configuration σ caractérisée par $x \equiv (x_1, \ldots, x_r)$ l'expression

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}_N[(Nx_1, \ldots, Nx_q)] \asymp e^{-ND_q(x)}, \\ &D_q(x) \equiv \ln q - \mathcal{H}_q(x). \end{aligned} \tag{2.5}$$

La fonction $D_q(x)$ est un premier exemple de *fonction de grandes déviations*, ici relative à $x = (x_1, \ldots, x_q)$; comme toute fonction de grandes déviations, elle est conjuguée à une *fonction entropie*, ici $\mathcal{H}_q(x)$, qui contient une information équivalente.

La fonction de grandes déviations $D_q(x)$ renseigne en particulier sur la densité d'énergie la plus probable $\bar{\epsilon}$, dite *typique*. La densité d'énergie ϵ d'une configuration s'exprime en effet en terme de x, $\epsilon = \epsilon(x) = \sum_\tau x_\tau \mathcal{E}[\tau]$, de sorte que sa valeur typique est déterminée par le x le plus probable, soit, d'après (2.5) celui qui minimise $D_q(x)$. Or $D_q(x) \geq 0$, avec un minimum nul atteint en l'unique point où $x = (1/q, \ldots, 1/q)$, d'où

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{q} \sum_{\tau=1}^{q} \mathcal{E}[\tau]. \tag{2.6}$$

Chaque état $\tau \in \{1, \ldots, q\}$ étant équiprobable, on obtient ainsi une moyenne des différentes énergies élémentaires. Cependant, l'analyse précédente décrit

plus que la seule valeur typique $\bar{\epsilon}$: la fonction de grandes déviations D_q fournit également les probabilités des configurations *atypiques*, dont la caractérisation est essentielle dès lors qu'une information supplémentaire sur le système est prise en compte.

En effet, toutes les configurations ont été supposées jusque là équiprobables (mesure uniforme sur $\mathcal{C}$), mais pour un système physique isolé par exemple, seules les configurations correspondant à une certaine énergie fixée sont réalisables. La question dans ce contexte, dit *microcanonique*, porte alors sur la caractérisation des configurations compatibles avec cette contrainte d'énergie. En termes de jeu de dés, il s'agit d'inférer la proportion la plus probable dans laquelle chacune des faces est apparue, connaissant la valeur du gain total. Les configurations dont la densité d'énergie est fixée à $\epsilon \neq \bar{\epsilon}$ étant atypiques par rapport à la mesure uniforme sur $\mathcal{C}$, leur probabilité est exponentiellement petite. Le taux de décroissance exponentielle de cette probabilité s'obtient par une méthode du col à partir de (2.5),

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_N(\epsilon) &\equiv \mathbb{P}_N\left[(Nx_1,\ldots,Nx_q) : \sum_{r=1}^{q} x_r = \epsilon\right] \\ &= \sum_{\sum_r x_r=\epsilon} \mathbb{P}_N\left[(Nx_1,\ldots,Nx_q)\right] \asymp \sum_{\sum_r x_r=\epsilon} e^{-ND_q(x)} \asymp e^{-NL(\epsilon)}\end{aligned} \tag{2.7}$$

où l'exposant $L(\epsilon)$, donné par

$$L(\epsilon) = \min_{\sum_r x_r=\epsilon} D_q(x), \tag{2.8}$$

définit la fonction de grandes déviations de la densité d'énergie ϵ. Elle est associée à une fonction entropie, l'*entropie microcanonique* $s(\epsilon)$,

$$s(\epsilon) = \ln q - L(\epsilon). \tag{2.9}$$

Cette relation constitue pour la statistique de ϵ l'analogue de (2.5) pour celle de x. L'entropie microcanonique s'interprète en terme du nombre de configurations avec densité d'énergie ϵ,

$$\#\{\sigma \in \mathcal{C} : E[\sigma] = N\epsilon\} = \#\{\sigma \in \mathcal{C}\} \times \mathbb{P}_N(\epsilon) \asymp q^N e^{-NL(\epsilon)} \asymp e^{Ns(\epsilon)}, \tag{2.10}$$

où $\#A$ désigne le nombre d'éléments de l'ensemble A.

Dans le cadre des problèmes d'optimisation, l'intérêt se porte sur les configurations atypiques d'énergie minimale. Par définition de ces problèmes cependant, l'énergie minimale E_0, dite *fondamentale*, n'est pas connue mais à

déterminer, ce qui rend l'approche microcanonique inappropriée. Une alternative est fournie par l'approche *canonique*, qui s'introduit naturellement en poursuivant l'étude du modèle sans corrélations. D'après (2.8) en effet, il s'agit de minimiser $D_q(x)$ sous la double contrainte $\sum_\tau x_\tau = 1$ et $\sum_\tau x_\tau \mathcal{E}[\tau] = \epsilon$. La méthode des multiplicateurs de Lagrange permet d'obtenir $L(\epsilon)$ sous forme paramétrique :

$$\begin{aligned} L(\beta, z) &= -\beta\epsilon - \ln z + \ln q, \\ \epsilon &= \frac{1}{z}\sum_\tau \mathcal{E}[\tau] e^{-\beta\mathcal{E}[\tau]}, \\ z &= \sum_\tau e^{-\beta\mathcal{E}[\tau]}. \end{aligned} \tag{2.11}$$

À partir du multiplicateur de Lagrange z, associé à la contrainte de normalisation, il est commode d'introduire un potentiel $\phi_L(\beta)$ définit par $\phi_L(\beta) = -\ln z(\beta) + \ln q$, en terme duquel les équations (2.11) se récrivent

$$\begin{aligned} L(\beta) &= -\beta\epsilon(\beta) + \phi_L(\beta), \\ \epsilon(\beta) &= \frac{\partial}{\partial\beta}\phi_L(\beta). \end{aligned} \tag{2.12}$$

Plus généralement, ce potentiel $\phi_L(\beta)$ est relié à la fonction génératrice

$$Z(\beta) = \mathbb{E}\left[e^{-\beta E[\sigma]}\right] = \sum_{\sigma\in\mathcal{C}} e^{-\beta E[\sigma]}, \tag{2.13}$$

aussi appelée *fonction de partition* en physique statistique. Elle s'écrit aussi en termes de l'entropie microcanonique $s(\epsilon)$,

$$Z(\beta) \simeq \int e^{N[s(\epsilon)-\beta\epsilon]} d\epsilon. \tag{2.14}$$

Dans la limite $N \to \infty$ où l'intégrale s'évalue par la méthode du col,

$$Z(\beta) \asymp e^{-N\phi_s(\beta)}, \tag{2.15}$$

avec le potentiel $\phi_s(\beta)$ défini par

$$\begin{aligned} \phi_s(\beta) &= \beta\epsilon^* - s(\epsilon^*), \\ \beta &= \frac{\partial}{\partial\epsilon} s(\epsilon = \epsilon^*). \end{aligned} \tag{2.16}$$

où l'énergie est elle-même fonction de β, $\epsilon^* = \epsilon^*(\beta)$. Dans l'exemple, $Z(\beta) = (z(\beta)/q)^N$ de sorte que $\phi_s(\beta)$ est directement relié à $\phi_L(\beta)$ par $\phi_s(\beta) =$

$\phi_L(\beta) - \ln q$; le potentiel $\phi_s(\beta)$ est dans toute la suite préféré à l'*énergie libre* $f(\beta) = \phi_s(\beta)/\beta$ qui est plus traditionnellement considérée en physique statistique [$\phi_M(\beta) = -\phi_s(\beta)$ est aussi parfois appelé *potentiel de Massieu*]. Il décrit $s(\epsilon)$ par une transformation de Legendre analogue à celle liant $\phi_L(\beta)$ à $L(\epsilon)$,

$$\begin{aligned} s(\beta) &= \beta\epsilon(\beta) - \phi_s(\beta), \\ \epsilon(\beta) &= \frac{\partial}{\partial\beta}\phi_s(\beta). \end{aligned} \tag{2.17}$$

Dans le contexte canonique, le paramètre fixé est donc β et non plus la densité d'énergie ϵ. Cette situation correspond physiquement à un système en contact thermique avec un second système auprès duquel il peut échanger de l'énergie, un contexte où β s'identifie avec la *température inverse*, $\beta = 1/T$. Les relations (2.16) indiquent, dans la limite thermodynamique, une correspondance avec la situation microcanonique où l'énergie est fixée à ϵ^*, déterminée en fonction de β par $\beta = \partial_\epsilon s(\epsilon = \epsilon^*)$; cette équivalence tient tant que l'approximation du col est justifiée, ainsi que discuté plus avant ci-après.

Dans l'ensemble canonique, la définition des potentiels ϕ_L ou ϕ_s en terme de la fonction de partition (2.13) indique que les différentes configurations $\sigma \in \mathcal{C}$ ont un poids, dit de Boltzmann, donné par

$$\mathbb{P}[\sigma] = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E[\sigma]}. \tag{2.18}$$

La limite « haute température », $\beta = 0$, revient alors à la distribution uniforme sur $\mathcal{C}$ considérée plus haut :

$$\epsilon^*(\beta = 0) = \bar{\epsilon}. \tag{2.19}$$

À l'inverse, la limite « basse température », $\beta = \infty$, fait porter tout le poids sur les configurations fondamentales et correspond à la solution au problème d'optimisation,

$$\epsilon_0 = \epsilon^*(\beta = \infty) = \lim_{\beta\to\infty} [\frac{\partial}{\partial\beta}\phi_s(\beta)] = \lim_{\beta\to\infty} [\phi_s(\beta)/\beta], \tag{2.20}$$

qui vaut pour le modèle étudié $\epsilon_0 = \min_\tau \mathcal{E}[\tau]$. Ainsi, les solutions du problème d'optimisation, d'énergie minimale ϵ_0, correspondent à un cas extrême de grandes déviations par rapport aux configurations d'énergie typique $\bar{\epsilon}$.

2.2 Mathématique des systèmes décorrélés

Les systèmes sans corrélation, dont un exemple vient d'être traité, constituent une référence à laquelle rapporter le comportement des systèmes avec contraintes. Ils sont aussi fondamentaux en théorie des probabilités, dont quelques uns des résultats les plus importants sont présentés ici. Pour la clarté de l'exposé, ces résultats sont énoncés sous des formes affaiblies destinées à mettre en lumière les liens avec la physique statistique tout en introduisant un minimum de formalisme mathématique.

L'archétype du système sans corrélation a pour énergie la somme de N variables aléatoires $\{X_i\}_{i\in\{1,\dots,N\}}$ *indépendantes et identiquement distribuées* (i.i.d.) à valeur dans $\mathbb{R}$ (pour faire simple),

$$E_N = \sum_{i=1}^{N} X_i. \tag{2.21}$$

Comme pour (2.1), E_N est une fonction, mais, suivant l'usage en mathématiques, la dépendance en la configuration $\sigma \equiv \{X_i\}_i$ est omise. Si $\rho(x)$ désigne la distribution commune des $\{X_i\}_{i\in\{1,\dots,N\}}$, on note l'*espérance mathématique*, c'est-à-dire la moyenne, $\mathbb{E}[f(X)] \equiv \int dx\rho(x)f(x)$.

Le résultat essentiel, sur lequel s'appuie la physique statistique pour décrire par un nombre restreint de paramètres les systèmes constitués de beaucoup d'éléments, est la *loi des grands nombres.*

Loi (faible) des grands nombres : Soit E_N donné par (2.21). Si $|\mathbb{E}[X]| < \infty$ alors E_N converge en probabilité vers $\mathbb{E}[X]$, c'est-à-dire

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \lim_{N\to\infty} \mathbb{P}[|\epsilon_N - \mathbb{E}[X]| > \varepsilon] = 0, \tag{2.22}$$

où $\epsilon_N \equiv E_N/N$.

Comme illustré par l'exemple de la section précédente, la probabilité des écarts de la densité d'énergie $\epsilon_N = E_N/N$ à la valeur typique $\bar{\epsilon} = \mathbb{E}[X]$ intervient également dès lors qu'une température non nulle ($\beta < \infty$) est envisagée. Ces probabilités exponentiellement petites sont quantifiées au moyen de fonctions de grandes déviations dont la définition repose sur l'existence d'un *principe de grandes déviations.*

Principe de grandes déviations : Une suite $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ de variables aléatoires à valeurs dans $\mathbb{R}$ satisfait le principe de grandes déviations, avec

fonction de grandes déviations $L : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ \cup \{\infty\}$, si $\forall M \geq 0$, $L^{-1}(]-\infty, M])$ est compact et, $\forall A \subset \mathbb{R}$,

$$-\inf_{\epsilon \in \mathring{A}} L(\epsilon) \leq \liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N}\mathbb{P}_N(\epsilon_N \in A) \leq \limsup_{N\to\infty} \frac{1}{N}\mathbb{P}_N(\epsilon_N \in A) \leq -\inf_{\epsilon \in \bar{A}} L(\epsilon), \tag{2.23}$$

où $\mathring{A}$ et $\bar{A}$ désignent respectivement l'intérieur et l'adhérence de A.

De façon moins formelle, cela signifie que la probabilité que la variable aléatoire ϵ_N adopte la valeur ϵ se comporte comme

$$\mathbb{P}_N(\epsilon_N = \epsilon) \asymp e^{-NL(\epsilon)}, \tag{2.24}$$

de sorte qu'à l'ordre dominant

$$\mathbb{P}_N(\epsilon_N \in A) \asymp e^{-N \inf_{\epsilon \in A} L(\epsilon)}. \tag{2.25}$$

En particulier, le théorème de Cramér énoncé ci-après affirme que les sommes de variables aléatoires satisfont le principe de grandes déviations. Dans ce cas, celui-ci indique donc que la probabilité d'obtenir une valeur qui diffère extensivement de la prédiction de la loi des grands nombres, soit $\epsilon_N = \epsilon \neq \mathbb{E}[X]$, diminue exponentiellement quand N augmente, avec selon (2.24) un exposant $L(\epsilon)$. Ce dernier définit la fonction de grandes déviations qui vérifie notamment $L(\epsilon = \mathbb{E}[X]) = 0$ et $L(\epsilon) > 0$ pour $\epsilon \neq \mathbb{E}[X]$ (voir la figure 2.1 pour une illustration) ; $L(\epsilon)$ est donné exactement par le théorème suivant.

Théorème de Cramér : Soit la suite $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ donnée par (2.21) *via* $\epsilon_N = E_N/N$, pour laquelle on suppose $\mathbb{E}[e^{-\beta X}] < \infty$ pour tout $\beta \in \mathbb{R}$. Alors $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ satisfait le principe de grandes déviations avec fonction de grandes déviations L définie comme transformée de Legendre du potentiel $\phi_L(\beta) \equiv -\ln \mathbb{E}[e^{-\beta X}]$,

$$L(\epsilon) = \sup_{\beta\in\mathbb{R}}[-\beta\epsilon + \phi_L(\beta)]. \tag{2.26}$$

Ce résultat, illustré sur la figure 2.1, a en fait été « démontré » explicitement dans le cas des variables discrètes au cours du traitement du modèle défini par (2.1). Cet exemple met également en lumière l'interprétation de $\phi_L(\beta)$ et son lien avec le potentiel thermodynamique $\phi_s(\beta)$. Ce théorème s'inscrit donc naturellement dans le contexte canonique ; en particulier, la limite « haute température », $\beta = 0$, fournit le cas typique, tel que prédit

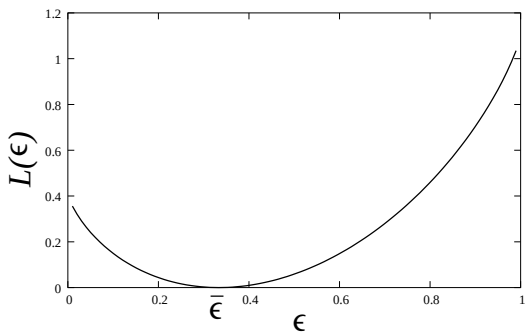

FIG. 2.1 – *Fonction de grandes déviations* pour $\epsilon_N = (\sum_{i=1}^N X_i)/N$ avec des X_i i.i.d. de distribution $B(x) = (1/3)\delta(x-1) + (2/3)\delta(x)$. La courbe représentée s'obtient analytiquement soit en appliquant le théorème de Cramér, soit en effectuant un calcul combinatoire direct. Le minimum à $\bar{\epsilon} = 1/3$ définit la valeur typique.

par la loi des grands nombres.

L'attention portée aux problèmes sans corrélation trouve sa justification dans sa robustesse vis-à-vis de l'introduction de faibles corrélations. Le théorème suivant assure en effet que, sous des conditions assez faibles, les conclusions du théorème du Cramér sont préservées même quand l'indépendance des variables est abandonnée.

Théorème de Gärtner-Ellis : Soit une suite de variables aléatoires $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ à valeur dans $\mathbb{R}$. Sous l'hypothèse que le potentiel $\phi_L(\beta)$ défini par

$$\phi_L(\beta) = -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \mathbb{E}[e^{-\beta N \epsilon_N}] \tag{2.27}$$

existe, est fini et différentiable pour tout $\beta \in \mathbb{R}$, la suite $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ satisfait le principe de grandes déviations avec pour fonction de grandes déviations la transformée de Legendre $L(e)$ de $\phi_L(\beta)$ donnée par (2.26).

Lorsque les conditions de ce théorème sont satisfaites, la fonction de grandes déviations est convexe et présente un unique minimum, correspondant à la valeur typique. Ces propriétés ne sont cependant pas les seules possibles : en présence de fortes corrélations, les conditions du théorèmes de Gärtner-Ellis peuvent ne plus être remplies et la fonction de grandes déviations ne pas être convexe, voire présenter des minima multiples. Loin d'être anecdotique, une telle violation de la loi des grands nombres est d'un intérêt fondamental en physique statistique puisqu'elle signale la présence d'une *transition de phase*.

Afin d'illustrer cette possibilité sur un exemple élémentaire, on considère un système caricaturalement corrélé, où $E_N = \sum_{i=1}^N X_i$ avec toutes les variables X_i conditionnées à la valeur de la première : X_1 est tiré avec probabilité 1/2 soit selon la distribution de Bernouilli $B_1 = (1/2)(\delta_{a_1} + \delta_{a_1+b_1})$, soit selon $B_2 = (1/2)(\delta_{a_2} + \delta_{a_2+b_2})$ puis tous les X_i, $i \geq 2$, sont tirés indépendamment entre eux mais suivant la même distribution que X_1. Par des calculs combinatoires élémentaires, il vient

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}_N(\epsilon) \asymp \frac{1}{2}\left[e^{-NL_1(\epsilon)} + e^{-NL_2(\epsilon)}\right] \asymp e^{-NL(\epsilon)}, \\ &L(\epsilon) = \min_\epsilon(L_1(\epsilon), L_2(\epsilon)), \end{aligned} \tag{2.28}$$

avec $L_i(\epsilon) = L((\epsilon - a_i)/b_i)$, $i = 1, 2$, où $L(x) = x\ln(2x) + (1-x)\ln(2(1-x))$ correspond à la fonction de grandes déviations d'une somme de variables aléatoires i.i.d. de distribution $B = (1/2)[\delta_0 + \delta_1]$. La figure 2.2 montre un exemple de fonction de grandes déviations $L(\epsilon)$ ainsi obtenue : elle est non seulement non convexe mais possède même deux minima (la loi des grands nombres ne s'applique donc pas). Si on se place dans l'ensemble canonique, il s'agit de calculer pour β donné le potentiel $\phi_L(\beta)$ donné par

$$\begin{aligned} &e^{-N\phi_L(\beta)} = \int e^{-N[L(\epsilon)+\beta\epsilon]} d\epsilon, \\ &\phi_L(\beta) = \min_\epsilon[\beta\epsilon + L(\epsilon)]. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Graphiquement, cela revient à prendre pour chaque β la droite dite *d'appui* de pente β située sous $L(\epsilon)$ et d'abscisse maximale. Dans l'exemple de la figure 2.2, la droite d'appui est toujours tangente à $L(\epsilon)$ en un seul point, sauf pour une valeur particulier β_c de β où elle la touche en deux points. En termes physiques, la température critique β_c marque une transition de phase, dite du *premier ordre* (car les dérivées du potentiel sont discontinues), entre un régime haute température $\beta < \beta_c$ où le système est dans la phase 2, dictée par la loi B_2, et un régime basse température $\beta > \beta_c$ où il est dans la phase 1, dictée par B_1 ; précisément à β_c où $\beta\epsilon_1 + L_1(\epsilon_1) = \beta\epsilon_2 + L_2(\epsilon_2)$, le système est en général dans un mélange des deux phases. Si on calcule la transformée de Legendre de ϕ_L, on obtient alors non pas $L(\epsilon)$ mais seulement son enveloppe convexe : en présence d'une transition du premier ordre, les ensembles microcanoniques et canoniques sont non-équivalents, ce qui se traduit mathématiquement par l'inapplicabilité du théorème de Gärtner-Ellis.

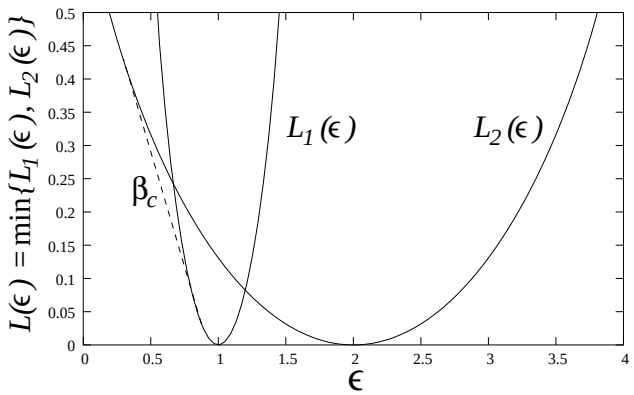

FIG. 2.2 – Exemple de fonction de grandes déviations non convexe et possédant deux minima : elle est donnée par le minimum des fonctions $L_1(\epsilon)$ et $L_2(\epsilon)$ selon la relation (2.28). La construction de Maxwell qui consiste ici à prendre l'enveloppe convexe de $L(\epsilon)$ est représentée par une droite tiretée, de pente $-\beta_c$.

2.3 Systèmes désordonnés

Appliqué à l'optimisation combinatoire, le formalisme présenté ci-dessus permet de traiter la statistique des configurations $\sigma \in \mathcal{C}$ d'une instance donnée I. Les problèmes d'optimisation étant définis par un ensemble $\mathcal{I}$ d'instances, on souhaite également rendre compte de la statistique relative aux différents $I \in \mathcal{I}$. Si ϵ_I désigne la valeur du fondamental de l'instance I, on peut ainsi s'intéresser à la valeur typique $\bar{\epsilon}$ de ϵ_I vis-à-vis des $I \in \mathcal{I}$. La statistique sur les instances correspond à un « désordre externe », analogue à une distribution des impuretés au sein de différents échantillons de matière, qui se surimpose au « désordre interne », relatif à la thermodynamique d'un échantillon donné pour lequel les impuretés ont des positions figées.

Traiter de ces deux niveaux de statistique requiert essentiellement d'appliquer deux fois, successivement, la procédure présentée ci-dessus pour un seul niveau. Le schéma des calculs, destiné à être reproduit sous diverses formes par la suite, est illustré ici encore par un modèle dépourvu de corrélations. Comme plus haut, on considère ainsi un système dont la densité d'énergie est une somme de termes indépendants, $\epsilon_N = (\sum_i \mathcal{E}_i)/N$, mais, cette fois, la distribution des $\mathcal{E}_i$ est supposée dépendre de i, c'est-à-dire qu'à chaque « site » i est affecté une distribution ρ_i qui lui est spécifique, avec, d'un site à l'autre, une distribution $R(\rho)$ de ces distributions. En termes de jeu de dés, cela correspond à effectuer chaque lancé i avec un nouveau dé dont les probabilités des différentes faces sont décrites par ρ_i, le dé étant lui-même tiré d'un ensemble de dés plus ou moins biaisés, décrit par la distribution

$R(\rho)$; enfin, comme précédemment, chaque face r est associé à un gain ou une perte $\mathcal{E}_r^{(i)}$, qui peut éventuellement aussi dépendre de i.

Si on considère le désordre externe *gelé*, c'est-à-dire les ρ_i fixés pour chaque $i = 1, \ldots, N$, la physique statistique d'un système particulier, noté I, s'étudie en suivant exactement les préceptes déjà énoncés. Ainsi, le nombre de configurations ayant densité d'énergie ϵ, décrit par l'entropie microcanonique $s_I(\epsilon)$, est donné par

$$e^{Ns_I(\epsilon)} = \int \prod_{i=1}^{N} d\mathcal{E}_i \mathcal{E}_i(\mathcal{E}_i)\delta\left(N\epsilon - \sum_{i=1}^{N} \mathcal{E}_i\right). \tag{2.30}$$

À partir de cette formule microcanonique, la température inverse β s'introduit en adoptant une représentation intégrale du delta de Dirac,

$$\begin{aligned} e^{Ns_I(\epsilon)} &= \int d\beta e^{N\beta\epsilon} \prod_{i=1}^{N} \left(\int d\mathcal{E}_i \rho_i(\mathcal{E}_i) e^{-\beta\mathcal{E}_i}\right) \\ &= \int d\beta e^{N[\beta\epsilon - \phi_I(\beta)]}, \end{aligned} \tag{2.31}$$

où $\phi_I(\beta)$ (qui devrait donc être noté $(\phi_s)_I$ selon les notations des sections précédentes ici allégées), vaut

$$\phi_I(\beta) = \langle \phi_I(\beta) \rangle_I = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \ln\left(\int d\mathcal{E}_i \rho_i(\mathcal{E}_i) e^{-\beta\mathcal{E}_i}\right). \tag{2.32}$$

Cette formule, valable pour une instance I donnée, met en évidence la propriété essentielle d'*automoyennage* du potentiel $\phi_I(\beta)$: s'agissant d'une somme de variables aléatoires indépendantes, la loi des grands nombres prédit en effet une concentration autour d'une valeur typique coïncidant avec la valeur moyenne,

$$\bar{\phi}(\beta) = -\int \mathcal{D}\rho R(\rho) \ln\left(\int d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) e^{-\beta\mathcal{E}}\right). \tag{2.33}$$

Au delà de cette valeur typique, on peut ici aussi étudier les grandes déviations en introduisant une température inverse « externe », associée au désordre externe, notée λ. De ce point de vue, et pour une température

inverse interne β fixée, la « densité d'énergie » d'une instance I correspond par définition à $\phi_I(\beta)$. Comme la donnée d'une instance I est équivalente à celle d'une suite $\{\rho_i\}_{i\in\{1,\dots,N\}}$, le nombre d'instances ayant potentiel $\phi(\beta)$ définit une entropie $\mathcal{S}(\phi,\beta)$, avec

$$e^{N\mathcal{S}(\phi,\beta)} = \int \prod_{i=1}^{N} d\rho_i R(\rho_i)\delta\left(N\phi - N\phi_I(\beta)\right). \tag{2.34}$$

En introduisant à nouveau la température inverse λ (au sens thermodynamique, la véritable température inverse externe est $\lambda\beta$) par l'intermédiaire d'une représentation intégrale du delta de Dirac, et en recourant à la définition (2.32) de $\phi_I(\beta)$, on obtient ainsi, en parfaite analogie avec (2.31),

$$e^{N\mathcal{S}(\phi,\beta)} = \int d\lambda e^{N[\lambda\phi-\psi(\lambda,\beta)]}, \tag{2.35}$$

où

$$\psi(\lambda,\beta) = -\ln\left[\int \mathcal{D}\rho R(\rho)\left(\int d\mathcal{E}\rho(\mathcal{E})e^{-\beta\mathcal{E}}\right)^{\lambda}\right]. \tag{2.36}$$

On vérifie sur ce résultat que la limite $\lambda \to 0$ redonne la valeur typique,

$$\bar{\phi}(\beta) = \lim_{\lambda\to 0}\frac{\partial}{\partial\lambda}\psi(\lambda,\beta) = \lim_{\lambda\to 0}\left[\psi(\lambda,\beta)/\lambda\right]. \tag{2.37}$$

Ce genre de relation est en fait à la base d'une méthode générale de calcul des valeurs typiques en présence de désordre, la *méthode des répliques*. En effet, dans les cas moins simples où $\psi(\lambda,\beta)$ n'est pas calculable explicitement pour des λ arbitraires, on peut néanmoins souvent obtenir $\psi(n,\beta)$ pour n entier en considérant n répliques du système, toutes soumises à une même réalisation du désordre externe. Sous réserve de parvenir à extraire des valeurs $\{\psi(n,\beta)\}_{n\in\mathbb{N}}$ la continuation analytique correspondant au potentiel $\psi(\lambda,\beta)$, on obtient ainsi la valeur typique de l'énergie libre en envoyant le nombre de réplique à zéro, $\lambda \to 0$, comme dans la formule (2.37).

Suivant les valeurs de β et λ, la quantité $\psi(\lambda,\beta)$ fournit différents types d'informations. Ainsi, comme expliqué ci-dessus, $\lambda = 0$ décrit les instances typiques, une situation dite *gelée*. Par exemple, dans le contexte des problèmes d'optimisation, le fondamental d'une instance typique est donné par $\lambda = 0$ et $\beta = \infty$. Par opposition, le cas $\lambda = 1$, dit *recuit*, correspond à traiter le désordre externe sur le même plan que le désordre interne, c'est-à-dire à intégrer le choix de l'instance dans les variables dynamiques du système. Cette moyenne, dont le calcul est généralement plus simple que

celui de la moyenne gelée, fournit une borne sur la valeur $\bar{\epsilon}$ de la densité d'énergie fondamentale typique. En effet, en invoquant d'abord la concavité du logarithme, $\psi(\lambda = 1, \beta) \leq \psi(\lambda = 0, \beta)$, puis la positivité de l'entropie $s(\beta) = \beta^2 \partial_\beta [\psi(\lambda, \beta)/\beta] \geq 0$, on obtient pour $\bar{\epsilon} = \lim_{\beta \to \infty} [\psi(\lambda = 0, \beta)/\beta]$ la borne inférieure

$$\bar{\epsilon} \geq \sup_{\beta \in \mathbb{R}^+} [\psi(\lambda = 1, \beta)/\beta]. \tag{2.38}$$

Cet argument, initié dans [Der81, VM84], est utilisé dans [MMR05] pour obtenir une borne inférieure dans les problèmes de matching.

2.4 Physique de l'optimisation combinatoire

Les problèmes d'optimisation combinatoires s'inscrivent donc dans le cadre plus large des systèmes désordonnés, et, à ce titre, se prêtent à une application des méthodes issues de la physique statistique. Le petit tableau qui suit résume la correspondance entre les terminologies issue de l'informatiques et la physique, dont il sera fait usage de manière interchangeable dans la suite.

Optimisation combinatoire	Physique statistique
Problème d'optimisation	Système désordonné
Instance	Échantillon
Solution possible	Configuration
Fonction de coût	Énergie
Solution optimale	Fondamental
Variable booléenne / discrète	Particule / Spin
Contraintes	Interactions

Enfin, avant d'entreprendre l'étude des problèmes d'optimisation combinatoires suivant les principes de la physique statistique, il peut être utile d'énoncer dès à présent quelques unes des limitations inhérentes à cette approche.

Tout d'abord, l'analyse à venir s'attache avant tout aux propriétés asymptotiques des problèmes d'optimisation, dans la limite, dite thermodynamique, où la taille des instances divergent. Sa pertinence pour les systèmes finis reste donc difficile à quantifier. Cela conduit également à ignorer tous les effets non-extensifs ; en particulier, une densité $\epsilon = 0$ ne permet pas de discriminer entre $E_N = 0$ et $E_N > 0$ avec $E_N = o(N)$. Cette distinction est pourtant

cruciale dans le cadre des problèmes de satisfaction de contraintes, ainsi qu'il sera discuté sur l'exemple du coloriage.

Bien que concernant les déviations extensives de $N\bar{\epsilon}$, d'ordre $O(N)$, les fonctions de grandes déviations fournissent cependant aussi des informations sur les petites fluctuations, d'ordre $o(N)$. En effet, à partir de la connaissance du potentiel $\phi(y)$ décrivant les grandes déviations d'une suite $\{\epsilon_N\}_{N\in\mathbb{N}}$ de variables aléatoires, on peut obtenir les moments $\mathbb{E}[\epsilon_N^k]$, et donc en principe remonter à la distribution complète de $E_N = N\epsilon_N$, *via* la relation

$$\langle E_N^k \rangle_c = (-1)^{k+1} N \frac{\partial^k \phi}{\partial y^k}(y=0), \tag{2.39}$$

où $\langle E_N^k \rangle_c$ désigne le *cumulant* d'ordre k, dont une définition est donnée par $\ln \mathbb{E}[e^{tX}] = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \langle X^k \rangle_c$. En particulier, un développement de $L(\epsilon)$ autour de $\bar{\epsilon}$ au premier ordre non nul, en $N^{-1/2}$, rend compte des fluctuations gaussiennes prédites par le théorème de la limite centrale. Ceci ne vaut cependant qu'à la condition que la limite $N \to \infty$ puisse être interchangée avec la dérivation. Une telle relation est notamment fausse si la fonction de grandes déviations présentent plusieurs minima. Le problème des effets de taille finie, crucial en vue des applications, reste en fait largement ouvert.

Une autre limitation importante de l'approche suivie ici est d'être strictement *statique*, c'est-à-dire fondée uniquement sur le paysage d'énergie $\sigma \mapsto E[\sigma]$. Il ne fait aucun doute pourtant que la notion de complexité algorithmique soit fondamentalement *dynamique*, c'est-à-dire dépendante de la procédure algorithmique utilisée. La statique est cependant certainement un préliminaire important aux études dynamiques, et pourrait déjà capturer une part au moins des propriétés dynamiques, à l'image extrême de la mécanique classique, où la structure du potentiel détermine dans leur intégralité les mouvements des particules. De plus, la dynamique des algorithmes se prête aussi des analyses fondées sur la physique statistique, comme le démontrent des travaux récents dans cette direction [CMMS04]. La question des rôles respectifs de la statique et de la dynamique dans les systèmes présentant des propriétés vitreuses, auxquels seront rattachés plusieurs des problèmes d'optimisation réputés difficiles, est cependant un sujet vivement débattu.

Notes et références

Les notions de physique statistique présentées ici sont standards, de même que les notions mathématiques relatives aux grandes déviations [DZ93]. Le rôle fondamental joué par les grandes déviations en physique statistique est bien établi

en mathématiques, comme l'atteste par exemple [Ell85] (voir aussi [Ell95]), mais plus rarement explicité dans les textes de physique. Les grandes déviations sont également au centre de la théorie de l'information, et l'étude du modèle défini par (2.1) emprunte des idées à la théorie des types développée dans ce contexte [CT91].

Les énoncés donnés pour les théorèmes de Cramér et Gärtner-Ellis font intervenir des signes négatifs inélégants uniquement destinés à établir une correspondance stricte avec les grandeurs thermodynamiques. Comme indiqué dans le texte, les théorèmes énoncés ne le sont pas sous les conditions les plus faibles. Notamment, le théorème de Gärtner-Ellis s'applique aussi lorsque $\phi_L(\beta)$ n'est plus supposée différentiable, mais seulement finie au voisinage de $\beta = 0$, à condition de se restreindre aux points ϵ dits *exposés*, pour lesquels il existe un β maximisant $\sup_\beta[-\beta\epsilon+\phi_L(\beta)]$ pour ϵ mais pas $\epsilon' \neq \epsilon$ (voir [DZ93] pour l'énoncé exact).

L'équation (2.32) peut aussi être vue comme un cas exact de formule de Bethe discutée plus bas, *cf.* (5.23), pour un « graphe » dont chaque nœud est isolé et connecté à une unique clause ($\ell_a = 1$, d'où l'absence de terme de lien).

La méthode des répliques [MPV87], illustrée avec (2.37), a historiquement joué un rôle essentiel dans l'étude des systèmes désordonnés ; elle ne sera cependant pas discutée plus avant, l'approche de cavité, dont les prédictions sont équivalentes, lui étant préférée (voir l'appendice D de [RBMM04] pour un exemple de mise en correspondance des deux méthodes).

Enfin, une courte discussion sur l'importance relative de la statique et de la dynamique dans le cadre d'un modèle simple de verre est contenue dans [RBMM04].

Chapitre 3

Phases vitreuses et cavité

De nombreux problèmes d'optimisation algorithmiquement difficiles présentent les caractéristiques des systèmes dits vitreux. La méthode de cavité destinée à étudier ces systèmes est introduite ici à partir de l'étude de quelques modèles simples.

3.1 Modèle à énergies aléatoires

L'exemple le plus simple de système désordonné présentant une transition de phase « vitreuse », le *modèle à énergie aléatoire* (REM), dû à Derrida [Der80], est encore un système dépourvu de corrélations. Une instance I de taille N est définie directement par la donnée du coût de ses q^N configurations, $\{E[\sigma]\}_{\sigma=1,\dots,q^N}$, où les $E[\sigma]$ sont tirés indépendamment d'une distribution commune $\rho_N(E)$, supposée satisfaire $\rho_N(E) \sim \exp[-Nr(E/N)]$ pour $E \to -\infty$ avec $r(\epsilon) \geq 0$ [$r(\epsilon) = \epsilon^2$ dans le modèle d'origine]. Étant défini en termes de ses niveaux d'énergie, ce système peut être traité d'emblée dans l'ensemble microcanonique. Ainsi, vis-à-vis de l'ensemble des instances de taille N, le nombre moyen de configurations associées à la densité d'énergie $\epsilon = E/N$ est donné par

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \asymp q^N \rho_N(E) \equiv e^{N s(\epsilon)}, \tag{3.1}$$

avec $s(\epsilon) = \ln q - r(\epsilon)$. La moyenne $\langle \cdot \rangle$ intègre simultanément les deux statistiques, sur les désordres externe (statistique des instances) et interne (statistique des configurations), mais il est possible de départager leurs rôles respectifs en distinguant deux régimes d'énergie (voir la figure 3.1). Lorsque $s(\epsilon) > 0$ d'abord, $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \gg 1$ correspond à un nombre exponentiel de niveaux et les fluctuations d'instance à instance, d'ordre $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle^{1/2}$, sont négligeables : dans ce cas $s(\epsilon)$ telle que donnée par le calcul recuit (3.1) coïncide

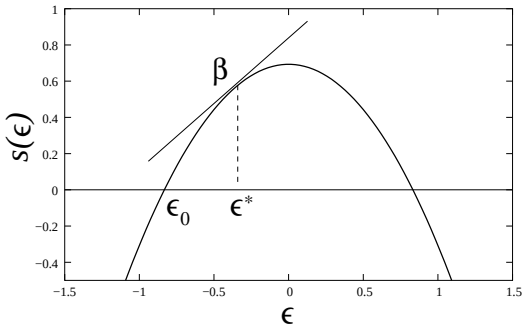

FIG. 3.1 – *Entropie recuite $s(\epsilon)$ dans le modèle à énergies aléatoires (REM)* [équation (3.1) avec $q = 2$ et $r(\epsilon) = \epsilon^2$]. L'énergie d'équilibre pour une température β s'obtient en prenant la tangente à $s(\epsilon)$ de pente β. Pour $\beta > \beta_c$ où β_c correspond au point ϵ_0 où $s(\epsilon)$ s'annule, l'entropie typique $\bar{s}(\epsilon)$ est nulle et le système est gelé à la valeur $\epsilon^* = \epsilon_0$.

avec l'entropie microcanonique typique $\bar{s}(\epsilon)$ d'une instance. Lorsque $s(\epsilon) < 0$ par contre, $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \ll 1$ est déterminé par des instances atypiques dont un niveau d'énergie est exceptionnellement bas ; dans ce cas $s(\epsilon)$ s'interprète comme une fonction de grandes déviations du fondamental sur les différentes instances, comme confirmé par le calcul ci-après.

Cette analyse sommaire, qu'un traitement rigoureux corrobore [Tal03], conduit pour l'entropie microcanonique $\bar{s}(\epsilon)$ d'une instance typique à

$$\bar{s}(\epsilon) = \begin{cases} s(\epsilon) & \text{si } s(\epsilon) \geq 0, \\ 0 & \text{si } s(\epsilon) \leq 0. \end{cases} \tag{3.2}$$

Le REM se distingue des systèmes considérés jusqu'ici par l'existence d'une température inverse finie $\beta_c = \partial_\epsilon s(\epsilon = \overline{\epsilon_0}) < \infty$ à laquelle l'entropie typique s'annule, $s(\overline{\epsilon_0}) = 0$. Cette propriété est à l'origine d'une transition de phase lorsque, dans l'ensemble canonique, la température $1/\beta$ est abaissée. En effet, suivant la construction évoquée en 2.2, pour $\beta > \beta_c$ la droite d'appui repose sur le point $\epsilon = \overline{\epsilon_0}$ (voir la figure 3.1) : la thermodynamique qui pour $\beta < \beta_c$ est déterminée par un nombre exponentiel $\exp[N\bar{s}(\epsilon)]$ de configurations, où $\beta = \partial_\epsilon s(\epsilon)$, se trouve dominée pour $\beta > \beta_c$ par un nombre subexponentiel de configurations de densité d'énergie $\overline{\epsilon_0}$. Par analogie avec la physique des verres, ce phénomène de condensation dans l'espace des phases est appelé, *transition vitreuse*, et le régime de basse température, dominé par un nombre subexponentiel de configurations, *phase vitreuse*.

Le REM est un des rares modèles à se prêter à un calcul direct des grandes

déviations, d'instance à instance, de l'énergie du fondamental. Ce calcul à la fois confirme l'interprétation donnée à $s(\epsilon)$ pour $\epsilon < \overline{\epsilon_0}$, et fournit pour $\epsilon > \overline{\epsilon_0}$ un exemple de violation du principe de grandes déviations tel qu'énoncé plus haut. La densité d'énergie du fondamental d'une instance étant définie par

$$\epsilon_0 = \frac{1}{N} \min\{E_1, \ldots, E_{q^N}\}, \tag{3.3}$$

la probabilité sur les différentes instances, notée $P_N(\epsilon)$, que ϵ_0 vaille ϵ est

$$P_N(\epsilon) = q^N \rho_N(N\epsilon) \left(\int_{N\epsilon}^{\infty} dE \rho_N(E) \right)^{q^N - 1}. \tag{3.4}$$

Par le biais d'une approximation de point col, cette probabilité se récrit, en utilisant (3.1), en terme de la seule fonction $s(\epsilon)$,

$$P_N(\epsilon) \asymp e^{Ns(\epsilon)} \left(1 - \frac{e^{Ns(\epsilon)}}{q^N} \right)^{q^N - 1} \asymp e^{Ns(\epsilon) - \exp[Ns(\epsilon)]} \tag{3.5}$$

(loi de Gumbel). En ne conservant que les termes dominants, on obtient ainsi pour les grandes déviations du fondamental,

$$P_N(\epsilon) \asymp \begin{cases} e^{-e^{Ns(\epsilon)}} & \text{si } \epsilon > \overline{\epsilon_0} \quad [s(\epsilon) > 0], \\ e^{Ns(\epsilon)} & \text{si } \epsilon < \overline{\epsilon_0} \quad [s(\epsilon) < 0]. \end{cases} \tag{3.6}$$

Les valeurs négatives de $s(\epsilon)$ s'identifient donc effectivement avec celles de la fonction de grandes déviations, qui a la particularité de présenter une singularité au niveau de la valeur typique $\overline{\epsilon_0}$. La différence de comportement entre les deux régimes d'énergie s'interprète ainsi : un fondamental avec $\epsilon_0 < \overline{\epsilon_0}$ requiert qu'un des niveaux d'énergie ait une valeur exceptionnellement petite, alors qu'un fondamental avec $\epsilon_0 > \overline{\epsilon_0}$ exige que les $\mathcal{N} \asymp \exp[Ns(\epsilon_0)]$ niveaux typiquement présents dans l'intervalle $[\overline{\epsilon_0}, \epsilon_0]$ soient exceptionnellement absents, ce qui ne se réalise qu'avec une très faible probabilité.

3.2 Température interne

Dans le cas d'une transition de phase « ordinaire », caractérisée par la non concavité de l'entropie microcanonique, la construction de Maxwell (voir l'exemple en 2.2) permet de pallier l'inapplicabilité du théorème de Gärtner-Ellis en restant dans un cadre canonique. Dans le cas d'une transition de phase vitreuse de type REM, l'entropie microcanonique est aussi non concave du fait de son annulation à température finie, $s(\epsilon = \epsilon_0) = 0$ avec

$\beta_c = \partial_\epsilon s(\epsilon = \epsilon_0) < \infty$; il peut ici encore en être rendu compte dans un cadre « canonique », à condition d'introduire une seconde température inverse $m\beta$.

Pour les systèmes subissant une transition de gel, comme le REM, le potentiel $\phi = \phi_s$ s'écrit en effet

$$\phi(\beta) = \begin{cases} \beta\epsilon^* - s(\epsilon^*) \quad \text{avec } \beta = \partial_\epsilon s(\epsilon^*) & \text{si } \beta < \beta_c, \\ \epsilon_0 & \text{si } \beta > \beta_c. \end{cases} \tag{3.7}$$

Cette expression, dont une représentation graphique est présentée sur la figure 3.1, s'obtient aussi comme équation du col de la relation

$$e^{-N\phi(\beta)} = \int_{\epsilon_0} d\epsilon \; e^{N[s(\epsilon)-\beta\epsilon]}. \tag{3.8}$$

Si on considère un tel système du point de vue de l'optimisation, c'est-à-dire à $\beta = \infty$ fixé, l'ignorance de la valeur de ϵ_0 ne permet pas de déterminer directement si le point col ϵ^* touche ou non la borne inférieure d'intégration. En se plaçant toutefois à température finie, ϵ_0 devient accessible par l'intermédiaire de β_c, selon les relations canoniques $s(\beta_c) = 0$ et $\epsilon_0 = \partial_\beta\phi(\beta = \beta_c)$. Dans cette optique, β ne correspond pas à un paramètre fixé par les conditions extérieures, mais à un paramètre *interne* fixé à β_c pour rendre compte du comportement de la densité d'états au voisinage du fondamental ϵ_0,

$$\#\{\sigma \in \mathcal{C} : E[\sigma] = N\epsilon\} \asymp e^{N\beta_c(\epsilon-\epsilon_0)} \quad \text{pour } \epsilon \gtrsim \epsilon_0. \tag{3.9}$$

L'introduction d'une température finie $\beta < \infty$ même lorsque seul le fondamental correspondant à $\beta = \infty$ est recherché est un artifice très utile dans l'étude des systèmes vitreux, ainsi que la suite le confirmera.

Lorsqu'une température extérieure β est effectivement imposée au système, il devient nécessaire de la distinguer de la température interne, notée $m\beta$. Le paramètre supplémentaire m se définit par le biais d'un potentiel « à un pas » $\phi_1(m, \beta)$, défini par

$$e^{-N\phi_1(m,\beta)} = \int_{\epsilon_0} d\epsilon \; e^{N[s(\epsilon)-m\beta\epsilon]}. \tag{3.10}$$

Tant que $\beta > \beta_c$, on a simplement $\phi(\beta) = \phi_1(m^* = 1, \beta)$. Pour $\beta < \beta_c$, la température de gel correspond à $m\beta = \beta_c$, de sorte que $\phi(\beta) = \phi_1(m^* = \beta_c/\beta, \beta)$. Comme β_c précédemment, le paramètre $m^*(\beta)$ se détermine à partir de l'équation $s_1(m, \beta) = \partial_m[\phi_1(m, \beta)/m] = 0$: m^* correspond est donné par la solution à cette équation si cette solution est < 1 et par $m^* = 1$ sinon, l'énergie moyenne étant elle toujours décrite par $\epsilon = \epsilon_1(m^*, \beta) = \partial_m\phi_1(m = m^*, \beta)$.

3.3 Cavité et grandes déviations

Comme la méthode des répliques dont elle reproduit à l'identique les prédictions, la méthode de cavité fournit une procédure précise, bien que non-rigoureuse, pour calculer des fonctions entropies ou de grandes déviations. À la différence toutefois des répliques qui procèdent indirectement à partir des $\{\phi(n)\}_{n\in N}$ (voir 2.3), la cavité présente l'avantage de rendre explicite le principe de grandes déviations sur lequel elle s'appuie.

Une illustration en est donnée ici par les systèmes dont l'énergie est somme de variables aléatoires indépendantes, $E_N = \sum_{i=1}^N X_i$ avec les X_i de distribution $\rho(x)$, pour lesquels la cavité permet de retrouver les conclusions du théorème de Cramér. L'hypothèse de départ est la satisfaction d'un principe de grandes déviations,

$$\mathbb{P}_N(E = N\epsilon) \asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon)}, \tag{3.11}$$

où, pour éviter la prolifération des signes négatif, on définit ici $\mathcal{L}(\epsilon)$ comme l'opposée de la fonction de grandes déviations, $\mathcal{L}(\epsilon) \equiv -L(\epsilon)$. L'idée sous-jacente à la cavité est de dériver des expressions asymptotiques en comparant l'état d'un système avant et après que lui soit ajouté un élément (ou de façon équivalente, avant et après que lui soit soustrait un élément, d'où le nom « cavité »). Schématiquement, cela revient à écrire

$$\mathbb{P}_{N+1}(E_{N+1} = E) = \int d\Delta E\ \mathcal{P}(\Delta E)\ \mathbb{P}_N(E_N = E - \Delta E) \tag{3.12}$$

où $\mathcal{P}(\Delta E)$ représente la distribution des déplacements d'énergie ΔE consécutifs à l'addition d'un élément.

Le problème se trouve ainsi ramené au calcul de $\mathcal{P}(\Delta E)$. Dans le cas de sommes de variables aléatoires i.i.d., on a simplement $\mathcal{P}(\Delta E) = \rho(\Delta E)$ de sorte qu'en utilisant (3.11) il vient

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}_{N+1}(E_{N+1} = E) = e^{(N+1)\mathcal{L}\left(\frac{E}{N+1}\right)} \\
&= \int d\Delta E \rho(\Delta E) \mathbb{P}_N(E_N = E - \Delta E) = \int d\Delta E \rho(\Delta E) e^{N\mathcal{L}\left(\frac{E-\Delta E}{N}\right)}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

L'étape suivante consiste à développer à grand N,

$$\begin{aligned}
(N+1)\mathcal{L}\left(\frac{E}{N+1}\right) &= N\mathcal{L}(\epsilon) + \mathcal{L}(\epsilon) - \epsilon\partial_\epsilon\mathcal{L}(\epsilon) + O(1/N), \\
N\mathcal{L}\left(\frac{E-\Delta E}{N}\right) &= N\mathcal{L}(\epsilon) - \Delta E\partial_\epsilon\mathcal{L}(\epsilon) + O(1/N),
\end{aligned} \tag{3.14}$$

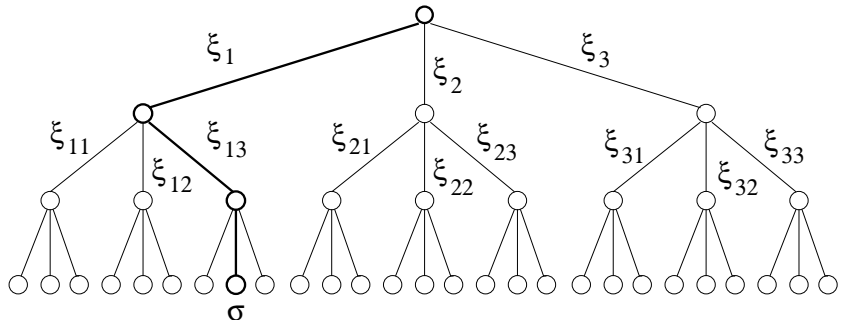

FIG. 3.2 – *Polymère dirigé sur arbre aléatoire*, ici limité à $n = 3$ générations avec $k = 3$. Une configuration σ correspond à un chemin de la racine (nœud de génération 0, en haut) à une des k^n feuilles (nœuds de génération $n = 3$, en bas). Son coût $E[\sigma]$ est la longueur total du chemin, soit pour la configuration σ représentée en trait gras, $E[\sigma] = \xi_1 + \xi_{13} + \xi_{132}$. Le problème consiste, étant donné les ξ, à trouver la configuration de plus court chemin.

où $\epsilon = E_N/N$. Enfin, en posant $y \equiv \partial_\epsilon \mathcal{L}(\epsilon)$ on définit le potentiel $\phi = \phi_L$

$$\phi(y) \equiv y\epsilon - \mathcal{L}(\epsilon) = -\ln \mathbb{E}[e^{-yX}], \tag{3.15}$$

à partir duquel, en accord avec le théorème de Cramér, on obtient la fonction de grandes déviations $L(\epsilon) = -\mathcal{L}(\epsilon)$ par transformation de Legendre,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\epsilon) &= \epsilon y - \phi(y), \\ \epsilon &= \partial_y \phi(y). \end{aligned} \tag{3.16}$$

Cette même méthode s'applique également au système désordonné du 2.3.

3.4 Polymère dirigé sur arbre aléatoire

Après le REM, le deuxième modèle dans l'ordre de la simplicité à présenter une transition vitreuse est sans doute le *polymère dirigé sur arbre aléatoire*, introduit par Derrida et Spohn [DS88]. Comme le REM, il est défini directement en terme de ses niveaux d'énergie, mais, à la différence de ce dernier, ceux-ci sont corrélés. Une instance de taille N est construite à partir d'un arbre de Cayley de connectivité $k + 1$ (voir la figure 3.2), dont les liens ont des longueurs ξ_j, tirés indépendamment d'une distribution $\rho(\xi)$. Chaque feuille de la génération N définit une configuration σ dont l'énergie $E[\sigma]$ est la somme des poids ξ_j selon l'unique chemin qui la lie à la racine.

Le problème d'optimisation associé au polymère dirigé consiste à déterminer la longueur du chemin le plus court. L'approche de cavité à ce problème

part du principe que le nombre de chemins σ d'énergie $E[\sigma] = N\epsilon$ varie, au moins au voisinage du fondamental, comme

$$\mathcal{N}_N(E) \equiv \#\{\sigma \in \mathcal{C} : E[\sigma] = N\epsilon\} \asymp e^{Ns(\epsilon)}, \tag{3.17}$$

où $s(\epsilon)$ définit l'entropie microcanonique. Le schéma de calcul de la fonction entropie est ensuite analogue à celui employé pour les fonctions de grandes déviations résumé par (3.12),

$$\langle \mathcal{N}_{N+1}(E) \rangle = k \int d\Delta E \; P(\Delta E) \; \langle \mathcal{N}_N(E - \Delta E) \rangle \tag{3.18}$$

où le facteur k rend compte de la multiplication des niveaux d'une génération à l'autre. La densité d'état $\mathcal{N}_N(E)$ n'est calculée que par le biais de sa moyenne $\langle \mathcal{N}_N(E) \rangle$ sur les différentes instances, mais, à l'instar du REM, on s'attend à décrire ainsi l'entropie typique par $\bar{s}(\epsilon) = \max(0, s(\epsilon))$ où $s(\epsilon)$ correspond maintenant à $\langle \mathcal{N}_N(E) \rangle \asymp \exp[Ns(\epsilon)]$, les valeurs négatives de $s(\epsilon)$ étant associées à des instances atypiques. En identifiant ici aussi $P(\Delta E)$ à $\rho(\Delta E)$, et en développant à grand N comme précédemment, il vient

$$e^{s(\epsilon) - \epsilon \partial_\epsilon s(\epsilon)} = k \int d\Delta E \rho(\Delta E) e^{-\Delta E \partial_\epsilon s(\epsilon)}. \tag{3.19}$$

En introduisant encore $y = \partial_\epsilon s(\epsilon)$, on obtient ainsi l'entropie $s(\epsilon)$ comme transformée de Legendre du potentiel $\phi = \phi_s$ défini par

$$\phi(y) = -\ln \left(k \mathbb{E}[e^{-y\xi}] \right). \tag{3.20}$$

Ce système présente une phase vitreuse si $\phi(y)/y$ possède un maximum pour $y = y^* < \infty$, correspondant à une crise entropique $s(y) = \partial_y[\phi(y)/y] = 0$; avec une distribution bimodale $\rho(\xi) = p\delta_1(\xi) + (1-p)\delta_0(\xi)$, cela se produit pour $p > p_c = (k-1)/k$, où p_c s'interprète comme le seuil d'une transition de dépiégeage du polymère, entre une phase délocalisée (liquide) pour $p < p_c$ à une phase localisée (vitreuse) pour $p > p_c$. Varier la température revient ici aussi à varier ρ, puisque β renormalise simplement l'échelle du désordre ξ : le diagramme de phase en température qui en résulte est en tous points analogue à celui du REM, et se décrit à partir de $\phi(y)$ en remplaçant y par βm ; en particulier la température de gel est donnée par $\beta_c = y^*$.

De ce point de vue, le modèle de Cramér défini par (2.21) correspond à un polymère dirigé en milieu *non* aléatoire. Soit en effet $\rho(\xi) = \sum_{a=1}^{q} \delta_{\ell_a}(\xi)$, qui, quitte à augmenter q et multiplier les ℓ_a identiques, approxime arbitrairement bien n'importe quelle distribution ρ. On considère alors l'arbre de

Cayley dont la descendance de chaque nœud est constituée des mêmes q liens de longueurs ℓ_a, $a = 1, \ldots, q$. Par construction, il s'agit d'un système sans désordre dont l'ensemble des différentes longueurs pour atteindre la génération N a même distribution que la somme de N variables aléatoires i.i.d.. Dans ce cas $k = q$, et $\mathbb{P}_N(E) = \langle \mathcal{N}_N(E) \rangle / q^N$ de sorte qu'en divisant (3.18) par q^{N+1} on réobtient exactement (3.12) ; cette observation traduit l'équivalence entre les deux schémas de calcul.

Enfin, dans la limite $q \to \infty$, qui peut toujours être prise sans inconvénient, l'arbre aléatoire se définit à partir de l'arbre régulier en ne retenant à chaque embranchement que k des q liens. Il convient alors de distinguer la densité d'état $\mathcal{N}_N^{(r)}(E)$ de l'arbre régulier initial, de celle $\mathcal{N}_N^{(a)}(E)$ de l'arbre élagué. En moyenne, $\langle \mathcal{N}_N^{(a)}(E) \rangle = (k/q)^N \mathcal{N}_N^{(r)}(E)$, ce qui, en notant $\mathbb{P}_N^{(r)}(E) = \mathcal{N}_N^{(r)}(E)/q^N$ la probabilité d'obtenir une longueur totale E sur l'arbre complet, se récrit $\langle \mathcal{N}_N^{(a)}(E) \rangle = k^N \mathbb{P}_N^{(r)}(E)$. Mise en regard avec l'équation (3.1) sur laquelle l'analyse du REM s'est fondée, cette relation rend explicite l'origine de l'analogie entre le REM et le polymère dirigé.

Notes et références

Le REM a été introduit par Derrida et l'analyse fondée sur le premier moment suit [Der80, Der81]. Le calcul des grandes déviations est extrait de [Riv04]. Le paramètre m peut s'interpréter en terme de « clônes » qu'une faible attraction force à occuper un même « état » [Mon95] : pour le REM ou le polymère dirigé dont les états se résument à des configurations, cela revient comme en (3.10) à multiplier l'énergie de chaque configuration par m sans modifier l'entropie.

La méthode de cavité, qui sera développée pour les modèles sur graphes aléatoires dans les chapitres suivants, a été introduite par Mézard, Parisi et Virasoro dans le cadre du modèle SK [MPV86]. La version grandes déviations [Riv05b] peut être vue comme une application de cette dernière à un système pur.

L'approche de cavité pour étudier le polymère dirigé vient s'ajouter à plusieurs méthodes déjà proposées, dont la mise en correspondance avec une équation non linéaire du type réaction-diffusion [DS88] et la méthode des répliques avec un pas de brisure de symétrie des répliques [Der90] (qui peut aussi être utilisée pour résoudre le REM [GM84]). Enfin, une solution mathématique existe dans le contexte de la position la plus à droite d'une marche aléatoire avec branchement [Big77].

La transition de dépiégeage du polymère dirigé a été étudiée par Majumdar et Krapivsky [MK00] en utilisant une méthode de fronts d'onde propageant. Cette méthode renvoie une famille de solutions paramétrisées par un réel λ et caractérisées par une relation de dispersion de « vitesses » $v(\lambda)$. Le choix de λ^* s'effectue suivant un principe général de sélection de la vitesse maximale qui s'interprète ici comme la condition d'annulation de l'entropie, avec précisément $v(\lambda) = \phi(\lambda)/\lambda$.

Deuxième partie

Modèles sur graphes aléatoires

Chapitre 4

Structures aléatoires

Les graphes aléatoires interviennent dans la définition de nombreux problèmes d'optimisation. En tant qu'objets stochastiques formés de nombreux éléments, ils entretiennent aussi des liens étroits avec la physique statistique.

4.1 Graphes aléatoires

Étant donné un ensemble $\{1, \ldots, N\}$ de *nœuds*, un graphe est défini par le choix de M *liens* parmi les $\binom{N}{2}$ couples de nœuds possibles. Un *graphe aléatoire* correspond au choix, avec mesure uniforme, d'un élément dans un ensemble de graphes ; les trois ensembles suivants sont les plus fréquemment rencontrés en théorie des graphes.

Modèle binomial

Le modèle binomial, noté $\mathcal{G}(N, p)$, correspond à retenir chacun des $\binom{N}{2}$ liens possibles indépendamment avec probabilité p. La théorie des graphes, comme la physique statistique, s'attache à caractériser les propriétés asymptotiques dans la limite $N \to \infty$. Dans cette optique, il est intéressant de considérer une probabilité p dépendant de N, $p = p(N)$. Le cas particulier auquel se restreindront les chapitres suivants est celui pour lequel $p(N) = \gamma/N$, noté $\mathcal{G}(N, p = \gamma/N) \equiv \tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$. Les graphes de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ ont notamment la propriété d'avoir une distribution des degrés, c'est-à-dire de la connectivité des nœuds, décrite par une loi de Poisson de moyenne γ. En effet, la probabilité que la connectivité d'un nœud soit k est donnée par

$$p(k) = \binom{N-1}{k} \left(\frac{\gamma}{N}\right)^k \left(1 - \frac{\gamma}{N}\right)^{N-1-k} \to \frac{\gamma^k}{k!} e^{-\gamma}, \tag{4.1}$$

quand $N \to \infty$.

Modèle uniforme

Le modèle uniforme, noté $\mathcal{G}(N, M)$, correspond à choisir uniformément un graphe parmi ceux ayant exactement M liens. Ici encore on considère $M = M(N)$, et plus particulièrement $M(N) = \alpha N$, qui définit $\mathcal{G}(N, M = \alpha N) \equiv \bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$. Les propriétés typiques des graphes de ce modèle sont similaires à celles de $\mathcal{G}(N, p)$ pour $p \sim M/\binom{N}{2}$; par exemple la distribution des degrés d'un graphe de $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$ est également poissonnienne, de moyenne 2α. Plus précisément, une propriété caractérisée par une grandeur E_G, décrite par une probabilité $P_N^{(\alpha)}(E)$ dans $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, est décrite dans $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ par la probabilité $P_N^{(\gamma)}(E)$ vérifiant

$$P_N^{(\gamma)}(E) = \sum_{M=0}^{\binom{N}{2}} \binom{\binom{N}{2}}{M} \left(\frac{\gamma}{N}\right)^M \left(1 - \frac{\gamma}{N}\right)^{\binom{N}{2}-M} P_N^{(\alpha)}(E). \tag{4.2}$$

Si un principe de grandes déviations s'applique, avec $P_N^{(\alpha)}(N\epsilon) \asymp \exp[-NL^{(\alpha)}(\epsilon)]$ et $P_N^{(\gamma)}(N\epsilon) \asymp \exp[-NL^{(\gamma)}(\epsilon)]$ où $\epsilon = E/N$ alors, pour $M = \alpha N$, un développement à grand N fournit

$$\begin{aligned} e^{-NL^{(\gamma)}(\epsilon)} &\simeq \int d\alpha e^{-N[K(\gamma,\alpha)+L^{(\alpha)}(\epsilon)]}, \\ K(\gamma, \alpha) &= \gamma/2 - \alpha + \alpha \ln(2\alpha/\gamma). \end{aligned} \tag{4.3}$$

En prenant le col, on obtient ainsi une correspondance entre les deux fonctions de grandes déviations,

$$L^{(\gamma)}(\epsilon) = \min_{\alpha}[K(\gamma, \alpha) + L^{(\alpha)}(\epsilon)]. \tag{4.4}$$

La fonction $K(\gamma, \alpha)$ s'interprète comme la fonction de grandes déviations du nombre de liens pour l'ensemble $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$: avec $\epsilon = M/N$, on a en effet $L^{(\alpha)}(\epsilon) = 0$ si $\epsilon = \alpha$, et ∞ sinon, donc $L^{(\gamma)}(\epsilon) = K(\gamma, \alpha = \epsilon)$. Cette interprétation indique que $K(\gamma, \alpha)$ est strictement positive, sauf au point $\gamma = 2\alpha$ où elle s'annule (voir la figure 4.1). En conséquence, si $\bar{\epsilon}$ est la valeur typique de ϵ pour l'ensemble $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, $L^{(\gamma)}(\bar{\epsilon}) = 0$ implique d'après (4.4) $K(\gamma, \alpha) = 0$ et $L^{(\alpha)}(\bar{\epsilon}) = 0$, ce qui signifie que $\bar{\epsilon}$ est aussi la valeur typique de $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$ pour $\alpha = \gamma/2$. Cette *équivalence asymptotique* justifie que dans la suite la distinction ne soit pas faite lors de l'étude des propriétés typiques de ces deux modèles, alors communément qualifiés de « graphes poissonniens ». L'équivalence ne s'étend toutefois pas aux propriétés atypiques, même si la relation (4.4) établit une correspondance entre les grandes déviations des deux modèles.

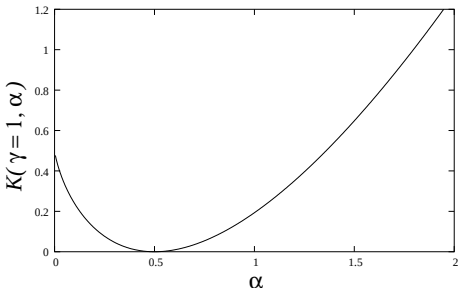

FIG. 4.1 – *Fonction de grandes déviations du nombre de liens dans le modèle binomial.* La probabilité qu'un graphe de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ ait $M = \alpha N$ liens est donnée par $\mathbb{P}_N^{(\gamma)}(M = \alpha N) \asymp \exp[-NK(\gamma, \alpha)]$, où $K(\gamma, \alpha)$ définie par (4.3) est tracée ci-dessus pour $\gamma = 1$.

Graphes réguliers

Le modèle $\mathcal{G}_N^{(r)}$ correspond à choisir uniformément un graphe parmi ceux dont tous les nœuds ont degré r. Ces graphes ont la propriété d'être localement homogènes, ce qui leur vaudra de jouer un rôle un particulier par la suite.

4.2 Graphes et optimisation

Les graphes aléatoires interviennent dans la définition des instances de nombreux problèmes d'optimisation combinatoire. Les exemples suivants, qui appartiennent à la classe des problèmes NP-complets, sont destinés à servir d'illustration aux prochains chapitres.

Couverture

Étant donné un graphe, le problème de *couverture* des nœuds consiste à noircir (couvrir) le plus grand nombre possible de nœuds tout en évitant de noircir deux nœuds connectés par un lien. Une « application » est la suivante : un musée est formé de N salles, reliées par M couloirs, et il s'agit de disposer le minimum de gardiens dans les salles, de sorte qu'aucun couloir ne débouche sur deux salles sans surveillance. Les nœuds noirs à maximiser correspondent alors aux salles sans gardien.

En termes plus physiques, un nœud couvert peut être associé à la présence d'une particule et la contrainte interdisant à deux nœuds couverts d'être liés, s'interprète comme une interaction de cœur dur interdisant à deux parti-

cules d'être voisines. Dans ce cadre, il est naturel de généraliser le modèle en écrivant dans l'ensemble grand-canonique la fonction de partition

$$Z(\mu) = \sum_{\{n_i\}_i \in \{0,1\}^N} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 - n_i n_j) e^{\mu \sum_i n_i}, \tag{4.5}$$

où $n_i = 0$ ou 1 selon que le nœud i est vide ou occupé, et $\langle i, j \rangle$ indique qu'un lien est présent entre i et j. Le *potentiel chimique* μ joue le même rôle qu'une température inverse : la solution au problème d'optimisation est associée à la densité maximale de particules admise par le graphe, qui est obtenue en prenant la limite $\mu \to \infty$.

Coloriage

Étant donné un graphe et q couleurs, le problème du coloriage consiste à déterminer s'il est possible de colorier l'ensemble des nœuds de sorte que deux nœuds voisins aient toujours des couleurs distinctes. Ce problème de décision (voir 1.3) est associé au problème d'optimisation qui consiste à minimiser le nombre de liens reliant deux nœuds de même couleur : le graphe est en effet coloriable si et seulement si ce minimum est nul. À température finie, le coloriage est associé au *modèle de Potts*, dont les variables σ_i prennent q valeurs et dont l'énergie s'écrit

$$E[\sigma] = \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}. \tag{4.6}$$

Le problème du coloriage et ses variantes admettent de nombreuses applications, notamment dans les problèmes de type emploi du temps. Pour en donner une illustration élémentaire, soit une université où chacun des M étudiants a sélectionné deux cours parmi un ensemble de N ; le problème de distribuer les N cours dans q créneaux horaires disponibles tout en évitant qu'un étudiant soit empêché de suivre les deux cours qu'il a choisi parce qu'ils se déroulent simultanément, définit un problème de q-coloriage avec les liens représentant les étudiants

Satisfaisabilité

Le coloriage est un représentant d'une classe plus vaste de problèmes de décision, les *problèmes de satisfaction de contraintes*. Ces problèmes font génériquement intervenir N variables discrètes $\sigma_i \in \{0, \ldots, q-1\}$, $i = 1, \ldots, N$, soumises à M contraintes. Chacune des contraintes porte sur un sous-ensemble $a \subset \{1, \ldots, N\}$ de taille ℓ_a finie et interdit aux variables

$\sigma_a \equiv \{\sigma_i\}_{i\in a}$ certaines des q^{ℓ_a} valeurs qui leur seraient possibles. Ainsi dans le coloriage, les M contraintes s'identifient aux liens, et chaque couple de nœuds i, j connectés se voit exclure q de ses q^2 possibilités (qui correspondent à $\sigma_i = \sigma_j$). Un autre exemple est K-SAT, où $q = 2$ et où chaque contrainte, qui fait intervenir K variables, exclut exactement une des 2^K combinaisons. Ainsi sous forme logique, une contrainte de 3-SAT s'écrit par exemple $\sigma_1 \vee \bar{\sigma}_2 \vee \sigma_3$, qui signifie que σ_1 doit être vrai *ou* σ_2 faux *ou* σ_3 vrai, c'est-à-dire que les configurations ayant $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 1$ *et* $\sigma_3 = 0$ sont exclues. En conséquence, chaque clause de K-SAT a pour effet d'exclure une fraction $1/q^K$ des q^N configurations possibles ; le problème de la satisfaisabilité consiste alors à déterminer si toutes les configurations se trouvent ainsi exclues, auquel cas l'instance est dite *non-satisfaisable*, ou si des configurations demeurent, auquel cas l'instance est dite *satisfaisable*.

Les problèmes de satisfaisabilité, qui sont des problèmes de décision, sont associés aux problèmes d'optimisation dont la fonction coût compte le nombre de contraintes violées. Chaque clause a peut en effet être représentée par une table de vérité $\mathcal{E}_a$ telle que $\mathcal{E}_a[\sigma_a] = 0$ si la contrainte est satisfaite et 1 sinon, où $\sigma_a \equiv \{\sigma_i\}_{i\in a}$. Ainsi pour le coloriage, $\mathcal{E}_{ij}[\sigma_i, \sigma_j] = \delta_{\sigma_i,\sigma_j}$ si ij est un lien du graphe, et pour l'exemple de clause de 3-SAT ci-dessus $\mathcal{E}_{123}[\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3] = \delta_{\sigma_1,1}\delta_{\sigma_2,0}\delta_{\sigma_3,1}$. La fonction de coût totale s'obtient en sommant les contributions de chaque clause,

$$\mathcal{E}[\sigma] = \sum_{a=1}^{M} \mathcal{E}_a[\sigma_a] \tag{4.7}$$

où, comme ci-dessus, σ_a représente $\{\sigma_i\}_{i\in a}$. Un peu plus généralement, il est utile pour la suite d'inclure la possibilité que des contraintes soient imposées aussi aux variables individuelles (1-clauses), ce qui conduit à considérer la fonction coût générique

$$\mathcal{E}[\sigma] = \sum_{a=1}^{M} \mathcal{E}_a[\sigma_a] + \sum_{i=1}^{N} \mathcal{B}_i[\sigma_i], \tag{4.8}$$

avec encore $\mathcal{B}_i[\sigma_i] \in \{0, 1\}$. En dépit de leur généralité, les problèmes de satisfaction de contraintes décrits par (4.8) n'englobent pas l'intégralité des problèmes d'optimisation, ni non plus le sous-ensemble de ceux que les méthodes présentées ici permettent d'étudier : ainsi le problème de couverture n'entre pas dans leur cadre, ni non plus les problèmes de matching étudiés dans les articles [MMR04, MMR05].

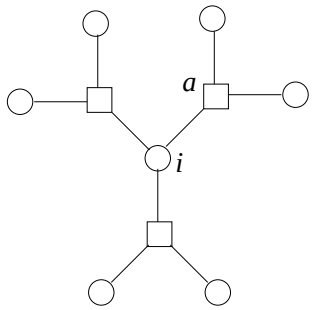

FIG. 4.2 – *Hypergraphe.* Les variables σ_i résident sur les nœuds i, représentés par des cercles. Un carré correspond à une clause a et est relié à tous les nœuds $i \in a$ qui interviennent dans le terme d'interaction $\mathcal{E}_a[\sigma_a]$, $\sigma_a \equiv \{\sigma_i\}_{i \in a}$.

Hypergraphes

Dans le cas du coloriage, chaque contrainte, qui ne fait intervenir que deux variables, peut être représentée par un lien dans un graphe dont chacun des nœuds porte une variable. Pour représenter les contraintes faisant intervenir plusieurs variables simultanément ($\ell_a \geq 3$), la notion de graphe peut être étendue à celle d'*hypergraphe*. Les hypergraphes possèdent, en plus des nœuds portant les variables, des nœuds représentant chacune des contraintes, ici encore appelées *clauses* (même si ce terme est habituellement réservé aux expressions du type $\sigma_1 \vee \bar{\sigma}_2 \vee \sigma_3$), et connectées aux variables qu'elles contraignent (voir la figure 4.2). Les modèles de satisfaisabilité aléatoire sont alors définis en généralisant le modèle uniforme des graphes aléatoires aux hypergraphes, caractérisés par le nombre N de leurs nœuds et le nombre M de leurs clauses. De façon analogue aux graphes simples, pour $M = \alpha N$, la structure est diluée, avec chaque nœud ayant connectivité finie.

4.3 Approximation des arbres

Afin de traiter dans un formalisme commun les propriétés typiques des graphes poissonniens et réguliers, on considère plus généralement un ensemble de graphes *dilués* ayant une distribution des degrés $p(k)$ satisfaisant $\langle k \rangle \equiv \sum_k k p_k < \infty$. La seule donnée de $\{p(k)\}_k$ est insuffisante en général pour spécifier un ensemble de graphes, mais comme déjà suggéré par l'équivalence d'ensemble entre les modèles uniforme et binomiaux, on verra qu'elle suffit à la description des propriétés typiques.

La propriété commune des graphes dilués sur laquelle se fonde les analyses qui suivent est d'être *localement en arbre*, signifiant que pour tout $r > 0$ fini,

la probabilité qu'un nœud appartienne à une boucle de longueur r tend vers zéro avec $N \to \infty$. On peut en fait estimer que les boucles typiques ont une longueur $O(\ln N)$: après n générations, un nœud donné est relié en moyenne à $\langle k \rangle^n$ autres nœuds en l'absence de boucle, et une boucle se forme avec grande probabilité lorsque $\langle k \rangle^n \sim N$, c'est-à-dire $n \sim \ln N / \ln \langle k \rangle$. Cela ne signifie cependant que de petites boucles ne soient pas présentes (il y a par exemple presque sûrement un triangle dans un graphe de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ lorsque $\gamma > 1$), mais qu'elles n'impliquent pas les nœuds typiques.

Composante géante

Un problème classique de théorie des graphes est l'étude du plus grand sous-graphe connecté à l'intérieur d'un graphe donné. Le graphe est dit posséder une *composante géante* si ce sous-graphe fait intervenir, dans la limite $N \to \infty$, une fraction finie des nœuds (ce qui correspond en physique à un phénomène de *percolation*). L'étude de la taille de cette composante géante lorsqu'elle existe est l'occasion ici d'une première illustration de l'*approximation des arbres*.

L'idée sous-jacente est que le phénomène de percolation est capturé par la seule prise en compte de la structure locale, en arbre, des graphes aléatoires dilués, où *arbre* réfère à un graphe dépourvu de boucle. En l'absence de composante géante, $O(N)$ sous-graphes (composantes) connectés sont en effet présents, chacune de taille $O(1)$, et l'ajout d'un lien relie presque sûrement deux des composantes isolées, plutôt que deux nœuds déjà connectés : en effet, pour chaque composante de $O(1)$ nœuds, la probabilité de lui ajouter un lien est seulement d'ordre $O(1/N^2)$ puisque chaque lien a probabilité $O(1/N)$, ce qui, multiplié par le nombre $O(N)$ de composantes, donne une probabilité négligeable $O(1/N)$. En conséquence, les composantes isolées, de taille $O(1)$, sont typiquement des arbres et le seuil de percolation s'identifie à l'apparition d'un arbre géant (au dessus du seuil, la composante géante n'est cependant plus un arbre, comme le prouve le calcul du 2-cœur ci-dessous).

À tout ensemble de graphes aléatoires dilués on associe les arbres dont les nœuds ont même distribution des degrés $\{p(k)\}_k$. Pour un de ces arbres, la suppression au hasard d'un nœud 0, de connectivité k_0, engendre k_0 sous-arbres déconnectés (voir la figure 4.3). Les arbres tronqués ainsi générés ont eux-même une distribution des degrés $p(k)$, excepté pour leur racine i qui en raison de la suppression de son lien avec 0 a une connectivité k_i décrite par une distribution différente, notée $q(k)$. Si $k_i + 1$ est la connectivité de i dans l'arbre initial, de distribution des degrés $p(k_i + 1)$, la probabilité pour

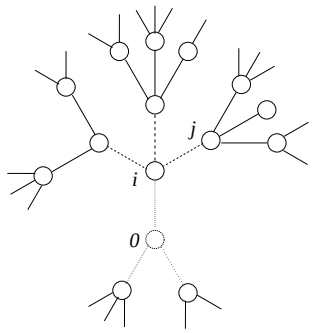

FIG. 4.3 – *Arbres et arbres tronqués.* La suppression du nœud 0 résulte en k_0 arbres tronqués qui ont pour racines ses voisins i. Si i appartient à la $(n+1)$-ème génération, ses premiers voisins, excepté 0, appartiennent à la n-ème génération, et les voisins de ces voisins, excepté i, à la $(n-1)$-ème.

i d'être connecté à 0 est proportionnelle à $(k_i+1)/\langle k\rangle$ où $\langle k\rangle \equiv \sum_k kp(k)$ est la connectivité moyenne. Ainsi la distribution de la connectivité k_i de la racine i de l'arbre tronqué est

$$q(k) = \frac{(k+1)p(k+1)}{\langle k\rangle}. \tag{4.9}$$

En particulier si $p(k) = \delta_{k,r}$ (graphes réguliers) alors $q(k) = \delta_{k,r-1}$ et si $p(k) = \gamma^k e^{-\gamma}/k!$ (graphes poissonniens) alors $q(k) = p(k)$. La propriété cruciale des arbres tronqués qui fonde leur intérêt est que leur structure, et notamment la distribution $q(k)$ des degrés de la racine, est reproduite chez les sous-arbres engendrés lorsque i est supprimé à son tour.

Pour un arbre, soit ρ la probabilité qu'un nœud 0 soit relié à l'infini. Cette probabilité dépend seulement des probabilités η que ses voisins i soient eux-mêmes connectés à l'infini, *en l'absence* du site 0 (la cavité) ; η correspond donc à la probabilité que la racine d'un arbre tronqué soit elle-même reliée à l'infini. Pour éviter d'emblée la référence à l'infini, on considère d'abord des arbres tronqués finis, construits récursivement en branchant, à la génération $(n+1)$ une nouvelle racine i à k_i arbres tronqués de génération n, où k_i est pris selon la distribution $q(k)$ (voir la figure 4.3). La probabilité $\eta_{n+1}^{(i\to 0)}$ pour i d'être connecté à un nœud de première génération, s'exprime en fonction de la probabilité $\eta_n^{(j\to i)}$ que ses k_i voisins $j = 1, \ldots, k_i$ de la génération n le soient : plus précisément, i n'est pas connecté si et seulement si aucun de ses voisins ne l'est lui-même,

$$1 - \eta_{n+1}^{(i\to 0)} = \prod_{j=1}^{k_i} (1 - \eta_n^{(j\to i)}). \tag{4.10}$$

Moyennée sur la connectivité à l'intérieur de chaque génération, cette relation devient

$$1 - \eta_{n+1} = \sum_{k=0}^{\infty} q(k)(1 - \eta_n)^k. \tag{4.11}$$

Lorsqu'il existe, le point fixe stable η de cette récursion décrit un arbre infini, dit *réseau de Bethe*. L'existence d'un point fixe stable est en fait intimement lié à la validité de l'approximation des arbres, une dépendance aux conditions au bord pouvant faire perdre son sens à la notion d'arbre infini. Le critère d'existence et d'unicité d'un point fixe stable n'est cependant ni nécessaire ni suffisant pour valider cette approche, ainsi qu'il sera discuté en détail au chapitre 8.

Pour les graphes poissonniens avec $p(k) = \gamma^k e^{-\gamma}/k!$, le point fixe de (4.11) satisfait

$$\eta = 1 - e^{-\gamma\eta}. \tag{4.12}$$

Cette équation n'admet une solution η non nulle que pour $\gamma > \gamma_c = 1$ qui marque le seuil de la transition de phase de percolation (voir la figure 4.4). Ceci est conforme aux résultats connus en théorie des graphes [Bol01] : un graphe poissonnien de connectivité $\gamma < 1$ ne contient *presque sûrement* pas de composante géante, tandis qu'un graphe avec $\gamma > 1$ en contiendra *presque sûrement* une, où « presque sûrement » signifie ici avec probabilité 1 dans la limite $N \to \infty$.

κ-cœur

La transition de percolation est continue, le paramètre d'ordre η augmentant continûment depuis zéro à γ_c (voir la figure 4.4). Une variante, la transition de *κ-cœur*, fournit une nouvelle illustration de l'approximation des arbres tout en mettant en évidence des transitions discontinues. Le κ-cœur d'un graphe est le sous-graphe de taille maximale dont tous les nœuds ont degré au moins κ. Le problème géométrique consistant à déterminer sa taille pour un graphe G se formule également en terme de problème d'optimisation : il consiste à placer sur les nœuds du graphe le maximum de particules avec la contrainte que chaque particule doit être entourée d'au moins κ voisines. Ce problème est donc associé au système de particules dont la fonction de partition dans l'ensemble grand-canonique est donnée par

$$Z(\mu) = \sum_{\{n_i\}_i \in \{0,1\}^N} \prod_i \delta_{n_i, \theta(\sum_{j \in i} n_j - \kappa)} e^{\mu \sum_i n_i}, \tag{4.13}$$

où $\theta(x) = 1$ si $x \geq 0$ et 0 sinon, et $j \in i$ désigne les voisins de i.

Le κ-cœur subit aussi une transition de percolation quand la connectivité est augmentée ; le cas de la composante géante correspond en fait au problème du 2-cœur. Comme précédemment, la probabilité ρ d'appartenir au κ-cœur s'obtient par le truchement d'un « champ de cavité » η, qui correspond ici à la probabilité de satisfaire la propriété (C) suivante : le nœud serait dans le κ-cœur si un voisin lui-même dans le κ-cœur lui était ajouté. Sous l'hypothèse d'indépendance des voisins en son absence (approximation des arbres), le nouveau nœud a la propriété (C) pourvu qu'au moins $(\kappa - 1)$ de ses k voisins la possède, d'où, en moyenne,

$$\eta = \sum_{k=0}^{\infty} q(k) \sum_{r=\kappa-1}^{k} \binom{k}{r} \eta^r (1-\eta)^{k-r}. \tag{4.14}$$

Étant donné ce champ de cavité η, le « champ total » ρ s'en déduit, qui correspond à la probabilité qu'au moins κ des k voisins vérifient (C),

$$\rho = \sum_{k=0}^{\infty} p(k) \sum_{r=\kappa}^{k} \binom{k}{r} \eta^r (1-\eta)^{k-r}, \tag{4.15}$$

où cette fois intervient la distribution originale $p(k)$, et non celle $q(k)$ des racines d'arbres tronqués, comme dans (4.14) ; ρ s'interprète aussi comme la densité maximale de particules, soit encore l'opposée de l'énergie fondamentale du problème d'optimisation, $\epsilon = -\rho$. Lorsqu'elles sont appliquées au cas poissonnien $p(k) = \gamma^k e^{-\gamma}/k!$, ces formules donnent ainsi

$$\begin{aligned} \eta &= 1 - e^{-\gamma\eta} \sum_{r=0}^{\kappa-2} \frac{(\gamma\eta)^r}{r!}, \\ \rho &= 1 - e^{-\gamma\eta} \sum_{r=0}^{\kappa-1} \frac{(\gamma\eta)^r}{r!}. \end{aligned} \tag{4.16}$$

On trouve de la sorte que le 2-cœur apparaît continûment simultanément au 1-cœur, à $\gamma_c(\kappa = 1) = \gamma_c(\kappa = 2) = 1$, signifiant que la composante connectée géante possède des boucles dès son apparition. En revanche pour $\kappa \geq 3$, la transition s'effectue à $\gamma_c(\kappa) > \gamma_c(1)$, où par exemple $\gamma_c(3) \simeq 3,35$; de plus, la transition est alors discontinue, avec apparition à la transition d'un κ-cœur géant de taille $N\rho_c(\kappa)$ où $\rho_c(\kappa) > 0$, avec $\rho_c(\kappa = 3) \simeq 0,27$ par exemple (voir la figure 4.4).

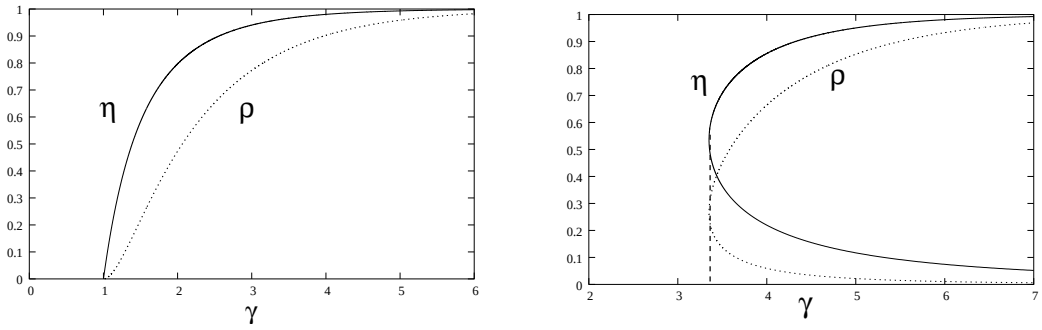

FIG. 4.4 – *Percolation des 2 et 3-cœurs.* Les solutions aux équations (4.16) sont représentées pour $\kappa = 2$ (à gauche) et $\kappa = 3$ (à droite). Elles sont obtenues sous forme paramétrée, en posant $t = \gamma\eta$, de sorte que $\gamma(t) = t/\eta(t)$ et $\eta(t) = 1 - e^{-t}\sum_{r=0}^{\kappa-2} t^r/r!$. Pour $\kappa = 3$ et $\gamma > \gamma_c \simeq 3,35$, trois solutions sont présentes, $\eta = 0$ et deux branches non nulles : la branche inférieure est cependant instable sous itération et la solution physique est décrite par la branche supérieure.

4.4 Transitions de phase

Le calcul de la taille du κ-cœur peut être vu comme la réponse à un problème d'optimisation ; ce dernier est cependant facile (polynômial) du point de vue algorithmique : le κ-cœur peut en effet être obtenu par une procédure d'*effeuillage* au cours de laquelle tous les nœuds ayant degré inférieur à κ sont successivement supprimés, laissant finalement un sous-graphe correspondant exactement au κ-cœur. La même approximation d'arbre avec laquelle la taille du κ-cœur a été déterminée permet cependant aussi d'attaquer des problèmes NP-complets, tels les problèmes de couverture ou de coloriage. Ces problèmes présentent aussi des transitions de phase, dont l'ubiquité est brièvement discutée ici.

Effet de seuil

Une propriété $\mathcal{P}$ d'un graphe, telle qu'être connecté, être planaire ou posséder exactement k nœuds isolés (donc réponse à une question de type oui-non), est dite *monotone*, si elle est préservée lorsque des liens sont ajoutés ou lorsque que des liens sont retranchés, c'est-à-dire si pour tout $A \subseteq B \subseteq \mathcal{G}$, $A \in \mathcal{P}$ implique $B \in \mathcal{P}$ (propriété croissante), ou $B \in \mathcal{P}$ implique $A \in \mathcal{P}$ (propriété décroissante). Ainsi « être connecté » et « être planaire » sont des propriétés monotones, respectivement croissante et décroissante, tandis que « posséder exactement k nœuds isolés » est un exemple de propriété non monotone. Les propriétés monotones, auxquelles appartiennent l'existence d'un κ-cœur géant ou la q-coloriabilité, présentent toutes des effets de seuil qui se

traduisent physiquement par des transitions de phase, ainsi que précisé dans les paragraphes suivants.

En se limitant pour simplifier au modèle binomial et aux propriétés croissantes, la probabilité $\mathbb{P}_N(p)$ qu'une propriété croissante $\mathcal{P}$ soit satisfaite dans l'ensemble $\mathcal{G}(N,p)$ est, par définition, une fonction croissante de p, avec $\mathbb{P}_N(p=0)=0$ et $\mathbb{P}_N(p=1)=1$. Pour $\varepsilon \in]0,1[$, on définit $p_N^-(\varepsilon)$ et $p_N^+(\varepsilon)$ tels que $\mathbb{P}_N(p_N^-)=\varepsilon$ et $\mathbb{P}_N(p_N^+)=1-\varepsilon$. La largeur de la fenêtre à l'intérieur de laquelle s'effectue la transition est alors décrite par $\delta(\varepsilon) \equiv p_N^+(\varepsilon)-p_N^-(\varepsilon)$; un *effet de seuil* correspond à une fenêtre se rétrécissant quand la taille N des graphes augmente,

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \delta_N(\varepsilon) \to 0 \quad (N \to \infty). \tag{4.17}$$

Dans ce cadre, un théorème assure que toute propriété monotone possède un seuil [BT86], justifiant ainsi l'omniprésence de ce phénomène dans les problèmes impliquant des graphes aléatoires.

La présence d'un effet de seuil recouvre cependant des transitions plus ou moins tranchées. Soit en effet p_N^c défini par $\mathbb{P}_N(p_N^c)=1/2$, destiné à localiser la position du seuil. Pour le 2-coloriage par exemple, il est montré que $p_N^c \sim 1/N$, suggérant une transition dans $\tilde{G}_N^{(\gamma)}$ pour $\gamma_c=1$, mais $\delta_N(\varepsilon) \sim 1/N$ de sorte que la transition est progressive et, non abrupte de 0 à 1 comme pour le κ-cœur. De tels seuils sont dit *grossiers*, par opposition aux seuils *tranchés*, dont la définition requiert

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \frac{\delta_N(\varepsilon)}{p_N^c} \to 0 \quad (N \to \infty). \tag{4.18}$$

Pour prendre un exemple, le q-coloriage présente un seuil grossier pour $q=2$, qui devient tranché pour $q \geq 3$ (voir la figure 4.5) ; le théorème disponible pour $q \geq 3$ [AF99] s'énonce exactement

$$\begin{aligned} \exists \gamma_q(N), \quad \forall \varepsilon > 0, \quad & \lim_{N\to\infty} \mathbb{P}_N(p=(\gamma_q(N)-\varepsilon)/N)=1, \\ & \lim_{N\to\infty} \mathbb{P}_N(p=(\gamma_q(N)+\varepsilon)/N)=0. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Ce résultat, qui reflète l'état actuel des connaissances mathématiques sur la question, n'implique toutefois pas au sens strict la présence d'une transition de phase au sens physique, qui exige de plus que la position du seuil admette une limite,

$$\exists \gamma_q, \quad \gamma_q(N) \to \gamma_q \quad (N \to \infty). \tag{4.20}$$

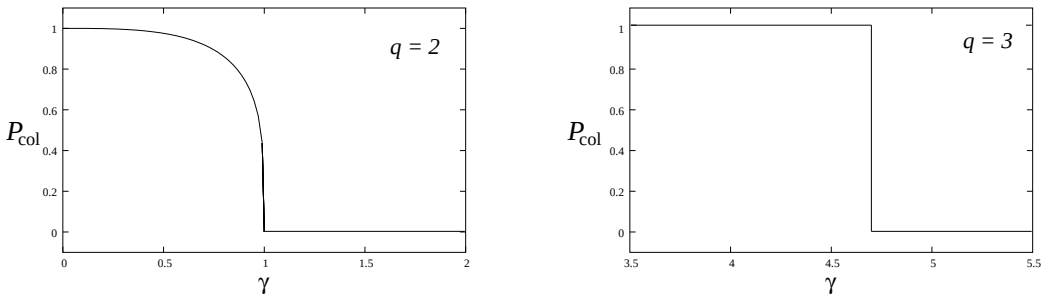

FIG. 4.5 – *Probabilités de q-coloriabilité.* À gauche, la probabilité $P_{\rm col}$ qu'un graphe de $\tilde{G}_N^{(\gamma)}$ soit 2-coloriable, décrite par $P_{\rm col}(\gamma) = [(1-\gamma)/(1+\gamma)]^{1/4} e^{\gamma/2}$ [vMS02], subit une transition continue à $\gamma_c = 1$. À droite, la probabilité $P_{\rm col}$ qu'un graphe de $\tilde{G}_N^{(\gamma)}$ soit 3-coloriable subit une transition discontinue à $\gamma_c \simeq 4,69$.

L'existence de cette limite, qui ne semble faire guère de doute, n'a pour l'heure que le statut mathématique de conjecture. La détermination de ce seuil est en fait un des objectifs de la méthode de cavité développée pour les graphes dilués dans les chapitres suivants. Pour ce qui concerne le coloriage, une information est déjà contenue dans le calcul de percolation du κ-cœur : en l'absence de κ-cœur, le graphe est en effet sûrement κ-coloriable, de sorte que le seuil de percolation du κ-cœur fournit une borne inférieure (dont on verra qu'elle est stricte) sur le seuil de κ-coloriabilité.

Transitions et complexité

L'existence d'une relation entre transitions de phase et complexité algorithmique a fait l'objet de plusieurs conjectures. La première d'entre elles associait la NP-complétude à la présence d'une transition vitreuse [FA86] ; elle ne peut cependant être valide puisque la NP-complétude concerne les pires instances alors que seules les instances typiques sont accessibles à l'analyse statistique (un contre-exemple est le problème du voyageur de commerce qui est NP-complet mais dépourvu de transition de phase pour une instance typique avec liens indépendants). On observe toutefois expérimentalement, en résolvant par certains algorithmes des instances de taille finie de problèmes tels que le coloriage, que le temps médian de résolution présente un pic situé au voisinage du seuil ; ce constat a conduit à postuler que les difficultés rencontrées sur les instances typiques avaient pour origine la présence d'une transition de phase [CKT91]. Cette conjecture est cependant elle aussi trop naïve, ainsi que le révèle par exemple la présence d'une transition dans le 2-coloriage (2-COL), qui est pourtant un problème polynômial.

Néanmoins, 2-COL ne subit qu'une transition grossière, tandis que le q-COL pour $q \geq 3$, qui est lui NP-complet, présente une transition tranchée, ce qui suggère d'attacher la complexité algorithmique non à la simple présence d'une transition, mais à sa nature, continue ou discontinue. La encore un contre-exemple peut cependant être exhibé : le problème du κ-cœur pour $\kappa \geq 3$ possède une transition discontinue mais l'algorithme d'effeuillage le résout en temps polynômial. Le caractère discontinu de la transition n'est donc certainement pas suffisant ; l'étude comparée des transitions continue de 2-SAT (problème P) et discontinue de 3-SAT (problème NP-complet), analogues aux transitions de 2-COL et 3-COL, a donné lieu à la conjecture plus élaborée selon laquelle la complexité algorithmique typique devait être associée à une transition vitreuse avec paramètre d'ordre discontinue, dite *aléatoire du premier ordre*, du type de celle du REM [MZK+99] (ces transitions seront décrites en détail dans la troisième partie). Le problème des systèmes linéaires dans $\mathbb{Z}_2$, qui s'inscrit sous le nom de XOR-SAT dans le cadre des problèmes de satisfaction de contraintes décrits par (4.8), met pourtant en défaut cette correspondance, puisqu'il est soluble en temps polynômial, tout en présentant une transition du type de 3-COL et 3-SAT [RTWZ01] (voir 9.2 pour une discussion des particularités de ce modèle).

Les échecs de ces diverses tentatives suggèrent qu'il soit vain de chercher à établir une relation universelle entre complexité algorithmique et propriétés thermostatiques, même si les deux points de vue sont manifestement reliés. Une approche fondée sur la physique statistique et limitée à la description de la structure de l'espace des phases ne peut en effet pas rendre compte de l'existence, pour certains problèmes, d'algorithmes spécifiques capables d'explorer les configurations de façon globale ; tel est ainsi le cas pour le κ-cœur, dont l'organisation de l'espace des phases, qui se lit directement sur la structure géométrique des graphes, s'obtient aisément par un processus d'effeuillage, ou pour XOR-SAT qui dispose d'une méthode spécifique non locale, la méthode du pivot de Gauss.

Notes et références

Une référence classique en matière de graphes aléatoires est [Bol01]. L'équivalence asymptotique entre les modèles binomial et uniforme fait l'objet de théorèmes dont les énoncés peuvent être trouvés dans [JLR00]. Elle est à rapprocher à l'équivalence des ensembles microcanonique et canonique en physique statistique : le modèle uniforme s'identifie en fait exactement avec un ensemble microcanonique et le modèle binomial avec un ensemble canonique pour le système dont l'énergie est $\epsilon = M/N$.

Les problèmes d'optimisation définis sur graphes aléatoires sont loin d'être limités aux exemples évoqués ici [GJ79]. Le problème de la couverture (*vertex-cover* en anglais), aussi appelé « independent-set » en mathématiques, a été étudié du point de vue physique par Weigt et Hartmann [WH00, WH01], qui ont proposé l'analogie avec le système de sphères dures. La correspondance du problème de coloriage avec le modèle de Potts est elle très classique [Wu82].

L'approximation des arbres est plus connue sous le nom d'« approximation de Bethe » [Bax82] : la terminologie est choisie ici pour renvoyer explicitement à l'hypothèse sous-jacente. La transition de phase subie par la composante géante est l'objet d'une des toutes premières études des graphes aléatoires, par Erdős et Rényi [ER60] ; ce sujet classique [Bol01, JLR00] possède de nombreuses ramifications en physique, sous le nom de percolation [SA92]. L'approche empruntée ici est parente de la théorie des processus de branchement de type Walton-Gatson [AN72]. Enfin, l'argument sur le caractère en arbre des composantes isolées s'inspire de [EMH04].

Le problème du κ-cœur est également un problème classique de théorie des graphes [Bol01, JLR00] ; il est à noter que sa solution mathématique, par Pittel, Spencer et Wormald [PSW96], se fonde sur l'analyse de l'algorithme d'effeuillage. Le κ-cœur intervient en physique dans l'étude de modèles de rigidité [Mou03] et, sous le nom de *bootstrap percolation*, dans l'étude de la dynamique de modèles de verres [SBT05].

Chapitre 5

Optimisation sur les graphes

L'approximation des arbres est à la base de la méthode de cavité appliquée aux problèmes d'optimisation définis sur graphes aléatoires. Cette approche est présentée ici sous sa forme la plus simple, dite « liquide ».

5.1 Des arbres aux graphes

La stratégie générale est, à l'instar de l'étude du κ-cœur, de mettre en relation les propriétés des graphes dilués avec celles d'un processus de branchement impliquant des arbres. Cette stratégie est illustrée ici avec le problème de la couverture introduit en 4.2 dont il s'agit de déterminer la densité d'énergie fondamentale ϵ, qui est le nombre minimum de nœuds pouvant être laissés découverts sans que deux nœuds voisins soient simultanément vides : $\epsilon = 1 - \rho$ si ρ est la densité maximale des sphères dures obtenue pour $\mu \to \infty$ (le problème plus général à μ fini sera aussi envisagé plus bas). Pour l'arbre tronqué fini, de racine i, on désigne par $E_0^{(i\to 0)}$ et $E_1^{(i\to 0)}$ les énergies fondamentales conditionnellement à l'absence ou la présence d'une particule (couverture) sur la racine i (voir la figure 5.1). Ces coûts s'expriment en fonctions des mêmes quantités $E_0^{(j\to i)}$ et $E_1^{(j\to i)}$ relatives aux sous-arbres tronqués générés par la suppression de i,

$$\begin{aligned} E_0^{(i\to 0)} &= 1 + \sum_{j\in i-0} \min(E_0^{(j\to i)}, E_1^{(j\to i)}), \\ E_1^{(i\to 0)} &= \sum_{j\in i-0} E_0^{(j\to i)}, \end{aligned} \tag{5.1}$$

où la notation $j \in i - 0$ indique que le nœud j est lié à i, mais différent de 0. La première ligne de (5.1) signifie ainsi que la non-couverture de i induit un coût unité, mais n'impose aucune contrainte sur la présence ou non de

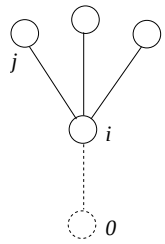

FIG. 5.1 – *Structure locale d'un arbre.* Ce schéma résume les notations utilisées dans le traitement des graphes simples.

couverture sur les voisins, pour lesquels est donc choisie l'option la moins coûteuse, d'où le « min ». La seconde ligne de (5.1) signifie par contre que la couverture de i n'engendre aucun surcoût mais contraint les voisins à être découverts.

Lorsque la construction est interrompue avant l'ajout du nœud 0, le coût minimal global sur l'arbre tronqué est donné par $\min(E_0^{(i\to 0)}, E_1^{(i\to 0)})$. Afin de manipuler des quantités conservant un sens quand la taille de l'arbre diverge, un *champ de cavité* $h^{(i\to 0)}$ est défini comme le surcoût (éventuel) engendré en contraignant la racine i a être découverte,

$$h^{(i\to 0)} \equiv E_0^{(i\to 0)} - \min(E_0^{(i\to 0)}, E_1^{(i\to 0)}). \tag{5.2}$$

La récursion (5.1) définit une fonction d'itération $\hat{h}$ pour les champs (des chapeaux sont conventionnellement attribués aux fonctions),

$$h^{(i\to 0)} = \hat{h}^{(k)}(\{h^{(j\to i)}\}_{j\in i-0}) = \max\left(0, 1 - \sum_{j\in i-0} h^{(j\to i)}\right), \tag{5.3}$$

où l'indice k dans $\hat{h}^{(k)}$ indique le nombre d'arguments de cette fonction. Les champs étant entiers puisque les énergies le sont, la relation (5.3) indique de plus qu'ils ne peuvent valoir que 0 ou 1 ; l'itération peut alors être représentée schématiquement par un jeu de règles de transformation d'une génération à l'autre,

$$\begin{aligned} 0 + \cdots + 0 &\to 1, \\ \text{combinaison incluant un } 1 &\to 0, \end{aligned} \tag{5.4}$$

dont l'interprétation est qu'il faut couvrir le nouveau nœud (champ 1), chaque fois que les parents le permettent, c'est-à-dire chaque fois que tous les parents sont découverts (tous les champs 0), et ne pas le couvrir sinon, car la

couverture d'un des parents l'interdit alors.

Les champs de cavité contiennent une information locale à partir desquels les quantités globales peuvent être reconstituées. En effet, le surcoût associé à l'addition du nœud i à l'issue de son branchement aux $j \in i-0$ s'écrit

$$\Delta E^{(i\to 0)} = \min(E_0^{(i\to 0)}, E_1^{(i\to 0)}) - \sum_{j\in i-0} \min(E_0^{(j\to i)}, E_1^{(j\to i)}) \tag{5.5}$$

qui, en terme des champs, définit la fonction

$$\Delta \hat{E}^{(k)}(\{h^{(j\to i)}\}_{j\in i-0}) = \min(1, \sum_{j\in i-0} h^{(j\to i)}). \tag{5.6}$$

Le coût optimal total sur l'arbre s'obtient en tenant compte des conditions au bord puis en sommant les différents $\Delta E^{(i\to j)}$. Cette méthode de calcul définit ainsi un algorithme de type *passage de message*, exact pour tout arbre tronqué fini, qui consiste à calculer les champs $h^{(j\to i)}$ sur chaque lien orienté à partir des champs à la génération précédente, puis de calculer finalement l'énergie minimal totale avec les $\Delta E^{(j\to i)}$ qui sont des fonctions de ces champs d'après (5.6).

Réseau de Bethe

Le passage de l'arbre au graphe pose le problème des conditions au bord, cruciales pour l'arbre mais sans objet pour le graphe. La situation est cependant simple si l'itération des champs d'une génération à l'autre possède un point fixe. L'arbre étant hétérogène, avec notamment des nœuds ayant différents degrés, on ne peut cependant attendre en général que l'itération (5.3) conduise à une valeur des champs unique pour tous les liens orientés. En revanche, il est envisageable que la distribution $P_n(h)$ des champs entre les différents liens à la génération n devienne asymptotiquement indépendante de n. L'équation d'itération pour cette distribution s'écrit

$$P_{n+1}(h_0) = \sum_{k=0}^{\infty} q(k) \int \prod_{j=1}^{k} dh_j P_n(h_j) \delta(h_0 - \hat{h}^{(k)}(h_1, \ldots, h_k)), \tag{5.7}$$

où $q(k)$ est donné en fonction de la distribution des degrés $p(k)$ des graphes aléatoires par la relation (4.9). Dans le cas de la couverture où les champs ne prennent que deux valeurs, un réel suffit à paramétriser la distribution, $P_n = \eta_n \delta_1 + (1-\eta_n)\delta_0$, où $\delta_x(h) \equiv \delta(h-x)$, et la récursion devient

$$\eta_{n+1} = \sum_{k=0}^{\infty} q(k)(1-\eta_n)^k. \tag{5.8}$$

Cette formule est à rapprocher de l'itération (4.11) déterminant l'apparition de la composante géante. Pour les graphes poissonniens, $q(k) = p(k) = \gamma^k e^{-\gamma}/k!$, son point fixe satisfait l'équation

$$\eta = e^{-\gamma\eta} \tag{5.9}$$

qui, à la différence de (4.12), possède toujours une seule solution dans $[0, 1]$, représentée sur la figure 5.2.

Frustration et solutions vitreuses

Avant de poursuivre sur la base de ce point fixe, il convient de noter que (5.8) admet aussi des solutions cycliques. La solution $\eta_{2n} = 0$ et $\eta_{2n+1} = 1$, qui correspond à alterner des couches couvertes et découvertes, est même certainement celle décrivant la couverture optimale d'un arbre. La meilleure stratégie pour l'obtenir consiste d'ailleurs à commencer non du bord, mais de la racine et, à partir d'elle, de couvrir les nœuds chaque fois que possible : partant d'une racine couverte, ses voisins doivent être tous découverts, mais ses seconds voisins peuvent être tous couverts, *etc.* Cette procédure permet plus généralement de déterminer l'optimum sur du problème défini sur un arbre, ainsi qu'exposé dans l'appendice A de [Riv04].

Une telle solution « cristalline » ne peut toutefois pas correspondre à la solution sur un graphe aléatoire, dont les arbres ne reflètent que la structure locale. En effet, la présence de boucles, même de taille divergente, a toujours pour conséquence de *frustrer* un tel cristal, c'est-à-dire en particulier d'exclure tout ordre de type cyclique. En termes d'arbres seulement, les solutions cristallines requièrent des conditions au bord très particulières, avec une corrélation maximale dans l'affectation des nœuds de première génération. La modélisation de l'intérieur d'un graphe aléatoire exige cependant physiquement de se restreindre à des conditions au bord pour lesquelles chaque nœud est couvert ou non, indépendamment des autres.

Même sous cette restriction, qui impose d'ignorer les solutions cycliques, la solution *liquide* qui associe un champ de cavité $h^{(j\to i)}$ à chaque lien orienté $(j \to i)$, n'est pas toujours pertinente, ainsi que le laisse apparaître clairement l'exemple des graphes réguliers. Pour ceux-ci, l'« intérieur de l'arbre infini », appelé *réseau de Bethe*, possède une symétrie d'invariance par translation qui exige que tous les nœuds possèdent le même champ. Or, d'après (5.3), la valeur de ce champ pour un graphe r-régulier doit être $h_{\text{liq}} = 1/(r-1)$, ce qui, pour $r \geq 3$, est incompatible avec la condition $h_{\text{liq}} \in \{0, 1\}$. L'invariance par translation doit donc être brisée dans ce cas, ce qui implique qu'existent

non pas une mais plusieurs solutions. De plus, ces différentes solutions devant être reliées par les « opérations de symétrie », qui comprennent par exemple pour chaque nœud la permutation de ses voisins, leur nombre doit être exponentiel. Une telle situation, qualifiée de *vitreuse* en référence au désordre interne autogénéré, nécessite en général d'examiner les grandes déviations sur l'ensemble de ces solutions, afin de déterminer celles d'entre elles qui correspondent effectivement à un optimum ; cette étude est déférée au chapitre 7.

5.2 Approche liquide

Il est cependant des situations où l'approche liquide, qui consiste à ne retenir qu'une solution typique, suffit à décrire l'optimum sur des graphes aléatoires. Tel est le cas notamment pour les graphes poissonniens de faible connectivité moyenne γ. En effet lorsque $\gamma \ll 1$, les graphes sont essentiellement constitués de nœuds isolés et de couples de nœuds connectés et, en l'absence de boucles, s'identifie à l'arbre infini qui lui est associé (celui-ci est plus exactement une *forêt* composée de plusieurs arbres disjoints). En première approximation, le nombre de solutions aux équations de cavité est alors de l'ordre de $2^{\gamma N}$, correspondant au choix, pour chaque couple de nœuds connectés, de celui des deux membres du couple qui est couvert. Ce nombre est donc exponentiel mais chaque solution ayant même coût d'ordre γN, cette multiplicité est sans incidence. Cet argument suggère que l'approche liquide s'applique dans le problème de couverture au moins pour les γ suffisamment petits ; on verra en fait qu'elle demeure valable même au delà du seuil de percolation de la composante géante $\gamma = 1$, et ne devient insuffisante qu'à partir de $\gamma_c = e \simeq 2,71$.

Liquide pour les graphes

Pour en revenir au calcul de l'énergie optimale à partir du point fixe (5.9), la démarche suivie pour le κ-cœur suggère qu'elle vaut ici $\epsilon = 1 - \rho$, où ρ représente le champ de cavité total, donné par

$$\rho = \sum_{k=0}^{\infty} p(k)(1-\eta)^k, \tag{5.10}$$

qui, pour les graphes poissonniens conduit par exemple à $\epsilon = 1 - \eta$. Cette stratégie consistant à lier directement le champ total (obtenu sur l'arbre) à l'énergie (sur un graphe) est cependant incorrecte en général car la valeur de l'énergie dépend du nombre de liens présents, et que le rapport de ce nombre

au nombre de nœuds diffère sur l'arbre et sur le graphe : le nombre total M de liens pour un arbre vaut en effet N alors qu'il est d'ordre $\langle k\rangle N/2$ pour un graphe aléatoire. Si cette différence n'a pas d'incidence pour le κ-cœur, elle induit pour la couverture (et de même pour le coloriage) un terme correctif.

Une manière heuristique de dériver la formule correcte pour ϵ est de repartir de son expression sur un arbre comme somme de $\Delta E^{(i\to j)}$ et de s'affranchir de la direction globale, du bord vers la racine, en symétrisant selon les différentes orientations locales. Pour cela, on introduit les $\Delta E^{(i)}$, correspondant au branchement du site i à la totalité de ses voisins, la différence avec $\Delta E^{(i\to j)}$ étant le coût du lien supplémentaire (ij), $\Delta E^{(i)} = \Delta E^{(i\to j)} + \Delta E^{(ij)}$. Ainsi, si on remplace la somme sur les liens $(i \to j)$ orientés selon une certaine direction par une somme sur les nœuds i, il faut retrancher une somme sur les liens (ij), ce qui conduit à

$$\epsilon = \frac{1}{N}\left[\sum_i \Delta E^{(i)} - \sum_{\langle i,j\rangle} \Delta E^{(ij)}\right]. \tag{5.11}$$

Les différents surcoûts ΔE s'expriment au moyen des champs de cavité,

$$\begin{aligned}\Delta E^{(i)} =& \min(E_0^{(0)}, E_1^{(0)}) - \sum_{j\in i-0} \min(E_0^{(j)}, E_1^{(j)})\\ =& \Delta\hat{E}_n^{(k_i)}(\{h_j\}_{j\in i-0}) = \min(1, \sum_{j\in i-0} h_j),\end{aligned} \tag{5.12}$$

où k_i désigne le degré de i, et

$$\begin{aligned}\Delta E^{(ij)} =& \min(E_0^{(i\to j)} + E_0^{(j\to i)}, E_0^{(i\to j)} + E_1^{(j\to i)}, E_1^{(i\to j)} + E_0^{(j\to i)})\\ &- \min(E_0^{(i\to j)}, E_1^{(i\to j)}) - \min(E_0^{(j\to i)}, E_1^{(j\to i)})\\ =& \Delta\hat{E}_\ell(h^{(i\to j)}, h^{(j\to i)}) = \min(h^{(i\to j)}, h^{(j\to i)}).\end{aligned} \tag{5.13}$$

À partir de ces formules, on obtient la moyenne de ϵ sur un ensemble de graphes caractérisé par une distribution de connectivité $p(k)$. Rapporté au nombre N de nœuds, le nombre moyen de liens est $\langle k\rangle N/2$, de sorte que

$$\begin{aligned}\langle\epsilon\rangle =& \langle\Delta\hat{E}_n^{(k)}(h_1,\ldots,h_k)\rangle_{(k,\{h_j\})} - \frac{\langle k\rangle}{2}\langle\Delta\hat{E}_\ell(h_1,h_2)\rangle_{(h_1,h_2)}\\ =& \sum_{k=0}^{\infty} p(k)\int\prod_{j=1}^{k} dh_j P(h_j)\Delta\hat{E}_n^{(k)}(h_1,\ldots,h_k)\\ &- \frac{1}{2}\left(\sum_{k=0}^{\infty} kp(k)\right)\int dh_1 P(h_1) dh_2 P(h_2)\Delta\hat{E}_\ell(h_1,h_2).\end{aligned} \tag{5.14}$$

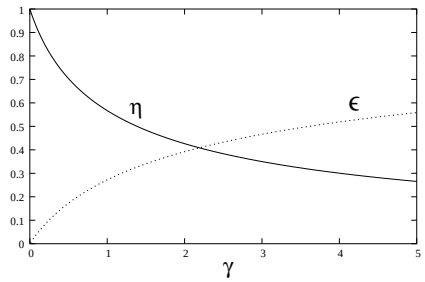

FIG. 5.2 – *Solution liquide au problème de la couverture sur graphes poissonniens.* Le paramètre d'ordre η donné par (5.9) et l'énergie typique ϵ donnée par (5.15) sont tracés en fonction de la connectivité moyenne γ.

Cette formule est redérivée de manière un tant soit peu plus convaincante au chapitre suivant où une analyse des grandes déviations sur l'ensemble des graphes la relie à l'énergie typique, soit $\langle\epsilon\rangle = \bar{\epsilon}$. Appliquée aux graphes poissonniens avec $P = \eta\delta_1 + (1-\eta)\delta_0$, elle prédit

$$\bar{\epsilon}^{(\gamma)} = 1 - \eta - \frac{\gamma}{2}\eta^2. \tag{5.15}$$

avec η donné par (5.9). Conformément à la discussion ci-dessus, il apparaît donc un terme correctif proportionnel au nombre de liens $\gamma N/2$. On vérifie également que $\bar{\epsilon}^{(\gamma)} \sim \gamma/2$ pour $\gamma \ll 1$ comme mentionné plus haut. Cela ne signifie toutefois pas que le calcul liquide présenté ici soit correct pour toutes les valeurs de γ ; le chapitre 8 reviendra sur cette question en montrant que sa validité est limitée à $\gamma < \gamma_c = e \simeq 2,71$.

Liquide pour les hypergraphes

Le raisonnement mené sur le problème de couverture s'étend sans complication majeure aux problèmes de satisfaction de contraintes tels que définis par (4.8). En adoptant des notations similaires, résumées sur la figure 5.3, l'analogue de l'équation (5.1) est ainsi

$$\begin{aligned} E_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \min_{\{\sigma_{b-i}\}_{b\in i-a}} \left[\sum_{b\in i-a} \left(\mathcal{E}_b[\sigma_b] + \sum_{j\in b-i} E_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) \right] + \mathcal{B}_i[\sigma_i] \\ &= \sum_{b\in i-a} \left[\min_{\sigma_{b-i}} \left(\mathcal{E}_b[\sigma_b] + \sum_{j\in b-i} E_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) \right] + \mathcal{B}_i[\sigma_i]. \end{aligned} \tag{5.16}$$

Le surcoût lié à l'addition d'un nœud pour des (hyper)arbres tronqués vaut

$$\Delta E^{(i\to a)} = \min_{\sigma_i} E_{\sigma_i}^{(i\to a)} - \sum_{b\in i-a} \sum_{j\in b-i} \min_{\sigma_j} E_{\sigma_j}^{(j\to b)}. \tag{5.17}$$

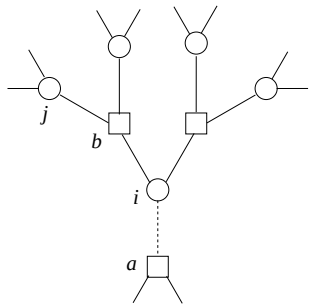

FIG. 5.3 – *Structure locale d'un hypergraphe.* Ce schéma résume les notations utilisées dans le traitement des graphes simples.

Une façon de définir les champs de cavité $h_{\sigma_i}^{(i\to a)}$, qui sont en général des vecteurs à q composantes indexées par σ_i, est

$$h_{\sigma_i}^{(i\to a)} \equiv E_{\sigma_i}^{(i\to a)} - \sum_{b\in i-a}\sum_{j\in b-i} \min_{\sigma_j} E_{\sigma_j}^{(j\to b)}. \tag{5.18}$$

Ce choix est tel que le surcoût (5.17) se récrit simplement

$$\Delta E^{(i\to a)} = \min_{\sigma_i} h_{\sigma_i}^{(i\to a)}. \tag{5.19}$$

En terme des champs, l'équation de cavité liquide (5.16) prend la forme

$$\begin{aligned} h_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \sum_{b\in i-a} u_{\sigma_i}^{(b\to i)} + \mathcal{B}_i[\sigma_i], \\ u_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \min_{\sigma_{b-i}} \left(\mathcal{E}_b[\sigma_b] + \sum_{j\in b-i} h_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) - \sum_{j\in b-i} \min_{\sigma_j} \left(h_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right). \end{aligned} \tag{5.20}$$

où un deuxième champ, u, est introduit comme intermédiaire. Ces deux relations définissent les fonctions $\hat{h}^{(i\to a)}(\{u^{(b\to i)}\})$ et $\hat{u}^{(b\to i)}(\{h^{(j\to b)}\})$ dont il sera fait usage par la suite. De façon générale, seules $(q-1)$ des q composantes des champs h ou u sont nécessaires à la caractérisation du système, comme illustré par la couverture où $q = 2$ et un champ scalaire suffit. Pour un problème comme le coloriage, il est néanmoins commode de conserver les q composantes afin de préserver la symétrie des couleurs. Les champs admettent toujours une interprétation en termes de surcoût : le champs $u_{\sigma_i}^{(b\to i)}$ est le surcoût consécutif à l'addition d'une clause b lorsque i est fixé à σ_i, et le champ $h_{\sigma_a}^{(i\to a)}$ le surcoût consécutif à l'addition conjointe d'un nœud i et des clauses $b \in i-a$. Un champ *total* $H^{(i)}$ peut aussi être défini sur chaque nœud i par

$$H_{\sigma_i}^{(i)} = \sum_{a\in i} u_{\sigma_i}^{(a\to i)} + \mathcal{B}_i[\sigma_i]. \tag{5.21}$$

Les $\mathcal{E}_a$ et $\mathcal{B}_i$ étant à valeurs entières, les composantes des champs de cavité sont elles-aussi restreintes aux entiers. Pour les problèmes de satisfaction de contraintes où $\mathcal{E}_a \in \{0,1\}$, on peut de plus remarquer que le minimum $\min_{\sigma_{b-i}} \left(\mathcal{E}_b[\sigma_b] + \sum_{j\in b-i} h_{\sigma_j}^{(j\to b)}\right)$ dans (5.20) est atteint lorsque $\sum_{j\in b-i} h_{\sigma_j}^{(j\to b)}$ est minimisé. Ainsi

$$u_{\sigma_i}^{(b\to i)} \equiv \hat{u}^{(b\to i)}(\{h^{(j\to b)}\}_{j\in b-i}) = \min_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \sigma_j \in \arg\min_\tau (h_\tau^{(j\to b)})}} \mathcal{E}_b[\sigma_{b-i}, \sigma_i], \tag{5.22}$$

qui implique que $u_\sigma \in \{0,1\}$.

Suivant la même démarche que celle suivie pour établir l'équation (5.11), la symétrisation selon les différentes directions, conduit, à partir d'une solution des équations de cavité liquide (5.20) écrites pour tous les liens orientés, à l'expression pour un hypergraphe

$$\epsilon = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{N} \Delta E^{(i+a\in i)} - \sum_{a=1}^{M} (\ell_a - 1)\Delta E^{(a)}\right). \tag{5.23}$$

Cette formule fait intervenir le surcoût associé à l'addition d'un nœud i, conjointement avec l'ensemble des clauses $a \in i$ qui lui sont attachées,

$$\Delta E^{(i+a\in i)} = \min_{\sigma_i} H_{\sigma_i}^{(i)} = \min_{\sigma_i}\left(\sum_{a\in i} u_{\sigma_i}^{(a\to i)} + \mathcal{B}_i[\sigma_i]\right), \tag{5.24}$$

et le surcoût associé à l'addition de la clause a,

$$\begin{aligned}\Delta E^{(a)} &= \min_{\sigma_a}\left(\mathcal{E}_a[\sigma_a] + \sum_{i\in a} E_{\sigma_i}^{(i\to a)}\right) - \sum_{i\in a}\min_{\sigma_i} E_{\sigma_i}^{(i\to a)} \\ &= \min_{\sigma_a}\left(\mathcal{E}_a[\sigma_a] + \sum_{i\in a} h_{\sigma_i}^{(i\to a)}\right) - \sum_{i\in a}\min_{\sigma_i} h_{\sigma_i}^{(i\to a)}.\end{aligned} \tag{5.25}$$

Le cas des graphes simples donné par (5.11) est réobtenu avec $\ell_a = 2$, $\forall a$. La formule (5.23) traduit le résultat d'un ajout successif de nœuds ; une expression analogue s'écrit en envisageant un ajout successif des clauses,

$$\epsilon = \frac{1}{N}\left(\sum_{a=1}^{M} \Delta E^{(a+i\in a)} - \sum_{i=1}^{N} (k_i - 1)\Delta E^{(i)}\right). \tag{5.26}$$

Cette formule est « duale » de la précédente, au sens où le rôle des nœuds et des clauses est interchangé ; particularisée aux graphes simples réguliers,

elle est connue comme la *formule de Bethe*. Enfin, pour future référence il est utile de répertorier les expressions des différents déplacements d'énergie en fonction des champs de cavité h ou u :

$$\begin{aligned}
\Delta\hat{E}^{(i+a\in i)}(\{h^{(j\to a)}\}_{j\in a-i,a\in i}) &= \min_{\sigma_i}\left(\sum_{a\in i}\hat{u}^{(a\to i)}_{\sigma_i}(\{h^{(j\to a)}\}_{j\in a-i}) + \mathcal{B}_i[\sigma_i]\right),\\
\Delta\hat{E}^{(a)}(\{h^{(i\to a)}\}_{i\in a}) &= \min_{\sigma_a}\left(\mathcal{E}_a[\sigma_a] + \sum_{i\in a} h^{(i\to a)}_{\sigma_i}\right) - \sum_{i\in a}\min_{\sigma_i} h^{(i\to a)}_{\sigma_i},\\
\Delta\hat{E}^{(a+i\in a)}(\{u^{(b\to i)}\}_{b\in a-i,a\in i}) &= \min_{\sigma_a}\left(\mathcal{E}_a[\sigma_a] + \sum_{i\in a}\hat{h}^{(i\to a)}_{\sigma_i}(\{u^{(b\to i)}\}_{b\in i-a})\right)\\
&\quad - \sum_{i\in a}\min_{\sigma_i}\hat{h}^{(i\to a)}_{\sigma_i}(\{u^{(b\to i)}\}_{b\in i-a}),\\
\Delta\hat{E}^{(i)}(\{u^{(a\to i)}\}_{a\in i}) &= \min_{\sigma_i}\left(\sum_{a\in i} u^{(a\to i)}_{\sigma_i} + \mathcal{B}_i[\sigma_i]\right).
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Coloriage

Le formalisme général présenté ci-dessus trouve une illustration avec le problème du q-coloriage, pour lequel $\mathcal{E}_{ij}[\sigma_i,\sigma_j] = \delta_{\sigma_i,\sigma_j}$ et $\mathcal{B}_i = 0$. Les équations (5.20) satisfaites par les champs de cavité s'écrivent ainsi

$$\begin{aligned}
h^{(i\to j)}_{\sigma_i} &= \sum_{k\in i-j} u^{(k\to i)}_{\sigma_i},\\
u^{(k\to i)}_{\sigma_i} &= \min_{\sigma_k}\left(\delta_{\sigma_k,\sigma_i} + h^{(k\to i)}_{\sigma_k}\right) - \min_{\sigma_k}\left(h^{(k\to i)}_{\sigma_k}\right).
\end{aligned} \tag{5.28}$$

où la notation $k \in i-j$ est ici sans ambiguïté puisque le problème est défini sur un graphe simple (toutes les clauses ont connectivité $\ell_a = 2$). Le surcoût consécutif à l'ajout d'un nœud devient

$$\Delta E^{(i+a\in i)} = \min_{\sigma_i}\left[\sum_{j\in i} u^{(j\to i)}_{\sigma_i}\right]. \tag{5.29}$$

et celui consécutif à l'ajout d'un lien (clause)

$$\Delta E^{(i,j)} = \min_{\sigma_i,\sigma_j}\left(\delta_{\sigma_i,\sigma_j} + h^{(i\to j)}_{\sigma_i} + h^{(j\to i)}_{\sigma_j}\right) - \min_{\sigma_i}\left(h^{(i\to j)}_{\sigma_i}\right) - \min_{\sigma_j}\left(h^{(j\to i)}_{\sigma_j}\right). \tag{5.30}$$

On peut voir sur les équations (5.28) que les champs u ont soit toutes leurs composantes nulles, soit une seule non nulle et égale à 1 ; ceci reflète le fait que l'ajout d'un lien $(j \to i)$ au nœud i n'engendre de surcoût que si j a sa couleur fixée à σ_j, auquel cas $u_{\sigma_j} = 1$ et $u_\tau = 0$ pour $\tau \neq \sigma_j$. Du fait de la symétrie des couleurs, il est ainsi possible, comme pour la couverture, de décrire la distribution $Q(u)$ au moyen d'unique paramètre $\eta \in [0,1]$ tel que

$$Q(u) = \eta \sum_{\tau=0}^{q-1} \delta(u - e^{(\tau)}) + (1 - q\eta)\delta(u), \tag{5.31}$$

où les $e^{(\tau)}$, $\tau = 0, \ldots, q-1$, désignent les vecteurs de base dans $\mathbb{R}^q$ ayant composantes $e_\sigma^{(\tau)} = \delta_{\tau,\sigma}$. Pour les graphes poissonniens typiques, quelques manipulations algébriques [BMP+03] conduisent alors à

$$\begin{aligned} \eta &= \sum_{k=0}^{\infty} \pi_{\gamma\eta}(k) \left(\sum_{\ell=k+1}^{\infty} \pi_{\gamma\eta}(\ell) \right)^{q-1}, \\ \bar{\epsilon}^{(\gamma)} &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{r=1}^{q} \binom{q}{r} k \pi_{\gamma\eta}(k)^r \left(\sum_{\ell=k+1}^{\infty} \pi_{\gamma\eta}(\ell) \right)^{q-r} - \frac{\gamma}{2} q\eta^2, \end{aligned} \tag{5.32}$$

où $\pi_\theta(k) = \theta^k e^{-\theta}/k!$ désigne la distribution de Poisson. Les solutions à ces équations lorsque $q = 2$ et $q = 3$ sont représentées sur la figure 5.4. Avec $q = 2$, une transition de phase est correctement prédite à $\gamma_c = 1$. Pour $\gamma < \gamma_c$ cependant, la discussion menée en 4.4 indique que $\epsilon = 0$ ne doit pas être interprétée comme signifiant que les graphes sont typiquement coloriables ; les résultats présentés sur la figure 4.5 montrent en effet qu'au contraire, ils ont une probabilité finie d'être non-coloriable, dû à la présence d'un nombre non-extensif de boucles impaires. Pour $q = 3$, une solution $\eta \neq 0$ apparaît discontinûment à $\gamma \simeq 5,14$ et est associée jusqu'à $\gamma \simeq 5,49$ avec une énergie négative. Ce signe incohérent révèle l'insuffisance de l'approche liquide dans ce cas, et appelle aux développements présentés au chapitre 7.

5.3 Température finie

La procédure de calcul du fondamental se généralise à l'étude des propriétés à température finie, $\beta < \infty$. Une telle généralisation présente un intérêt physique évident puisqu'elle permet d'envisager l'étude des diagrammes de phase en température. Les modèles simples de la première partie, REM et polymère dirigé, ont aussi montré qu'une telle étude pouvait être essentielle même lorsque seules les propriétés du fondamental sont recherchées : les matchings multipartie sont une illustration d'une telle situation

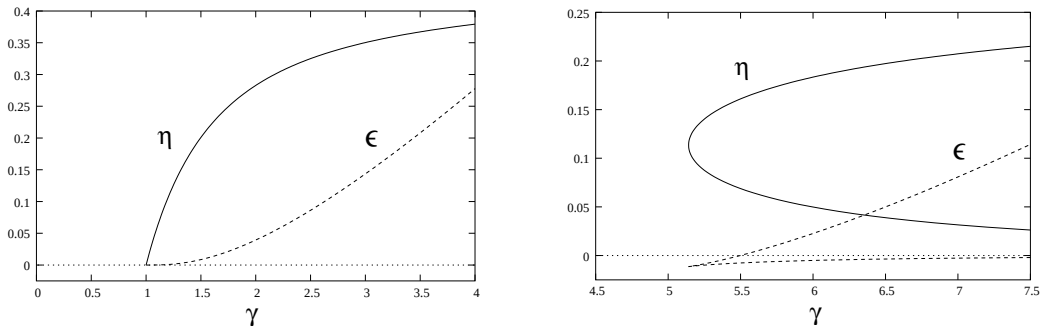

FIG. 5.4 – *Solution liquide des problèmes de 2 et 3-coloriage.* Les solutions aux équations (5.32) sont représentées pour $q = 2$ (à gauche) et $q = 3$ (à droite). Elles sont obtenues sous forme paramétrée, en posant $t = \gamma\eta$, comme pour les figures 4.4 et 5.2. Pour $q = 3$ et $\gamma > \gamma_c \simeq 5,14$, trois solutions sont présentes, $\eta = 0$ et deux branches non nulles (la branche inférieure étant instable) ; l'énergie de la solution non triviale n'est cependant positive que pour $\gamma > 5,49$.

[MMR04, MMR05]. De plus, en incluant les facteurs entropiques, le formalisme à température finie ouvre la voie aux études de la géométrie de l'espace des phases menées au chapitre 9. Enfin, le chapitre 8 montrera que les anomalies de la limite de température nulle sont ainsi révélatrices des limites de validité de l'approche suivie.

En guise d'illustration, on considère le modèle général de satisfaction de contraintes donné par (4.8), avec, pour simplifier, les $\mathcal{B}_i = 0$. Il s'agit ici non plus de calculer l'énergie du fondamental mais le potentiel $\phi(\beta)$, relié à la fonction de partition du système par $\phi(\beta) = -\ln Z(\beta)$. La démarche est cependant similaire : la fonction de partition totale d'un arbre tronqué est écrite comme une somme, sur les valeurs σ_i que peut adopter la racine, des fonctions de partition des systèmes pour lesquels σ_i est contraint, $Z^{(i\to a)} = \sum_{\sigma_i=0}^{q-1} Z_{\sigma_i}^{(i\to a)}$. Pour un hypergraphe, il est commode de décomposer la récursion en deux étapes, une pour l'ajout de nœuds, l'autre pour celle de clauses,

$$\begin{aligned} Z_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \prod_{b\in i-a} Y_{\sigma_i}^{(b\to i)}, \\ Y_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \sum_{\sigma_{b-i}} e^{-\beta\mathcal{E}_b[\sigma_{b-i},\sigma_i]} \prod_{j\in b-i} Z_{\sigma_j}^{(j\to b)}. \end{aligned} \tag{5.33}$$

Ces relations généralisent aux arbres la méthode de matrice de transfert utilisée pour étudier les problèmes unidimensionnels (qui sont des hyperarbres

particuliers avec $\ell_a = 2$ et $k = 2$). Les champs peuvent être définis par

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \frac{Z_{\sigma_i}^{(i\to a)}}{\sum_\tau Z_\tau^{(i\to a)}}, \\ \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \frac{Y_{\sigma_i}^{(b\to i)}}{\prod_{j\in a-i}\sum_{j\in b-i} Z_{\sigma_j}^{(b\to j)}}. \end{aligned} \tag{5.34}$$

Compte tenu des relations (5.33), ces champs satisfont les équations de cavité

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= e^{\Delta\phi^{(i\to a)}} \prod_{b\in i-a} \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)}, \\ \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \sum_{\sigma_{b-i}} e^{-\beta\mathcal{E}_b[\sigma_b]} \prod_{j\in b-i} \psi_{\sigma_j}^{(j\to b)}, \end{aligned} \tag{5.35}$$

où pour la normalisation des champs ψ est introduite la notation

$$e^{-\Delta\phi^{(i\to a)}} = \sum_\tau \prod_{b\in i-a} \nu_\tau^{(b\to i)} \tag{5.36}$$

qui fait apparaître le déplacement $\Delta\phi^{(i\to a)}$ du potentiel $\phi(\beta)$ consécutif au branchement de la racine i (toutes les quantités ont une dépendance qui, β étant fixé, n'est pas indiquée explicitement). Suivant les mêmes arguments qu'à température nulle, le potentiel total sur graphe donné $\phi(\beta)$ s'obtient par une formule du type

$$\phi = \frac{1}{N}\left[\sum_{i=1}^{N} \Delta\phi^{(i+a\in i)} - \sum_{a=1}^{M}(\ell_a - 1)\Delta\phi^{(a)}\right] \tag{5.37}$$

où les différents déplacements, engendré par addition d'un nœud ou d'une clause, valent

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\phi^{(i+a\in i)}} &= \sum_\tau \prod_{a\in i} \nu_\tau^{(a\to i)}, \\ e^{-\Delta\phi^{(a)}} &= \sum_{\sigma_a} e^{-\beta\mathcal{E}_a[\sigma_a]} \prod_{i\in a} \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}. \end{aligned} \tag{5.38}$$

Ces deux équations définissent les fonctions $\Delta\hat{\phi}^{(i+a\in i)}(\{\psi^{(j\to b)}\}_{j\in b-i, b\in i})$ et $\Delta\hat{\phi}^{(a)}(\{\psi^{(i\to a)}\}_{i\in a})$. Comme pour l'énergie, une formulation duale est aussi disponible, qui s'obtient en interchangeant formellement les a et les i.

Ainsi le modèle de Potts antiferromagnétique, qui est la version température finie du problème de coloriage, est décrit par les relations

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma_i}^{(i\to j)} &= \frac{\prod_{k\in i-j} \nu_{\sigma_i}^{(k\to i)}}{\sum_\tau \prod_{k\in i-j} \nu_\tau^{(k\to i)}}, \\ \nu_{\sigma_i}^{(k\to i)} &= 1-(1-e^{-\beta})\psi_{\sigma_i}^{(k\to i)}. \end{aligned} \tag{5.39}$$

$$\begin{aligned} \Delta\phi^{(i\to j)} &= -\ln \sum_\tau \prod_{k\in i-j} \left(1-(1-e^{-\beta})\psi_\tau^{(k\to i)}\right), \\ \Delta\phi^{(i+a\in i)} &= -\ln \sum_\tau \prod_{j\in i} \left(1-(1-e^{-\beta})\psi_\tau^{(j\to i)}\right), \\ \Delta\phi^{(i,j)} &= -\ln \left(1-(1-e^{-\beta})\sum_\tau \psi_\tau^{(i\to j)}\psi_\tau^{(j\to i)}\right). \end{aligned} \tag{5.40}$$

Le formalisme de température nulle développé pour traiter les problèmes d'optimisation se retrouve en prenant la limite $\beta \to \infty$. En effet, dans cette limite $Z_\sigma^{(i\to a)} \asymp \exp[-\beta E_\sigma^{(i\to a)}]$, de sorte que les champs h et les champs ψ sont reliés par

$$-\frac{1}{\beta}\ln \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} \to h_{\sigma_i}^{(i\to a)} - \min_\tau h_\tau^{(i\to a)}. \tag{5.41}$$

Une définition des champs équivalente mais plus adaptée à ce passage à la limite est alors

$$\hbar_{\sigma_i}^{(i\to a)} \equiv h_{\sigma_i}^{(i\to a)} - \min_\tau h_\tau^{(i\to a)}; \tag{5.42}$$

cette notation sera reprise au 9.3.

5.4 Algorithmes et variationnalité

Les équations de cavité à température finie sont intimement liées à une procédure algorithmique appelée « propagation des convictions » (abrégé en BP, pour *belief propagation*), originalement introduite par Gallager pour décoder des codes linéaires de correction d'erreur et qui s'applique plus généralement aux problèmes d'*inférence* faisant intervenir des structures en graphe [KFL01] : ces problèmes consistent à reconstituer une distribution de probabilité à partir d'informations partielles, et en particulier à déterminer la valeur la plus probable pour chaque variable à partir d'observations qui en dépendent. La relation entre équations de cavité et équations BP, brièvement exposée ici, offre l'intérêt majeur d'autoriser l'application des analyses statistiques ci-dessus à des instances particulières.

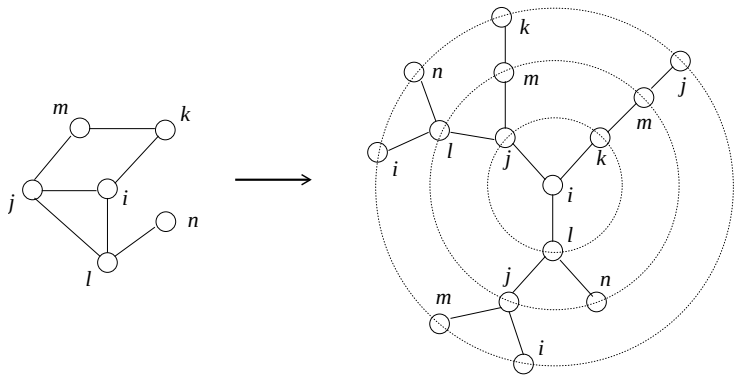

FIG. 5.5 – *Arbre déployé associé à un graphe donné.* Trois générations seulement sont représentées ici à partir de la racine i ; une boucle de longueur ℓ se traduit par la répétition d'un nœud toutes les ℓ générations. L'arbre est donc infini dès qu'une boucle est présente dans le graphe original, mais, tronqué à la génération n, il décrit le résultat de n itérations de BP.

Passage de messages

Les équations de cavité ont été obtenues en se plaçant sur des arbres mais, sous la forme (5.35), elles possèdent également un sens sur un graphe donné. Dans ce cas on ne considère plus les $h^{(i\to j)}$ selon une seule direction, mais selon toutes les directions possibles. Un *algorithme de passage de message* peut alors être utilisé pour trouver une solution à cet ensemble de $2M$ équations : les $h^{(i\to j)}$ sont initialisés arbitrairement puis le champ de chaque lien orienté est successivement mis à jour suivant (5.35), dans un ordre aléatoire, et ceci jusqu'à ce qu'une solution stable soit atteinte. Bien sûr, rien ne garantit qu'un tel algorithme converge sur un graphe comprenant des boucles ; par exemple, les équations (5.3) n'ont pas de point fixe sur une boucle de taille impaire.

L'idée sous-jacente est cependant que, au moins à suffisamment haute température, le modèle possède une *longueur de corrélation* plus courte que la longueur des boucles, et que l'effet de celles-ci ne se fait donc pas sentir ; cette assertion sera précisée et quantifiée au chapitre 8. L'itération des passages de message peut être représentée graphiquement en associant, à un graphe fini donné, l'arbre infini obtenu par la procédure de déploiement présentée figure 5.5 [Wei00]. Les boucles se trouvent supprimées en contre-partie d'une duplication des nœuds, ce qui introduit des corrélations pouvant potentiellement invalider l'approche liquide.

Dans le cadre des problèmes d'inférence, l'algorithme BP est utilisé pour

calculer des *marginales* sur des modèles graphiques. Le point de départ est une distribution de probabilité jointe $p(\sigma)$ pour un ensemble de variables $\sigma = \{\sigma_1, \ldots, \sigma_N\}$ de la forme

$$p(\sigma) = \frac{1}{Z} \prod_a f_a(\sigma_a). \tag{5.43}$$

Conformément aux notations adoptées jusqu'ici, a indexe des clauses, c'est-à-dire des sous ensembles finis de σ ; les f_a sont des fonctions positives et Z est le coefficient de normalisation. Les problèmes de physique statistique s'inscrivent ainsi dans ce formalisme avec pour $p(\sigma)$ la distribution de Boltzmann, $p(\sigma) = \exp(-\beta E[\sigma])$, soit $f_a(\sigma_a) = \exp(-\beta \mathcal{E}_a[\sigma_a])$. Étant donné un sous ensemble I de $\{1, \ldots, N\}$, on s'intéresse à la *probabilité marginale* $p_I(\sigma_I)$ qui est, par définition,

$$p_I(\sigma_I) = \sum_{\sigma_j : j \notin I} p(\sigma). \tag{5.44}$$

Ainsi lorsque $I = \{i\}$, $p_i(\sigma_i)$ décrit la distribution de probabilité de la variable dynamique σ_i sur le nœud i ; la méthode de cavité en fournit l'estimation suivante :

$$p_i(\sigma_i) \simeq e^{\Delta\phi^{(i+a\in i)}} \prod_{a \in i} \nu_{\sigma_i}^{(a \to i)}. \tag{5.45}$$

De ce point de vue, les champs de cavité apparaissent donc comme une approximation des lois marginales. Plus généralement, si $A(s_I)$ est une observable dépendant d'un nombre fini de variables, sa moyenne se calcule par le biais de $p_I(\sigma_I)$. La connaissance des lois marginales suffit également à calculer les différentes valeurs moyennes globales ; par exemple l'énergie moyenne, par rapport à $p(\sigma)$, est donnée par $\epsilon = \sum_a p_a(\sigma_a)\mathcal{E}_a[\sigma_a]$.

La méthode BP est habituellement justifiée par le fait qu'elle est exacte sur les hypergraphes dépourvus de boucles, pour lesquels on dispose de la formule [KFL01]

$$p(\sigma) = \frac{\prod_a p_a(\sigma_a)}{\prod_i p_i(\sigma_i)^{k_i - 1}}. \tag{5.46}$$

Un point fixe des équations de cavité sur graphe avec boucles ne fournit cependant généralement pas de véritables marginales, vérifiant les équations du type (5.45), même si l'expérience suggère qu'il en fournit une bonne approximation. Le succès dépend aussi de la part d'information connue au préalable, qui est utilisée pour initialiser les champs. Les questions portant sur la convergence de BP et sur la précision de l'approximation des marginales qu'il permet d'obtenir font actuellement l'objet de recherches actives. Dans

cette perspective, un progrès récent [YFW02] a consisté à relier la procédure BP aux équations de cavité, et d'identifier les point fixes de l'itération aux points stationnaires d'une énergie libre variationnelle.

Variationnalité

La formule (5.37) a en effet la propriété importante d'être *variationnelle*, ce qui signifie que ϕ, vu comme fonction des $\psi^{(i\to a)}$ par l'intermédiaire des fonctions $\Delta\hat{\phi}^{(i+a\in i)}$ et $\Delta\hat{\phi}^{(a)}$ donnés par (5.38), est stationnaire au(x) point(s) où les champs satisfont les équations de cavité (5.35),

$$\frac{\partial}{\partial\psi^{(i\to a)}}\phi[\{\psi^{(j\to b)}\}_{(j\to b)}] = 0, \quad \forall(i\to a). \tag{5.47}$$

En effet, la dérivation par rapport à $\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}$ de la somme sur les sites dans la formule (5.37) s'écrit

$$\sum_j \frac{\partial\Delta\hat{\phi}^{(j+b\in j)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} = \sum_{j\in a-i} e^{\Delta\phi^{(j+a\in j)}} \sum_{\sigma_j} \frac{\partial\nu_{\sigma_j}^{(a\to j)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} \prod_{b\in j-a} \nu_{\sigma_j}^{(j\to b)}. \tag{5.48}$$

Or, en utilisant les équations de cavité (5.35),

$$\frac{\partial\nu_{\sigma_j}^{(a\to j)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} = \sum_{\sigma_{a-j}} e^{-\beta\mathcal{E}_a[\sigma_a]} \prod_{k\in a-\{i,j\}} \psi_{\sigma_k}^{(k\to a)}, \tag{5.49}$$

et

$$\prod_{b\in j-a} \nu_{\sigma_j}^{(j\to b)} = e^{-\Delta\phi^{(j\to a)}}\psi_{\sigma_j}^{(j\to a)}, \tag{5.50}$$

de sorte que

$$\sum_j \frac{\partial\Delta\hat{\phi}^{(j+b\in j)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} = \left(\sum_{j\in a-i} e^{\Delta\phi^{(j+a\in j)}} e^{-\Delta\phi^{(j\in a)}}\right)\left(\sum_{\sigma_{a-i}} e^{-\beta\mathcal{E}_a[\sigma_a]} \prod_{k\in a-i} \psi_{\sigma_k}^{(k\to a)}\right). \tag{5.51}$$

Comme $\Delta\phi^{(j\to a)} = \Delta\phi^{(j+a\in j)} - \Delta\phi^{(a)}$, il vient ainsi

$$\sum_j \frac{\partial\Delta\hat{\phi}^{(j+b\in j)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} = (\ell_a - 1)e^{\Delta\phi^{(a)}} \sum_{\sigma_{a-i}} e^{-\beta\mathcal{E}_a[\sigma_a]} \prod_{k\in a-i} \psi_{\sigma_k}^{(k\to a)}. \tag{5.52}$$

Ce terme compense exactement celui provenant de la dérivation de la somme sur les clauses,

$$\sum_b \frac{\partial\Delta\hat{\phi}^{(b)}}{\partial\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}} = e^{\Delta\phi^{(a)}} \sum_{\sigma_{a-i}} e^{-\beta\mathcal{E}_a[\sigma_a]} \prod_{k\in a-i} \psi_{\sigma_j}^{(k\to a)}, \tag{5.53}$$

ce qui prouve la variationnalité de ϕ telle qu'exprimée par (5.47). L'ensemble des équations (5.47) pour les différents liens orientés $(i \to a)$ est en fait équivalent aux équations de cavité (5.35). La même conclusion vaut aussi pour la forme duale de l'expression de ϕ, pour laquelle les variables naturelles sont les ν plutôt que les ψ.

Cette formulation variationnelle des équations de cavité sur graphe donné présente plusieurs intérêts. Sur le plan théorique, en mettant en relation la procédure BP avec des concepts de physique statistique, elle suggère de nouvelles perspectives à la fois pour l'étude d'existence et d'unicité des solutions de l'algorithme standard, et aussi pour généraliser cet algorithme. Sur le plan pratique, elle autorise à calculer les variations par rapport à un paramètre extérieur λ en ne prenant en compte que les dérivées explicites. En effet,

$$\frac{d\phi}{d\lambda} = \frac{\partial\phi}{\partial\lambda} + \frac{\partial\psi}{\partial\lambda}\frac{d\phi}{d\psi} = \frac{\partial\phi}{\partial\lambda}. \tag{5.54}$$

Cette propriété s'utilise par exemple avec $\lambda = \beta$ dans les calculs d'entropie, $s(\beta) = \beta^2\partial_\beta[\phi(\beta)/\beta]$.

Notes et références

L'approche liquide des modèles sur graphes aléatoires correspond à la méthode de cavité « symétrique dans les répliques » développée par Mézard et Parisi [MP01, MP03]. Le cas factorisé des graphes réguliers où $P(\psi) = \delta(\psi - \psi_0)$ revient à l'approximation de champ moyen introduite par Bethe [Bax82]. La solution liquide au problème de couverture est dérivée dans [WH00, WH01] par les répliques et celle au problème de coloriage dans [MPWZ02, BMP$^+$03] par la cavité. La définition des champs directement en terme de bonus est empruntée à Aldous [Ald01], qui, dans le cadre du 2-matching a su donner un sens mathématique à la notion d'arbre infini. Sa méthode pour définir l'énergie typique, fondée sur un « critère d'inclusion », ne s'applique toutefois pas à un problème tel que la couverture, même si elle permet de résoudre rigoureusement des modèles qui lui sont très proches [GNS03]. Une démonstration de la validité de l'approche liquide pour la couverture lorsque $\gamma < e$ existe cependant [BG01], dont le principe est précisé en 8.1. La démarche pour obtenir l'énergie suit ici plutôt [MP01, MP03] ; la forme duale (5.26) est celle trouvée dans la littérature pour les graphes donnés, tandis la forme (5.23) n'est généralement écrite que sous forme moyennée [MZ02a].

Pour les problèmes à variables binaires ($q = 2$), il est commode de définir les champs légèrement différemment afin de ne conserver qu'un champ scalaire tout en préservant une symétrie entre $\sigma = 0$ et $\sigma = +1$ (ou de façon équivalente entre $\sigma = \pm 1$). Cela revient à introduire $\hbar \equiv (h_- - h_+)/2$, qui, pourvu que les $\mathcal{E}_a$ soient tous multipliés par 2, ne prend encore que des valeurs entières. En décomposant $u_{\sigma_i}^{(a\to i)} =$

$-v^{(a\to i)} - \bar{u}_{\sigma_i}^{(a\to i)}$, il vient alors $\hbar^{(i\to a)} = \sum_{b\in i-a} \bar{u}^{(b\to i)}$ avec $\bar{u} \in \{-1, 0, +1\}$, où $\bar{u} = (u_- - u_+)/2$ avec $u_\mp \in \{0, 1\}$. Ces relations font le lien entre les champs définis dans ce chapitre et ceux utilisés dans les traitements de K-SAT [MZ02a] ou XOR-SAT [MRTZ03].

La variationnalité des équations de cavité est présentée, en moyenne sur les graphes, dans [MP01, MP03]. Elle généralise le principe de minimisation de l'énergie libre de Gibbs sur lequel l'approximation de champ moyen du type Curie-Weiss peut être fondée. Le caractère variationnel des équations BP sur graphes donnés a été mis en évidence par Yedidia *et al.* [YFW02] .

Chapitre 6

Grandes déviations externes

Ce chapitre introduit le thème des grandes déviations dans les modèles sur graphes aléatoires, qui est repris sous une forme différente au chapitre suivant pour remédier aux insuffisances de l'approche liquide.

6.1 Graphes atypiques

Pour les problèmes comme la couverture ou le coloriage dont les instances sont uniquement spécifiées par la donnée d'un ensemble $\mathcal{G}_N$ de graphes, les *grandes déviations sur la structure externe* décrivent, dans la limite $N \to \infty$, la probabilité $\mathbb{P}_N(\epsilon)$ qu'un graphe $G \in \mathcal{G}_N$ ait $E_G = N\epsilon$ pour coût optimal avec ϵ pas nécessairement égal à ϵ. Plus précisément, l'hypothèse est faite qu'un principe de grandes déviations est satisfait, avec une fonction de grandes déviations $L(\epsilon) \equiv -\mathcal{L}(\epsilon)$ telle que

$$\mathbb{P}_N(\epsilon) \equiv \mathbb{P}[\{G \in \mathcal{G}_N : E_G \equiv \min_{\sigma \in \mathcal{C}} E_G[\sigma] = N\epsilon\}] \asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon)}. \tag{6.1}$$

Le propos de ce chapitre est le calcul $\mathcal{L}(\epsilon)$, et, en particulier, de la valeur typique $\bar{\epsilon}$ de ϵ correspondant à $\mathcal{L}(\epsilon = \bar{\epsilon}) = 0$.

Ce calcul est sous-tendu par plusieurs motivations. Du point de vue mathématique, il suggère une approche pour prouver la propriété d'automoyennage selon laquelle valeur moyenne et valeur typique coïncident. De plus, il illustre dans un contexte plus simple certaines des méthodes utilisées dans la suite pour étudier les grandes déviations sur les solutions de cavité. Du point de vue de la complexité algorithmique, la caractérisation des instances atypiques permet de dépasser le cadre des instances moyennes dans lequel la physique statistique s'est jusqu'ici confinée, et de se rapprocher ainsi des pires instances qui sont au centre de la théorie de la NP-complétude. Enfin,

du point de vue physique, les grandes déviations dans les graphes permettent de résoudre exactement des modèles à structure adaptative.

Une application en physique concerne ainsi la rigidité des réseaux aléatoirement connectés [DJTM99], formés de N points matériels reliés par M barres (ou ressorts) distribuées au hasard entre les paires de points. En deux dimensions par exemple, un point isolé a deux degrés de liberté, et la présence d'une barre entre deux points libres a pour effet de réduire de quatre à trois le nombre de degrés de liberté. Le système est dit *rigide* lorsque les seuls degrés de liberté dont dispose le système de N points et M barres sont les trois degrés de liberté globaux (deux de translation et un de rotation). Lorsque des barres sont successivement ajoutées de façon aléatoire à N points, le système passe d'une phase flexible à une phase rigide dans laquelle une fraction finie des points appartient à une composante rigide ; cette phase est non seulement rigide mais aussi *contrainte*, au sens mécanique du terme qui signifie que les barres sont étirées ou comprimées (en supposant qu'elles se comportent comme des ressorts). Cette *percolation de rigidité* admet de façon intéressante une formulation en terme de problème de satisfaction de contraintes [BBLS05a] : le coût correspond alors au nombre de degrés de liberté perdus, et la percolation de rigidité à une transition de satisfaisabilité.

Les grandes déviations deviennent pertinentes lorsque le système est autorisé à réarranger ses liens afin d'éviter les contraintes (tensions mécaniques) [TJCP00]. Une description fondée sur la physique statistique d'un tel phénomène consiste en effet à mettre en regard, pour un température donnée, le gain énergétique lié à l'adoption d'une conformation avec $\epsilon < \bar{\epsilon}$, et le coût entropique $s(\epsilon) < s(\bar{\epsilon})$ dû au recourt à des graphes atypiques [BBLS05b]. L'entropie $s(\epsilon)$ étant conjuguée à la fonction de grandes déviations donnée par (6.1) pour l'ensemble $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, le calcul de $\mathcal{L}(\epsilon)$ pour ce modèle donne accès au diagramme de phase d'un système dont la topologie est elle-même une variable dynamique [Riv05a]. Le diagramme de phase ainsi obtenu pour les réseaux aléatoirement connectés présente en particulier une *phase intermédiaire*, dont l'existence est également révélée par les expériences [VQM+04] : lorsque le nombre de liens est augmenté, le système traverse d'abord une phase où il parvient à éviter les contraintes en se maintenant à la limite de la rigidité, avant de subir dans un second temps une transition de rigidité vers une phase sous tension.

6.2 Ensembles poissonniens

Au niveau des grandes déviations, qui concernent des événements rares, les différences entre les modèles binomial, $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, où chaque lien a probabilité γ/N d'être présent, et uniforme, $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, où $M = \alpha N$ sont présents, deviennent manifestes et, comme expliqué en 4.1, l'équivalence asymptotique est perdue. Dans le but de conserver toutefois une présentation unifiée, la notation $\mathcal{G}_N^{(\lambda)}$ est introduite pour désigner les deux modèles de manière générique, avec λ renvoyant soit à γ, soit à α ; la distribution limite pour $\mathcal{G}_N^{(\lambda)}$ est notée $p^{(\lambda)}(k)$, qui vaut donc $p^{(\gamma)} = \pi_\gamma$ pour $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ et $p^{(\alpha)} = \pi_{2\alpha}$ pour $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, où π_θ désigne la distribution de Poisson de moyenne θ, $\pi_\theta(k) = \theta^k e^{-\theta}/k!$. Conformément à la définition des deux modèles, la mesure par rapport à laquelle les grandes déviations sont envisagées correspond à la mesure uniforme sur $\mathcal{G}_N^{(\lambda)}$.

L'idée de cavité consiste à construire les graphes en ajoutant successivement leurs nœuds, tout en consignant les changements énergétiques accompagnant ce processus de croissance. Partant d'un graphe G_N choisi uniformément dans $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, on construit ainsi un graphe G_{N+1} de taille $N+1$ en ajoutant un nouveau nœud qu'on connecte à k nœuds de G_N, avec k pris selon la distribution limite $\pi_{2\alpha}$. Cette construction permet ainsi d'obtenir un graphe uniformément dans $\bar{\mathcal{G}}_{N+1}^{(\alpha')}$, où $\alpha' = (M+k)/(N+1) = \alpha + (k-\alpha)/N$. En procédant de manière similaire à partir de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, on construit $\tilde{\mathcal{G}}_{N+1}^{(\gamma')}$ avec $\gamma' = \gamma + \gamma/N$, qui traduit la relation d'égalité des probabilités de liens, $\gamma'/(N+1) = \gamma/N$. Les deux cas sont résumés en écrivant qu'à partir de $\mathcal{G}_N^{(\lambda)}$ l'addition d'un nœud fournit $\mathcal{G}_{N+1}^{(\lambda')}$ avec $\lambda' = \lambda + \chi(\lambda, k)/N$, où

$$\chi(\alpha, k) = k - \alpha \quad \text{(modèle uniforme)}, \tag{6.2}$$

$$\chi(\gamma, k) = \gamma \quad \text{(modèle binomial)}. \tag{6.3}$$

L'addition du nœud provoque un déplacement de la valeur de l'optimum d'une quantité ΔE, qui s'évalue, comme aux chapitres précédents, par le biais de l'approximation des arbres. Pour l'intérieur d'un arbre tronqué infini, c'est-à-dire quand la distribution des champs a atteint son régime stationnaire, le déplacement ΔE associé à la connexion de la racine à k sous-arbres est décrit par une distribution $P_n^{(k)}(\Delta E)$ qui reflète les fluctuations d'un graphe à l'autre, ou de manière équivalente, d'un nœud à l'autre au sein d'un même arbre. En reprenant le principe de calcul par cavité des fonctions de grandes déviations présenté pour la somme de variables indépendantes (*cf.* 3.1) et le

polymère dirigé (*cf.* 3.4), on écrit

$$\begin{aligned} e^{(N+1)\mathcal{L}(E/(N+1),\lambda)} &\asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon)} e^{\mathcal{L}(\epsilon,\lambda)-ye} = e^{N\mathcal{L}(\epsilon)} e^{-\phi(y,\lambda)} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{N\mathcal{L}[(E-\Delta E)/N, \lambda-\chi(\lambda,k)/N]} \\ &\asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon)} \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{-y\Delta E} e^{-z\chi(\lambda,k)}, \end{aligned} \tag{6.4}$$

où sont introduites les notations $\epsilon \equiv E/N$, $y \equiv \partial_\epsilon \mathcal{L}(\epsilon,\lambda)$, $z \equiv \partial_\lambda \mathcal{L}(\epsilon,\lambda)$, et où est utilisé le fait que les graphes poissonniens vérifient $q(k) = p(k)$ d'après (4.9).

L'équation (6.4) introduit la quantité $z = \partial_\lambda \mathcal{L}(\epsilon,\lambda)$ dont la détermination exige une relation supplémentaire. Celle-ci peut s'obtient en développant $\exp[N\mathcal{L}(\epsilon, \lambda+1/N)]$, où la transformation $\lambda \to \lambda+1/N$ à nombre de nœuds N fixé est réalisée en ajoutant k nouveaux liens selon une distribution $\sigma(k)$ bien choisie. Cette opération fait intervenir le déplacement d'énergie ΔE consécutif à l'addition d'un lien, auquel est attribué la distribution $P_\ell(\Delta E)$. Pour $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$, l'addition d'un lien donne directement $\alpha' = (M+1)/N = \alpha+1/N$, de sorte que $\sigma(k) = \delta_1(k)$. Pour $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, il vient par contre $\sigma(k) = \pi_{1/2}(k)$, qui correspond à la distribution du nombre de liens ajoutés telle que chacun des $\sim N^2/2$ liens a probabilité $1/N^2$ d'être simultanément présent dans le graphe de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma+1/N)}$ et absent dans celui de $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$. Un développement en $1/N$ fournit alors

$$\begin{aligned} e^{N\mathcal{L}(\epsilon,\lambda+1/N)} &\asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon,\lambda)} e^{z} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k) \int \prod_{i=1}^{k} d\Delta E_i P_\ell(\Delta E_i) e^{N\mathcal{L}[(E-\sum_i \Delta E_i)/N, \lambda]} \\ &\asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon,\lambda)} \sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k) \left(\int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E} \right)^k, \end{aligned} \tag{6.5}$$

de sorte que z est donné par

$$z = \ln \left[\sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k) \left(\int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E} \right)^k \right], \tag{6.6}$$

avec

$$\sigma(k) = \delta_{1,k} \quad \text{(modèle uniforme)}, \tag{6.7}$$

$$\sigma(k) = 2^{-k} e^{-1/2}/k! \quad \text{(modèle binomial)}. \tag{6.8}$$

Les distributions $P_n^{(k)}(\Delta E)$ et $P_\ell(\Delta E)$ s'obtiennent, comme dans l'approche liquide, à partir de la distribution de champs de cavité $P(h)$. À la différence de l'approche liquide cependant, celle-ci dépend à présent de y, c'est-à-dire de la densité d'énergie atypique ϵ décrite. Il convient donc de considérer $R_{N+1}^{(\lambda)}(h_0, E_0)$, la probabilité conjointe qu'un arbre tronqué ait pour fondamental E_0 et champ de cavité sur la racine h_0, lorsque la distribution de ses degrés reproduit celle de $\mathcal{G}_{N+1}^{(\lambda)}$. Par définition, la marginalisation sur h_0 renvoie alors $\mathbb{P}_{N+1}^{(\lambda)}(E_0/(N+1))$, la probabilité que l'arbre tronqué ait fondamental E_0, ce qui s'exprime aussi

$$\mathbb{P}_{N+1}^{(\lambda)}(E_0/(N+1)) = \int dh_0 R_{N+1}^{(\lambda)}(h_0, E_0) = e^{(N+1)\mathcal{L}(E_0/(N+1),\lambda)}. \tag{6.9}$$

En généralisant légèrement les relations (6.4), il vient alors

$$\begin{aligned} R_{N+1}^{(\lambda)}(h_0, E_0) &= \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int d\Delta E_0 Q^{(k)}(h_0, \Delta E_0) e^{N\mathcal{L}[(E_0-\Delta E_0)/N, \lambda-\chi(\lambda,k)/N]} \\ &\asymp e^{N\mathcal{L}(\epsilon)} \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int d\Delta E_0 Q^{(k)}(h_0, \Delta E_0) e^{-y\Delta E_0 - z\chi(\lambda,k)}, \end{aligned} \tag{6.10}$$

où $Q^{(k)}(h_0, \Delta E_0)$ est la distribution conjointe du champ h_0 sur la racine et du déplacement d'énergie associé à son addition, sachant qu'elle est connectée à k sous-arbres. La propriété essentielle que ce calcul établit est que la probabilité conjointe de l'énergie et du champ se factorise,

$$R_{N+1}^{(\lambda)}(h, E) = e^{N\mathcal{L}(\epsilon)} e^{\mathcal{L}(\epsilon,\lambda)-y\epsilon} P(h), \tag{6.11}$$

où comme précédemment $\epsilon = E/N$. En exprimant la distribution $Q^{(k)}(h_0, \Delta E_0)$ en fonction de $P(h)$,

$$Q^{(k)}(h_0, \Delta E_0) = \int \prod_{j=1}^{k} dh_j P(h_j) \delta\left(h_0 - \hat{h}^{(k)}(\{h_j\}\right) \delta\left(\Delta E_0 - \Delta \hat{E}_n^{(k)}(\{h_j\})\right), \tag{6.12}$$

on obtient ainsi

$$\begin{aligned} P(h_0) &= \frac{1}{Z} \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int \prod_{i=1}^{k} dh_i P(h_i) \delta(h_0 - \hat{h}^{(k)}(\{h_i\})) e^{-y\Delta \hat{E}_n^{(k)}(\{h_i\}) - z\chi(\lambda,k)}, \\ Z &= \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{-y\Delta E} e^{-z\chi(\lambda,k)}, \end{aligned} \tag{6.13}$$

où $P(h)$ dépend à la fois de λ et de y. Comme dans le cadre du théorème de Gärtner-Ellis, la fonction de grandes déviations $L(\epsilon) = -\mathcal{L}(\epsilon)$ est donc calculée par l'intermédiaire de sa transformée de Legendre $\phi(y, \lambda)$,

$$\begin{aligned} \phi(y,\lambda) &= ye - \mathcal{L}(\epsilon,\lambda) = -\ln Z, \\ y &= \partial_\epsilon \phi(\epsilon,\lambda), \end{aligned} \tag{6.14}$$

c'est-à-dire, en inversant cette relation,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\epsilon,\lambda) &= y\epsilon - \phi(y,\lambda), \\ \epsilon &= \partial_\lambda \mathcal{L}(y,\lambda), \end{aligned} \tag{6.15}$$

où $\phi(\lambda, y)$ est décrit par (6.4).

Une illustration est fournie par le problème de couverture. Dans ce cas, les équations sont simplifiées par la paramétrisation de $P(h)$ au moyen de η, $P(h) = \eta\delta_1(h) + (1-\eta)\delta_0(h)$. Comme indiqué par les équations (6.13) et (6.6), les distributions $P_n^{(k)}(\Delta E)$ et $P_\ell(\Delta E)$ n'interviennent qu'à travers leur transformée de Laplace,

$$\begin{aligned} \int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{-y\Delta E} &= \int \prod_{i=1}^{k} dh_i P(h_i) e^{-y\Delta \hat{E}_n^{(k)}(\{h_i\})} = e^{-y} + (1-e^{-y})(1-\eta)^k, \\ \int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E} &= \int \prod_{i=1}^{2} dh_i P(h_i) e^{-y\Delta \hat{E}_\ell(h_1,h_2)} = 1 + (e^{-y}-1)\eta^2. \end{aligned} \tag{6.16}$$

La forme précise des équations dépend ensuite du modèle, binomial ou uniforme, considéré. Pour l'ensemble $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$, il vient

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{1 + e^{-y}(e^{\gamma\eta} - 1)}, \\ z &= \frac{1}{2}(e^{-y} - 1)\eta^2, \\ \phi(y,\gamma) &= -\ln[e^{-y} + (1-e^{-y})e^{-\gamma\eta}] + \gamma z. \end{aligned} \tag{6.17}$$

Et pour l'ensemble $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$,

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{1 + e^{-y}(e^{2\alpha\eta e^{-z}} - 1)}, \\ z &= \ln[1 + (e^{-y} - 1)\eta^2], \\ \phi(y,\alpha) &= -\ln[e^{-y} + (1-e^{-y})e^{-2\alpha\eta e^{-z}}] + 2\alpha(1-e^{-z}) - \alpha z. \end{aligned} \tag{6.18}$$

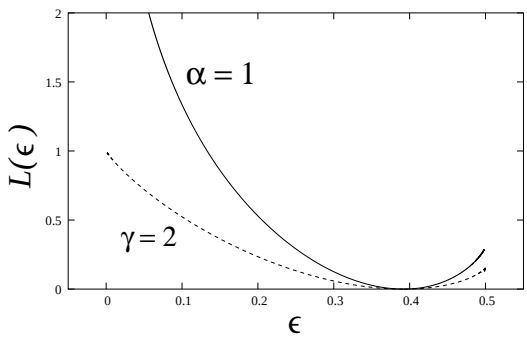

FIG. 6.1 – *Fonctions de grandes déviations pour la couverture*, pour $\bar{\mathcal{G}}_N^{(\alpha)}$ avec $\alpha = 1$ (courbe pleine) et $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ avec $\gamma = 2$ (courbe pointillée). Le minimum commun à $\bar{\epsilon} \simeq 0,39$ reflète l'équivalence des deux ensembles pour les valeurs typiques ($y = 0$). La plus grande courbure de $L(\epsilon, \alpha)$ par rapport à $L(\epsilon, \gamma)$ s'interprète par le fait que fixer le nombre des liens impose davantage de contraintes que de fixer leur probabilité.

La valeur typique de $\epsilon = \partial_y \phi$, obtenue en prenant $y = 0$, coïncide pour les deux ensembles sous la condition $\gamma = 2\alpha$; elle est aussi équivalente aux expressions pour l'énergie moyenne (5.9) et (5.15), en conformité avec la propriété d'automoyennage. Un exemple de fonction de grandes déviations pour chacun des modèles est présenté sur la figure 6.1.

La limite $y \to \infty$ admet une interprétation simple en terme d'instances non-frustrées, avec $\epsilon(y = \infty) = 0$. Pour l'ensemble $\tilde{\mathcal{G}}_N^{(\gamma)}$ par exemple, il vient $\mathcal{L}(y = \infty, \gamma) = -\gamma/2$ qui correspond à la probabilité qu'aucun des liens ne soit présent,

$$\mathbb{P}_N^{(\gamma)}(\text{aucun lien}) \asymp \left(1 - \frac{\gamma}{N}\right)^{N^2/2} \asymp e^{-N\gamma/2}. \tag{6.19}$$

À l'inverse, la limite $y \to -\infty$ décrit les graphes les plus frustrés, qui sont les plus susceptibles de mettre en échec l'approche liquide. Une analyse asymptotique indique que dans cette limite $\epsilon(y = -\infty) = 1/2$ et $L(y = -\infty) = (1 - \ln \gamma)/2$, c'est-à-dire que l'approche liquide devient certainement erronée dès $\gamma = e$ puisqu'au delà de cette valeur, $L(y = -\infty) < 0$. Une analyse de la stabilité du liquide dans l'esprit du chapitre 8 montre cependant que l'approche liquide devient inadaptée dès $\gamma = 1$ pour les graphes les plus atypiques ; le diagramme de phase correspondant est présenté dans [Riv05b].

6.3 Graphes réguliers

La méthode exposée ci-dessus pour les modèles binomial et uniforme s'étend à d'autres ensembles de graphes. Sont ainsi traités dans [Riv05b] les graphes dont la distribution des degrés est donnée. Le formalisme correspondant s'applique notamment aux graphes aléatoires réguliers dont tous les nœuds ont même degré. Pour ces graphes, les résultats obtenus dans la limite $y \to \infty$ sont également accessibles par des calculs combinatoires dont les résultats, dans l'esprit de (6.19), corroborent les calculs de cavité [Riv04].

6.4 Niveaux de désordre multiples

Il a été supposé jusqu'ici que les instances étaient entièrement définies par la donnée d'un ensemble de graphes aléatoires, mais il se peut, à l'instar de K-SAT, que leur définition comprenne également la spécification d'une autre source de désordre, comme des couplages aléatoires. Il est alors possible d'effectuer une analyse des grandes déviations qui portent soit simultanément sur ces deux sources de désordre, soit qui les traite à deux niveaux différents, dans l'esprit de l'exemple donné dans la première partie et décrit par (2.36) au moyen de deux températures. Cette démarche est détaillée dans [Riv05b].

Notes et références

La première étude de grandes déviations sur la structure externe, par la méthode des répliques, est due à Montanari [MZ02b, Mon02]. L'approche de cavité introduite ici et développée dans [Riv05b] est intimement liée à la méthode de cavité à un pas de brisure de symétrie des répliques de Mézard et Parisi [MP03], dont les similarités et différences sont discutées au chapitre suivant.

Les formules dérivées ci-dessus pour les grandes déviations de la couverture sur graphes poissonniens doivent être substituées à la formule (31) de [Riv04] qui est une conjecture erronée. De plus, les assertions faites dans [Riv04] qui confondent la non-frustration et la bicoloriabilité sont à nuancer à la lumière des discussions menées plus haut : seule la non-extensivité du nombre de boucles impaires est accessible aux calculs de cavité, ce qui n'est pas équivalent à leur absence.

L'application des grandes déviations au problème de la rigidité est développée dans [Riv05a]. La transition de κ-cœur y joue un rôle central, puisque l'équation de cavité des modèles de réseaux aléatoirement connectés reproduit (4.16) ; cependant comme pour le coloriage, la percolation de κ-cœur est une condition nécessaire mais non suffisante de non-satisfaisabilité. Un autre domaine où se mêlent rigidité et adaptabilité, et qui constitue à ce titre un champ d'application potentiel du formalisme développé, a trait à la flexibilité des protéines [TRL$^+$01].

Troisième partie

Phases vitreuses

Chapitre 7

Grandes déviations internes

Ce chapitre est consacré à une analyse des grandes déviations sur les solutions de cavité (la structure interne), dont la désignation traditionnelle de « méthode à un pas de brisure de la symétrie des répliques » est abrégée ici en « méthode à un pas ».

7.1 Approche à un pas

L'approche liquide développée au chapitre 5, et sur laquelle le chapitre 6 s'est également appuyé, présente dans certains cas des incohérences dont l'origine a déjà été attribuée en 5.1 au nombre exponentiel de solutions aux équations de cavité (5.20). Physiquement, ces équations sont dérivées en minimisant le surcoût généré par chaque addition de nœud, *étant donné l'environnement local*, décrit par les champs des liens voisins. Or il se peut qu'une configuration minimise partout localement l'énergie, sans pour autant correspondre à un minimum global ; cette situation, à l'origine de l'existence d'un nombre exponentiel de solutions de cavité non optimales, caractérise les *phases vitreuses*.

L'approche *à un pas* consiste à étudier la statistique des solutions de cavité, et plus précisément les grandes déviations de leur énergie. En préliminaire, cela nécessite de préciser la signification de « solution de cavité » en complétant les équations du type (5.20) par la donnée de la structure sur laquelle elles opèrent. La structure visée est celle de « graphe aléatoire infini », destinée à décrire le comportement asymptotique d'un graphe aléatoire typique mais dont la caractérisation s'effectue par l'intermédiaire des arbres. En évacuant le problème de boucles, les arbres posent en contrepartie le problème des conditions au bord. Dans le cas le plus favorable, il existe

une distribution des champs qui s'établit indépendamment des conditions au bord, et qui fournit ainsi une description liquide du système. L'approche liquide n'exige toutefois pas une complète indépendance vis-à-vis du bord pour avoir un sens (ni même pour être valide, ainsi que discuté au chapitre 8) : il suffit qu'il existe un choix de distribution des champs au bord tel que leur distribution se reproduise d'une génération à l'autre. Ce sont les champs associés à un tel choix qui sont désormais désignés sous le terme de *solutions de cavité*. Dans ce cadre, l'approche liquide consiste à ne retenir qu'une seule solution (typique), tandis que l'approche à un pas traite globalement de l'ensemble noté $\mathcal{S}$ de ces solutions.

Afin d'étudier la physique statistique des solutions de cavité $\alpha \in \mathcal{S}$, une énergie $E[\alpha]$ doit être associée à chacune d'entre elles. Sur un graphe donné, celle-ci est donnée par la formule (5.23) ou (5.26) ; sur un arbre, il suffit comme expliqué en 5.2 d'ignorer la correction de clause (ou de nœud) et de prendre en compte les conditions au bord. La (ou les) solution(s) d'intérêt sont alors celle(s) d'énergie minimale, $E_0 = \min_\alpha E[\alpha]$. Ainsi, le problème initial d'optimisation sur les configurations $\sigma \in \mathcal{C}$, est-il traduit en un problème d'optimisation auxiliaire, dont les configurations sont les solutions de cavité $\alpha \in \mathcal{S}$. Ces configurations étant supposées en nombre exponentiel, la détermination de leur fondamental requiert en général d'évaluer les grandes déviations de leur énergie, ainsi qu'expliqué au chapitre 2. La grandeur au centre de cette analyse est l'entropie microcanonique, *cf.* (2.9), qui reçoit le nom de *complexité* et est notée $\Sigma(\epsilon)$ dans le contexte spécifique des équations de cavité. Par définition, la complexité décrit le nombre $\mathcal{N}_N(E)$ de solutions de cavité associées à une énergie E, suivant la relation

$$\mathcal{N}_N(E = N\epsilon) \equiv \#\{\alpha \in \mathcal{S} : E[\alpha] = N\epsilon\} \asymp e^{N\Sigma(\epsilon)}. \tag{7.1}$$

Plus exactement, cette « définition » exprime un principe de grandes déviations (ou devrait-on plutôt dire ici un *principe entropique*) sur lequel repose l'approche *à un pas* présentée dans ce chapitre. En tant que fonction entropie, la complexité s'étudie dans l'ensemble canonique en introduisant une température inverse, notée y dans ce contexte, et un potentiel $\phi(y)$, à partir desquels la densité du fondamental $\epsilon_0 = \lim_{N\to\infty}(\min_\alpha E[\alpha]/N)$ s'obtient en prenant la limite de température nulle, $\epsilon_0 = \lim_{y\to\infty}[\phi(y)/y]$. À l'instar du REM, la mesure de Boltzmann peut se concentrer sur un nombre subexponentiel de solutions. Dans ce cas comme pour le REM, il devient nécessaire de sélectionner la température de gel $y_c < \infty$ à laquelle le système auxiliaire subit sa crise entropique, c'est-à-dire la valeur de y pour laquelle la complexité s'annule.

La méthode de cavité procède au calcul de $\Sigma(\epsilon)$ en estimant les modifications du système lorsque sa taille est variée d'une unité. La récursion sur laquelle elle se fonde dans le cadre à un pas s'écrit schématiquement

$$\mathcal{N}_{N+1}(E) = \int d\Delta E P(\Delta E) \mathcal{N}_N(E - \Delta E), \tag{7.2}$$

où $P(\Delta E)$ représente la distribution, sur les différentes solutions de cavité α, du déplacement d'énergie $\Delta E^{(\alpha)}$ consécutif à l'addition d'un élément. Cette relation doit être mise en regard avec son analogue (3.18) utilisée pour résoudre le polymère dirigé, et avec laquelle elle présente une différence majeure : en l'absence de préfacteur multiplicatif, la relation (7.2) exprime en effet une conservation du nombre total de solutions lorsque N est varié. Cette propriété étant en contradiction flagrante avec l'hypothèse d'explosion exponentielle du nombre de niveaux $E[\alpha]$ avec la taille N, exprimée par (7.1), la relation (7.2) n'est jamais valable pour l'intégralité du spectre d'énergie. Il est supposé dans la suite de ce chapitre qu'elle s'applique pour les énergies suffisamment basses, $\epsilon < \epsilon_G$, la discussion de cette hypothèse, y compris le calcul de ϵ_G lorsqu'il y a lieu, faisant l'objet du chapitre suivant.

Formules à un pas

Le calcul par la cavité de la complexité $\Sigma(\epsilon)$ combine chacun des ingrédients introduits au cours des trois chapitres précédents : les graphes aléatoires sont toujours traités dans l'approximation des arbres, la dérivation de $\phi(y)$ par ajout successif de nœuds suit celle de l'énergie dans l'approche liquide, et enfin les grandes déviations associées à $\Sigma(\epsilon)$ sont évaluées de façon analogue à celles portant sur la structure externe. On se place donc dans un premier temps sur un arbre tronqué de racine i tel que représenté par le schéma 5.1 (l'extension aux hypergraphes est présentée ci-dessous). D'après la relation (7.2), la complexité $\Sigma^{(i\to 0)}(\epsilon)$ exprimant le nombre de solutions α d'énergie E en présence de i par $\exp[N\Sigma^{(i\to 0)}(E/N)]$ est reliée à la complexité $\Sigma^{(-i)}(\epsilon)$ décrivant ce même nombre en l'absence de i par $\exp[(N-1)\Sigma^{(-i)}(E/(N-1))]$, suivant la relation

$$e^{N\Sigma^{(i\to 0)}(E/N)} = \int d\Delta E P^{(i\to 0)}(\Delta E) e^{(N-1)\Sigma^{(-i)}[(E-\Delta E)/(N-1)]}. \tag{7.3}$$

Ici $P^{(i\to 0)}(\Delta E)$ décrit la distribution, parmi les différentes solutions de cavité α, des déplacements d'énergie $\Delta E^{(\alpha)}$ engendrés par la connexion de i à ses voisins j autres que 0, $j \in i-0$. Il s'agit ensuite de procéder au développement usuel en $1/N$. En introduisant $y = \partial_\epsilon \Sigma^{(-i)}(\epsilon)$ et le déplacement de complexité

$\Delta\Sigma^{(i\to 0)}$ analogue au surcoût $\Delta E^{(i\to 0)}$ de l'approche liquide, $\Delta\Sigma^{(i\to 0)}(E/N) \equiv N\Sigma^{(i\to 0)}(E/N) - N\Sigma^{(-i)}(E/N)$, on obtient ainsi

$$\Delta\phi^{(i\to 0)}(y) \equiv y\epsilon - \Delta\Sigma^{(i\to 0)}(\epsilon) = -\ln\left[\int d\Delta E P^{(i\to 0)}(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right]. \quad (7.4)$$

Il convient de souligner que $P^{(i\to 0)}(\Delta E)$ est de nature différente du $P_n^{(k)}(\Delta E)$ du chapitre précédent qui représentait dans le calcul des grandes déviations sur la structure externe une distribution spatiale, sur les différents liens orientés. Ceci étant, le calcul de $P^{(i\to 0)}(\Delta E)$ s'effectue, de manière analogue à celui de $P_n^{(k)}(\Delta E)$, par l'intermédiaire de champs de cavité. En reprenant *mutatis mutandis* les notations du chapitre précédent, *cf.* (6.10), on peut ainsi écrire

$$\begin{aligned} R^{(i\to 0)}(h,E) &= \int dh d\Delta E Q^{(i\to 0)}(h,\Delta E) e^{(N-1)\Sigma^{(-i)}[(E-\Delta E)/(N-1)]} \\ &= e^{N\Sigma^{(-i)}(\epsilon)+y\epsilon-\Sigma^{(i\to 0)}(\epsilon)} \int dh d\Delta E Q^{(i\to 0)}(h,\Delta E) e^{-y\Delta E} \\ &\equiv e^{N\Sigma^{(i\to 0)}(\epsilon)} e^{\Delta\phi^{(i\to 0)}(y)} P^{(i\to 0)}(h). \end{aligned} \quad (7.5)$$

La factorisation à l'œuvre au niveau des équations (6.10) se retrouve donc ici aussi, autorisant à définir une distribution $P^{(i\to 0)}(h)$ des champs sur le lien orienté $(i \to 0)$, qui satisfait

$$\begin{aligned} &e^{-\Delta\phi^{(i\to 0)}(y)} P^{(i\to 0)}(h^{(i\to 0)}) = \\ &\int \prod_{j\in i-0} dh^{(j\to i)} P^{(j\to i)}(h^{(j\to i)}) \delta(h^{(i\to 0)} - \hat{h}^{(i\to 0)}(\{h^{(j\to i)}\})) e^{-y\Delta\hat{E}^{(i\to 0)}(\{h^{(j\to i)}\})}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

où $\Delta\phi^{(i\to 0)}$ est déterminé par la condition de normalisation de $P^{(i\to 0)}(h)$. Les messages qui se propagent selon les différents liens orientés $(i \to j)$, sont donc désormais des distributions $P^{(i\to j)}$, et non plus des champs $h^{(i\to j)}$ comme dans l'approche liquide.

Le formalisme se généralise aux hypergraphes, pour lesquels on peut reprendre les deux types de champs h et u introduits à l'occasion de l'approche liquide en leur associant des distributions $P(h)$ et $Q(u)$, portant toujours sur

les différentes solutions de cavité α,

$$\begin{aligned}
P^{(i\to a)}(h^{(i\to a)}) =& \int \prod_{b\in i-a} du^{(b\to i)} Q^{(b\to i)}(u^{(b\to i)})\delta\left(h^{(i\to a)} - \hat{h}^{(i\to a)}(\{u^{(b\to i)}\})\right), \\
Q^{(b\to i)}(u^{(b\to i)}) =& e^{-\Delta\phi^{(b\to i)}(y)} \int \prod_{j\in b-i} dh^{(j\to b)} P^{(j\to b)}(h^{(j\to b)}) \\
& \delta\left(u^{(b\to i)} - \hat{u}^{(b\to i)}(\{h^{(j\to b)}\})\right) e^{-y\Delta\hat{E}^{(b\to i)}(\{h^{(j\to i)}\})}
\end{aligned} \tag{7.7}$$

où, pour les problèmes de satisfaction de contraintes par exemple, les fonctions $\hat{h}$ et $\hat{u}$ sont données par (5.20). Le potentiel $\phi(y)$, dont la transformée de Legendre renvoie la complexité $\Sigma(\epsilon)$, s'exprime sur arbre comme somme des $\Delta\phi^{(i\to j)}(y)$ suivant une orientation donnée. Par le même argument que celui invoqué pour ϵ dans l'approche liquide, *cf.* (5.23), la version sur graphe s'écrit

$$\phi(y) = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{N} \Delta\phi^{(i+a\in i)}(y) - \sum_{a=1}^{M}(\ell_a - 1)\Delta\phi^{(a)}(y)\right). \tag{7.8}$$

Cette formule fait intervenir des contributions de nœud et de clause dont les expressions explicites, en fonction des seuls champs h, sont

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\phi^{(i+a\in i)}(y)} &= \int \prod_{a\in i}\prod_{j\in a-i} dh^{(j\to a)} P^{(j\to a)}(h^{(j\to a)}) e^{-y\Delta\hat{E}^{(i+a\in i)}(\{h^{(j\to a)}\})}, \\
e^{-\Delta\phi^{(a)}(y)} &= \int \prod_{j\in a} dh^{(j\to a)} P^{(j\to a)}(h^{(j\to a)}) e^{-y\Delta\hat{E}^{(a)}(\{h^{(j\to a)}\})},
\end{aligned} \tag{7.9}$$

avec les fonctions $\Delta\hat{E}^{(i+a\in i)}$ et $\Delta\hat{E}^{(a)}$ données par les équations (5.27). Ces déplacements de potentiel s'obtiennent comme $\Delta\phi^{(i\to 0)}$ dans (7.6), en considérant l'addition d'un nœud ou d'une clause. De même, la version duale, *cf.* (5.26), de l'expression pour $\phi(y)$ s'écrit en interchangeant formellement les i et a d'une part et les h et u de l'autre,

$$\phi(y) = \frac{1}{N}\left(\sum_{a=1}^{M} \Delta\phi^{(a+i\in a)}(y) - \sum_{i=1}^{N}(k_i - 1)\Delta\phi^{(i)}(y)\right), \tag{7.10}$$

avec maintenant

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\phi^{(a+i\in a)}(y)} &= \int \prod_{i\in a}\prod_{b\in i-a} du^{(b\to i)} Q^{(b\to i)}(u^{(b\to i)}) e^{-y\Delta\hat{E}^{(a+i\in b)}(\{u^{(b\to i)}\})}, \\
e^{-\Delta\phi^{(i)}(y)} &= \int \prod_{a\in i} dh^{(a\to i)} Q^{(a\to i)}(u^{(a\to i)}) e^{-y\Delta\hat{E}^{(i)}(\{u^{(a\to i)}\})},
\end{aligned} \tag{7.11}$$

et les fonctions $\Delta\hat{E}^{(a+i\in b)}$ et $\Delta\hat{E}^{(i)}$ définies par (5.27). Les deux expressions de ϕ, (7.8) et (7.10), vues comme fonction des $P^{(j\to i)}$, sont toutes deux variationnelles, au sens de la section 5.4. Toutes les conclusions tirées à ce sujet dans le cadre liquide se généralisent en effet à l'approche à un pas.

Moyenne sur les graphes

Moyennées sur un ensemble de graphes, les formules ci-dessus, décrivent, comme dans le cas liquide, les valeurs typiques des potentiels sur cet ensemble. Il est alors nécessaire d'introduire pour paramètre d'ordre des fonctionnelles $\mathcal{P}[P]$ et $\mathcal{Q}[Q]$, qui décrivent les distributions spatiales, sur les différents liens orientés $(i \to a)$ et $(b \to i)$, des distributions $P^{(i\to a)}$ et $Q^{(b\to i)}$ des champs de cavité. Si $p_n(k)$ et $p_c(\ell)$ désignent respectivement les distributions limites des degrés des nœuds et des clauses, les équations de cavité moyennes se lisent

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}[P] &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k p_n(k)}{\langle k\rangle_n} \int \prod_{a=1}^{k-1} \mathcal{D}Q^{(a)} \mathcal{Q}[Q^{(a)}] \delta\left[P - \hat{P}^{(k-1)}[\{Q^{(a)}\}]\right], \\
\mathcal{Q}[Q] &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\ell p_c(\ell)}{\langle \ell\rangle_c} \int \prod_{i=1}^{\ell-1} \mathcal{D}P^{(i)} \mathcal{P}[P^{(i)}] \delta\left[Q - \hat{Q}^{(\ell-1)}[\{P^{(i)}\}]\right], \\
\hat{P}^{(k-1)}[\{Q^{(a)}\}](h^{(i)}) &= \int \prod_{a=1}^{k-1} du^{(a)} Q^{(a)}(u^{(a)}) \delta\left(h^{(i)} - \hat{h}^{(k-1)}(\{u^{(a)}\})\right), \\
\hat{Q}^{(\ell-1)}[\{P^{(i)}\}](u^{(a)}) &\propto \int \prod_{i=1}^{\ell-1} dh^{(i)} P^{(i)}(h^{(i)}) \delta\left(u^{(a)} - \hat{u}^{(\ell-1)}(\{h^{(i)}\})\right) e^{-y\Delta\hat{E}^{(\ell-1)}(\{h^{(i)}\})},
\end{aligned} \tag{7.12}$$

où la constante de proportionnalité de la dernière équation s'obtient par normalisation. En présence d'une source additionnelle de désordre externe, tels les J_a dans K-SAT, qui intervient alors dans la définition des fonctions $\hat{h}$ et/ou $\hat{u}$, la moyenne correspondante doit être effectuée au niveau des deux premières équations, c'est-à-dire au même niveau que les moyennes sur la

connectivité. La moyenne de l'équation (7.8) est alors

$$\begin{aligned}\phi(y) = &\sum_{k=0}^{\infty} p_n(k) \prod_{a=1}^{k} \sum_{\ell_a=0}^{\infty} \frac{\ell_a p_c(\ell_a)}{\langle \ell \rangle_c} \\ &\int \prod_{a=1}^{k} \prod_{i_a=1}^{\ell_a-1} \mathcal{D}P^{(i_a)} \mathcal{P}[P^{(i_a)}] \ln \left[\int \prod_{a=1}^{k} \prod_{i_a=1}^{\ell_a-1} dh^{(i_a)} P(h^{(i_a)}) e^{-y\Delta \hat{E}_n(\{h^{(i_a)}\})} \right] \\ &- \frac{\langle k \rangle_n}{\langle \ell \rangle_c} \sum_{\ell=0}^{\infty} p_c(\ell)(\ell-1) \\ &\int \prod_{i=1}^{\ell} \mathcal{D}P^{(i)} \mathcal{P}[P^{(i)}] \ln \left[\int \prod_{i=1}^{\ell} dh^{(i)} P^{(i)}(h^{(i)}) e^{-y\Delta \hat{E}_c(\{h^{(i)}\})} \right].\end{aligned} \tag{7.13}$$

L'expression duale, moyenne de (7.10), s'écrit de la même manière en interchangeant formellement les variables relatives aux nœuds et aux clauses. Il est également possible d'effectuer simultanément aux grandes déviations internes, une analyse des grandes déviations sur la structure externe dans l'esprit du chapitre précédent ; il en ressort que la valeur moyenne exprimée ci-dessus coïncide en effet avec la valeur typique [Riv05b].

Dynamique de population

En pratique, les équations (7.12) peuvent être résolues par un algorithme de *dynamique de population* [MP01]. Cette méthode s'applique déjà au niveau liquide, pour trouver un point fixe à une équation du type (5.7). Elle consiste dans ce cas à représenter la distribution $\mathcal{P}(h)$ par $\mathcal{M}$ éléments h_i puis à procéder itérativement en remplaçant successivement chaque h_i par un nouveau champ h'_i obtenu en tirant aléatoirement un nombre k de parents selon $q(k)$ puis en formant $h'_i = \hat{h}^{(k)}(h_{i_1}, \ldots, h_{i_k})$ à partir de k champs $h_{i_1}, \ldots, h_{i_k}$ tirés aléatoirement dans la population. Les remplacements sont effectués jusqu'à ce qu'une distribution stationnaire soit atteinte, et les diverses quantités thermodynamiques sont alors calculées de façon approchée à partir des h_i. Cette méthode, à laquelle il n'est pas nécessaire de recourir pour la couverture ou le coloriage, est par contre utilisée pour obtenir la solution liquide aux problèmes de matching pour lesquels $\mathcal{P}(h)$ n'admet pas de paramétrisation simple car les champs ne sont pas restreints aux entiers [MMR04, MMR05].

La même méthode s'applique aux équations de cavité à un pas. Les distributions de distribution du type $\mathcal{P}[P(h)]$ sont représentées par $\mathcal{M}$ ensembles

(pour $\mathcal{P}$) de M éléments chacun (pour les P_i), soit une collection de $\mathcal{M} \times M$ champs $h_i^{(\alpha_i)}$, $i = 1, \ldots, \mathcal{M}$ et $\alpha_i = 1, \ldots, M$. Le principe d'échantillonnage de $\mathcal{P}$ est le même que dans le cas liquide. Au niveau des équations pour les P_i, la présence d'un terme de repondération tel que celui de (7.6) complique un peu le schéma, puisque les différentes valeurs des champs reçoivent des poids différents. Une possibilité consiste alors à multiplier ou supprimer les nouveaux champs générés en proportion de leur poids relatif, tout en maintenant une population totale approximativement constante. Cette méthode est par exemple celle utilisée dans le cadre des problèmes de matching pour détecter la présence d'une solution à un pas [MMR04, MMR05].

7.2 Factorisation

Un cas particulier remarquable est celui des problèmes dépourvus de désordre local, comme par exemple le coloriage sur graphes réguliers, pour lesquels l'invariance spatiale implique que la distribution $\mathcal{P}[P]$ soit en fait piquée sur une seule valeur P^*, $\mathcal{P}[P] = \delta[P - P^*]$. Cette situation, dite *factorisée*, permet une résolution analytique des équations (7.6).

Graphes réguliers

Une illustration de la simplicité du formalisme à un pas factorisé est donné par le problème de la couverture sur graphes réguliers de connectivité fixée r. Dans ce cas P^* est de plus lui-même concentré sur deux entiers, si bien que $\mathcal{P}[P](h)$ se laisse décrire par un unique réel ζ, tel que $\mathcal{P}[P] = \delta[P - P^*]$ avec $P^* = \zeta\delta_0 + (1-\zeta)\delta_1$. En appliquant les différentes formules, on obtient ainsi

$$\zeta = \frac{1 - \zeta^{r-1}}{1 + (e^y - 1)\zeta^{r-1}}, \tag{7.14}$$

et

$$\phi(y) = -\ln[\zeta^r + (1-\zeta^r)e^{-y}] + \frac{r}{2}\ln[1 + (e^{-y} - 1)(1-\zeta)^2]. \tag{7.15}$$

La courbe de complexité $\Sigma(\epsilon)$ correspondante, décrite par les formules générales

$$\begin{aligned} \Sigma(y) &= y\epsilon(y) - \phi(y) = y^2\partial_y[\phi(y)/y], \\ \epsilon(y) &= \partial_y\phi(y), \end{aligned} \tag{7.16}$$

est représentée sur la figure 7.1 pour $r = 3$. Elle s'annule à une valeur de y finie, à laquelle est associée la prédiction pour l'énergie fondamentale

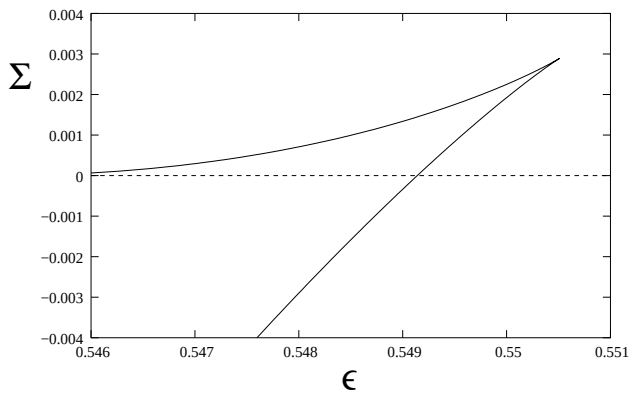

FIG. 7.1 – *Complexité $\Sigma(\epsilon)$ de la couverture sur graphes 3-réguliers.* Cette courbe présente une partie concave et une partie non concave séparées par un point de rebroussement. La partie non concave est certainement non physique et reflète l'inapplicabilité de la méthode à un pas aux énergies les plus hautes. La partie concave est elle physiquement plausible : elle s'annule à un $y = \partial_\epsilon \Sigma(\epsilon)$ fini comme l'entropie du REM ; l'analyse menée au chapitre suivant révèle cependant que cette partie est au moins partiellement inexacte.

$\epsilon = 0,54914$. Cette courbe présente également un point de rebroussement à ϵ_r et une partie non concave qui signale clairement que l'approche à un pas n'est pas valable pour $\epsilon > \epsilon_r$. La question de savoir si elle s'applique pour $\epsilon < \epsilon_r$ est discutée au chapitre suivant ; la réponse qui y sera donnée est négative mais elle devient positive pour les modèles d'apparence très semblables discutés dans [RBMM04].

Enfin, la partie négative de la courbe de complexité $\Sigma(\epsilon)$ s'interprète, comme l'entropie négative du REM en 3.1, en termes de grandes déviations [Riv04] : lorsque $\Sigma(\epsilon) < 0$, la quantité $e^{N\Sigma(\epsilon)}$ correspond à la probabilité qu'un graphe de l'ensemble ait exceptionnellement un amas de densité d'énergie ϵ. En particulier, pour $y \to \infty$, on obtient la probabilité que le graphe ne soit pas frustré, c'est-à-dire admette une *densité* d'énergie fondamentale égale à celle ϵ_{arbre} sur un graphe sans boucle. Pour la couverture sur graphe r-régulier où $\epsilon_{\text{arbre}} = 1/2$, on obtient ainsi dans cette limite $\epsilon(y = \infty) = 1/2$ et $\Sigma(y = \infty) = -[(r-2)/2] \ln 2$; or un calcul combinatoire indépendant fournit $P_N(\epsilon = 1/2) \asymp 2^{-N(r/2-1)}$ [Riv04], ce qui permet de valider l'interprétation proposée, à savoir

$$P_N(\epsilon = \epsilon_{\text{arbre}}) \asymp e^{N\Sigma(y=\infty)}. \tag{7.17}$$

L'étude d'autres modèles que la couverture confirme également cette relation, ainsi qu'exposé dans [Riv04].

Graphes poissonniens

Pour les graphes poissonniens, la présence d'hétérogénéités locales dues aux fluctuations de la connectivité ne permet plus la factorisation. Une dérivation des équations factorisées pour ces graphes est néanmoins proposée ici afin d'offrir un parallèle au calcul des grandes déviations sur la structure externe du chapitre précédent. La différence essentielle, qui apparaît au niveau du premier pas, est que les moyennes sont effectuées au niveau de la complexité, qui est supposée être automoyennante, et non plus au niveau de son exponentielle. Ainsi, la contrepartie des équations (6.4) avec des notations similaires est

$$\begin{aligned}
&(N+1)\Sigma(E/(N+1),\lambda) \simeq N\Sigma(\epsilon) + \Sigma(\epsilon,\lambda) - ye \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \ln\left[\int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{N\Sigma[(E-\Delta E)/N, \lambda - \chi(\lambda,k)/N]}\right] \\
&\asymp \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \ln\left[\int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{N\Sigma(\epsilon) - y\Delta E - z\chi(\lambda,k)}\right] \\
&= N\Sigma(\epsilon) + \sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k) \ln\left[\int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right] \\
&\quad - z\left(\sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k)\chi(k,\lambda)\right).
\end{aligned} \tag{7.18}$$

De même, à la différence de (6.6), z est désormais donné par

$$\begin{aligned}
z &= \sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k) \ln\left[\left(\int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right)^k\right] \\
&= \left(\sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k) k\right) \ln\left(\int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right).
\end{aligned} \tag{7.19}$$

À ce niveau, les deux modèles, binomial et uniforme, apparaissent équivalents, puisqu'avec $\gamma = 2\alpha$ il vient $\left(\sum_{k=0}^{\infty} p^{(\lambda)}(k)\chi(k,\lambda)\right) = \lambda$ dans les deux cas *via* (6.2), et $\sum_{k=0}^{\infty} \sigma(k)k = 1$ pour le modèle uniforme et $1/2$ pour le binomial *via* (6.7). La formule typique factorisée du potentiel ne dépend ainsi que de la distribution limite de connectivité π_γ,

$$\phi_{\text{fact}}^{(\gamma)} = \sum_{k=0}^{\infty} \pi_\gamma(k) \ln\left[\int d\Delta E P_n^{(k)}(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right] - \frac{\gamma}{2} \ln\left[\int d\Delta E P_\ell(\Delta E) e^{-y\Delta E}\right]. \tag{7.20}$$

Encore une fois, cette approche factorisée des graphes poissonniens n'est certainement jamais exacte, mais elle permet de souligner les analogies et différences entre les approches de cavité aux grandes déviations externes et internes.

7.3 Transitions vitreuses

Le problème du coloriage sur graphes poissonniens fournit une illustration de la manière avec laquelle la méthode à un pas résout les incohérences de la solution liquide et permet de déterminer les transitions de phases dans les problèmes de satisfaction de contraintes.

Équations pour $y = \infty$

Pour le coloriage où $Q(u)$ se paramétrise à l'aide d'un unique réel η, *cf.* (5.31), la fonctionnelle $\mathcal{Q}[Q]$ se résume à une distribution $\rho(\eta)$. En dessous du seuil de satisfaisabilité, dans le domaine où les graphes sont coloriables, un graphe possède certainement un nombre exponentiel de coloriages. Une telle situation ne peut correspondre à une phase condensée et est donc bien décrite par la limite $y \to \infty$. Dans ce cadre, la valeur (nulle) du fondamental, est déjà connue, et l'intérêt se porte sur la complexité $\Sigma(\epsilon = 0)$ décrivant le nombre de solutions de cavité. Dans la limite $y = \infty$, on trouve pour l'équation satisfaite par $\rho(\eta)$ [MPWZ02]

$$\rho(\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma^k e^{-\gamma}}{k!} \int \prod_{j=1}^{k} d\eta_j \rho(\eta_j) \delta(\eta - \hat{\eta}^{(k)}(\eta_1, \ldots, \eta_k)), \tag{7.21}$$

avec

$$\hat{\eta}^{(k)}(\eta_1, \ldots, \eta_k) = \frac{\sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^\ell \binom{q-1}{\ell} \prod_{j=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta_j)}{\sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^\ell \binom{q}{\ell+1} \prod_{j=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta_j)}. \tag{7.22}$$

La résolution de cette équation, qui peut s'effectuer par dynamique de population, localise une première transition, dite *dynamique*, à γ_d qui marque l'entrée dans une phase vitreuse : aux faibles connectivités, $\gamma < \gamma_d$, la seule solution trouvée est en effet, $\rho(\eta) = \delta(\eta)$, correspondant donc à une solution liquide, alors que pour $\gamma > \gamma_d$ apparaît discontinûment une distribution à support continu.

Interprétation

L'expression (7.22), obtenue ici par des moyens quelque peu détournés, se dérive également par des arguments purement probabilistes qui permettent d'en dégager l'interprétation. L'idée est qu'un champ de cavité propage le long d'un lien orienté $(j \to i)$ un message qui renseigne le nœud en aval i sur les contraintes à satisfaire compte tenu des contraintes qui pèsent sur le nœud en amont j (voir toujours figure 5.1). La quantité $\eta^{(i\to 0)}$ représente ainsi la probabilité que i ait une couleur particulière imposée par l'état de ses k voisins, 0 exclu. En désignant par « parents » ces k voisins, la propagation des contraintes des parents au nœud i s'écrit

$$\begin{aligned}\eta^{(i\to 0)} \propto\ & \mathbb{P}(\text{couleur 0 n'est imposée à aucun des } k \text{ parents} \\ & \quad \text{mais chacune des autres couleurs l'est à au moins un des parents}) \\ =& 1 - \mathbb{P}(\text{couleur 0 est imposée à au moins un des parents}) \\ & - \mathbb{P}(\text{couleur 0 et au moins une autre couleur ne sont pas imposées})\end{aligned} \tag{7.23}$$

où $\propto$ désigne une relation de proportionnalité, dont la constante multiplicative est déterminée ci-après. Par passage au complémentaire, $\mathbb{P}$(couleur 0 est imposée à au moins un des parents) $= 1 - \prod_{j=1}^{k}(1 - \eta^{(j\to i)})$. L'événement « couleur 0 et au moins une autre couleur ne sont imposées à aucun parent » est la réunion des événements « couleurs 0 et σ ne sont imposées à aucun des parents », pour $\sigma = 1, \ldots, q-1$. Or la probabilité de l'union d'événements non indépendants s'exprime par la formule de Poincaré,

$$\mathbb{P}(A_1 \cup \cdots \cup A_n) = \sum_{\ell=1}^{n} (-1)^{\ell+1} \sum_{1\le j_1<\cdots<j_\ell\le n} \mathbb{P}(A_{j_1} \cap \cdots \cap A_{j_\ell}). \tag{7.24}$$

En prenant $A_\sigma =$ « couleurs 0 et σ ne sont imposées à aucun des parents » on obtient ainsi

$$\mathbb{P}(A_1 \cup \cdots \cup A_{q-1}) = \sum_{\ell=1}^{q-1} (-1)^{\ell+1} \binom{q-1}{\ell} \prod_{j=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta^{(j\to i)}), \tag{7.25}$$

et finalement

$$\eta^{(i\to 0)} = \frac{1}{Z_k} \sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^{\ell} \binom{q-1}{\ell} \prod_{i=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta^{(j\to i)}). \tag{7.26}$$

Pour déterminer Z_k, il reste à évaluer la probabilité qu'aucune couleur ne soit imposée

$$\begin{aligned} 1 - q\eta^{(i\to 0)} \propto\ & \mathbb{P}(\text{au moins deux couleurs ne sont pas imposées}) \\ =& 1 - \mathbb{P}(\text{toutes les couleurs sont imposées}) \\ & - \mathbb{P}(\text{une et une seule couleur n'est pas imposée}). \end{aligned} \tag{7.27}$$

La probabilité qu'« une et seulement une couleur n'est pas imposée » est exactement q fois, une fois pour chacune des couleurs possibles, la probabilité $\mathbb{P}$(couleur 0 n'est pas imposée et toutes les autres le sont) qui vient juste d'être évaluée. Enfin, $\mathbb{P}$(toutes les couleurs sont imposées) $= 1 - \mathbb{P}$(au moins une couleur n'est pas imposée) et, par une nouvelle application de la formule de Poincaré,

$$\mathbb{P}(\text{au moins une couleur n'est pas imposée}) = \sum_{\ell=1}^{q} (-1)^{\ell+1} \binom{q}{\ell} \prod_{j=1}^{k} (1 - \ell\eta^{(j\to i)}), \tag{7.28}$$

de sorte que

$$1 - q\eta^{(i\to 0)} = \frac{1}{Z_k} \sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^{\ell} \left[\binom{q}{\ell+1} - q\binom{q-1}{\ell} \right] \prod_{i=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta^{(j\to i)}). \tag{7.29}$$

Ainsi trouve-t-on pour la normalisation

$$Z_k = \sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^{\ell} \binom{q}{\ell+1} \prod_{j=1}^{k} (1 - (\ell+1)\eta^{(j\to i)}), \tag{7.30}$$

conformément à la formule (7.22). Cette dernière traduit donc exactement le problème suivant : chaque parent $j = 1, \ldots, k$ de i ayant la probabilité $\eta^{(j\to i)}$ d'avoir une des q couleurs $\sigma = 0, \ldots, q-1$ imposée, quelle est la probabilité $\eta^{(i\to 0)}$ que i est lui aussi une couleur imposée, *sachant que* seules sont retenues les configurations des parents compatibles avec la coloriabilité ? Cette restriction, qui élimine les situations où chaque couleur est imposée à au moins un des parents, constitue la distinction essentielle entre l'approche à un pas et l'approche liquide ; dans cette dernière en effet, l'option retenue pour i est également la moins coûteuse, mais il n'est pas exclu qu'elle corresponde à une situation non coloriable (voir [Dux03] pour une dérivation probabiliste des équations liquides qui met cette interprétation en lumière). Formellement, les équations ci-dessus se distinguent ainsi par la présence du facteur de normalisation Z_k, qui rend compte du nombre de configurations

de cavité α compatibles avec les contraintes.

Dans le cadre des arbres, il apparaît donc qu'une configuration de cavité α revient à spécifier, pour chaque nœud i si, en l'absence de sa descendance, une des couleurs lui est imposée et, dans l'affirmative, de quelle couleur il s'agit. Le problème d'optimisation auxiliaire auquel réfèrent les équations de cavité se formule donc en terme d'un coloriage *étendu* où intervient une $(q+1)$-ème couleur, blanche par exemple, qui représente le cas où aucune des q autres couleurs n'est imposée. Si pour simplifier la discussion, on considère un arbre régulier où chaque nœud à le même nombre $(k+1)$ de parents et où les $\eta^{(j\to i)}$ sont donc tous égaux, alors Z_k^N s'interprète comme le nombre de coloriage étendus compatibles avec des conditions aux bord aléatoires, mais autocohérentes, pour un arbre possédant N nœuds. Par définition, la complexité Σ_k qui lui est reliée par $Z^N \asymp e^{N\Sigma_k}$ vaut donc $\Sigma_k = -\ln Z$; dans le cas poissonnien, une moyenne doit aussi être faite sur les différents nœuds dont les environnements sont non-équivalents, et celle-ci doit s'effectuer au niveau de $\ln Z_k$ et non de Z_k, ainsi que déjà vu en 7.2. Sur un graphe enfin, comme expliqué cette fois sur l'exemple de l'énergie liquide de la couverture, cette expression de la complexité doit être corrigée par un terme de lien, ainsi qu'exprimé par la formule (7.31) ci-dessous.

La complexité compte les coloriages étendus $\alpha \in \mathcal{S}$, lesquels diffèrent des coloriages réels $\sigma \in \mathcal{C}$. Ces derniers peuvent néanmoins être reconstitués à partir des premiers en remplaçant les nœuds blancs par une des q couleurs. Tous les choix ne sont bien sûr pas possibles et les contraintes imposées par les voisins doivent être respectées : le calcul du nombre total de solutions ne découle donc pas directement de celui de la complexité, et nécessite les développements présentés en 9.3. À ce stade, il est important de retenir qu'une solution de cavité $\alpha \in \mathcal{S}$ est associée à plusieurs solutions $\sigma \in \mathcal{C}$: ces solutions sont dites appartenir à un même *amas*, ce qui est noté $\sigma \in \alpha$. En termes plus géométriques, qui seront quantifiés en 9.4, les solutions appartenant à un même amas sont proches (elles partagent notamment les mêmes couleurs imposées), tandis que celles appartenant à des amas différents diffèrent par un nombre extensif de couleurs. La phase vitreuse décrite par l'approche à un pas présente donc une brisure d'ergodicité du type de celle rencontrée dans les systèmes ferromagnétiques, à la différence essentielle que le nombre de phases, identifiées aux amas, est exponentiel.

Transition de satisfaisabilité

Le calcul de la complexité $\Sigma(y=\infty)$ permet de construire le diagramme de phase du coloriage en fournissant le seuil γ_c de coloriabilité. En effet, lorsque $\gamma_d < \gamma < \gamma_c$, la complexité $\Sigma(\epsilon = 0)$ doit être positive et correspondre à $y = \infty$. Pour $\gamma > \gamma_c$ en revanche, $\Sigma(\epsilon = 0)$ doit être nulle. Comme dans le REM cependant, et pour des raisons similaires, le calcul conduit à une valeur négative : la valeur $\epsilon > 0$ du fondamental doit alors être cherchée à $y_c < \infty$, associé au point de condensation où la complexité s'annule. S'agissant uniquement de déterminer γ_c toutefois, les calculs dans la limite $y = \infty$ suffisent : le seuil correspond alors précisément au γ pour lequel $\Sigma(\epsilon = 0)$ s'annule.

Dans la limite $y \to \infty$, une application des équations du formalisme général conduit pour la complexité en fonction de $\rho(\eta)$ à la formule [MPWZ02, BMP+03]

$$\begin{aligned}\Sigma(y=\infty) = &\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma^k e^{-\gamma}}{k!} \int \prod_{j=1}^{k} d\eta_j \rho(\eta_j) \ln \left[\sum_{\ell=0}^{q-1} (-1)^\ell \binom{q}{\ell+1} \prod_{j=1}^{k} (1-(\ell+1)\eta_j) \right] \\ &- \frac{\gamma}{2} \int \prod_{j=1}^{2} d\eta_j \rho(\eta_j) \ln(1 - q\eta_1\eta_2).\end{aligned} \tag{7.31}$$

Le premier terme de cette équation correspond à une moyenne de $\ln Z_k$, avec Z_k donné par (7.30), conformément à l'interprétation donnée ci-dessus. Le second terme est une correction portant sur les liens : $1 - q\eta_1\eta_2$ représente la probabilité, lorsque deux nœuds ont respectivement probabilités η_1 et η_2 d'avoir une couleur donnée imposée, qu'ils soient contraints à porter la même couleur.

Le diagramme de phase schématisé sur la figure 7.2 résume le comportement typique prédit par l'approche à un pas pour le 3-coloriage sur graphes poissonniens. Il est constitué de trois phases. Pour $\gamma < \gamma_d$, le système est SAT (coloriable) et liquide (un seul amas). Pour $\gamma_d < \gamma < \gamma_c$, le système est toujours SAT mais les solutions sont distribuées en amas : par opposition au cas liquide dit *SAT-facile*, ce régime est qualifié de *SAT-dur* ; la raison en est que des amas d'énergie $\epsilon > 0$, décrits par $y < \infty$, sont simultanément présent avec $\Sigma(y < \infty) > \Sigma(y = \infty)$ dont on s'attend à ce qu'ils piègent les algorithmes de recherche locale d'une solution. Enfin pour $\gamma > \gamma_c$ le système est NON-SAT (non coloriable) et les solutions d'énergie minimale (non

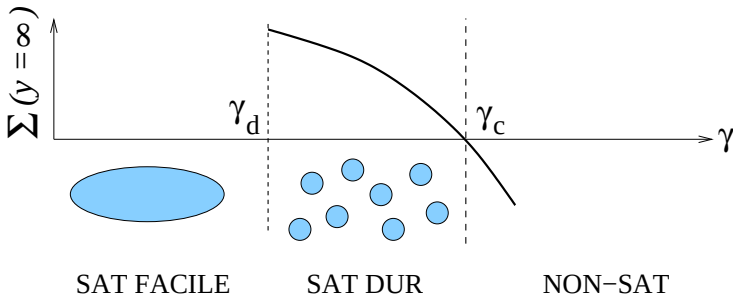

FIG. 7.2 – *Diagramme de phase du 3-coloriage sur graphes poissonniens de connectivité moyenne γ.* La complexité $\Sigma(y = \infty)$ pour 3-COL est représenté schématiquement, ainsi que les trois régimes qui lui sont associés. La courbe exacte, obtenue par dynamique de population, est présentée dans [MPWZ02] où sont obtenus pour les seuils les valeurs $\gamma_d \simeq 4,42$ et $\gamma_c \simeq 4,69$, avec, pour donner un ordre de grandeur, $\Sigma(\gamma_d) \simeq 0,022$.

nulle) sont encore organisées en amas. Ce scénario repose cependant sur la validité de l'approche à un pas : l'étude des solutions de cavité d'énergie non minimale, avec $y < \infty$, révèle comme pour la couverture que cette approche est certainement insuffisante au delà d'une certaine énergie. La question de la validité du premier pas pour les amas d'énergie minimale est examinée au chapitre suivant : l'allure globale du diagramme de phase y est confirmée, en particulier la valeur de γ_c est selon toutes les apparences exacte mais par contre le voisinage de γ_d doit être révisé.

Le q-cœur

Il est intéressant d'observer comment le problème du q-cœur, étudié en 4.3, réapparaît ici [BMP+03]. Dû aux parties faiblement connectées du graphe, $\rho(\eta)$ inclut en effet toujours un pic $\delta(\eta)$, $\rho(\eta) = (1-\zeta)\delta_0(\eta) + \zeta\tilde{\rho}(\eta)$ où $\tilde{\rho}$ est une partie continue. Or l'équation satisfaite par le poids ζ de la partie continue est exactement l'équation du q-cœur (4.14) : en conséquence la percolation du q-cœur est une condition nécessaire à l'existence d'une distribution ρ non triviale, $\rho \neq \delta_0$. Le seuil de percolation du q-cœur apparaît ainsi comme une borne inférieure, qui se révèle stricte, sur le seuil γ_d de transition vitreuse, et en conséquence également sur le seuil de coloriabilité γ_c.

7.4 Enchaînement des pas

Dans de nombreux cas, les grandes déviations sur les solutions de cavité viennent s'ajouter aux grandes déviations associées à un second espace de configurations. La structure emboîtée qui en résulte est à chaque fois analogue à celle obtenue au chapitre 2 au sujet du modèle désordonné sans corrélation, *cf.* (2.36), ou à celle mentionnée au chapitre précédent à propos des instances atypiques, *cf.* 6.4 et [Riv05b].

Température finie

Un cas physiquement important concerne le comportement des systèmes vitreux en fonction de la température. Dans le cadre d'un scénario à un pas, aux grandes déviations thermodynamiques sur $\sigma \in \mathcal{C}$, contrôlées par la température inverse β, viennent se surimposer des grandes déviations sur les solutions $\alpha \in \mathcal{S}_\beta$ des équations de cavité à température finie (5.35). Formellement, le potentiel thermodynamique $\phi_0(\beta)$, se calcule à partir des $\alpha \in \mathcal{S}_\beta$ comme l'énergie du fondamental, la température β n'étant alors qu'un paramètre extérieur fixé. Ainsi pour toute valeur de β, une complexité $\Sigma(\phi, \beta)$ se définit à partir des équations à température finie (5.35),

$$\#\{\alpha \in \mathcal{S}_\beta : \phi_0(\beta) = \phi_0\} \asymp e^{N\Sigma(\phi_0,\beta)}. \tag{7.32}$$

Cette complexité est associée à un potentiel $\phi_1(m, \beta)$ auquel elle est reliée par les relations de Legendre usuelles, et qui peut également s'exprimer à partir de la fonction de partition sur l'espace $\mathcal{S}_\beta$,

$$e^{-N\phi_1(m,\beta)} = \sum_{\alpha \in \mathcal{S}_\beta} e^{-Nm\phi_0^{(\alpha)}(\beta)} = \int d\phi_0 e^{N[\Sigma(\phi_0,\beta) - m\phi_0]}, \tag{7.33}$$

où, par définition, $\phi_0^{(\alpha)}(\beta)$ décrit la thermodynamique à l'intérieur de l'amas α,

$$e^{-N\phi_0^{(\alpha)}(\beta)} = \sum_{s \in \alpha} e^{-\beta E[\sigma]} = \int d\epsilon e^{N[s_0^{(\alpha)}(\epsilon) - \beta\epsilon]}. \tag{7.34}$$

La valeur $m = 1$ joue un rôle particulier, avec

$$\phi_1(m = 1, \beta) = \phi_0(\beta). \tag{7.35}$$

Cette équivalence du formalisme à un pas pour $m = 1$ et du formalisme liquide s'observe explicitement au niveau des équations de cavité, ainsi qu'il sera détaillé en 9.1, et découle naturellement de l'argument qui ramène le problème à température finie à celui d'un problème d'optimisation avec la

température en paramètre externe. Afin de clarifier ce point, il est utile dans un premier temps de distinguer deux températures β_0 et β_1. β_0 fixe la température interne des amas sous considération, alors décrits d'après (7.32) par une complexité $\Sigma(\phi_0, \beta_0)$. Pour une valeur de β_0 désormais fixée, on considère ensuite le problème d'optimisation sur les « configurations » $\alpha \in \mathcal{S}$ dont les « énergies » sont les $\phi_0^{(\alpha)}(\beta_0)$. La transition de condensation des amas α du système initial correspond ainsi pour le nouveau système, dont les α sont les configurations, à une transition de type gel, entièrement déterminée par un phénomène de crise entropique, du type $\Sigma_1(\phi_0, \beta_1) = 0$. Ainsi qu'expliqué sur l'exemple du REM en 3.1, une telle transition de gel se décrit au moyen d'un potentiel $\phi_1(m, \beta_1)$, écrit ici $\phi_1(m, \beta_1; \beta_0)$ pour prendre en compte le paramètre externe β_0. Ce potentiel satisfait comme pour le REM la relation $\phi_1(m, \beta_1; \beta_0) = \phi_0(m\beta_1; \beta_0)$ qui, lorsque lui sont substituées les valeurs $\beta_1 = \beta_0 = \beta$ et $m = 1$, correspond exactement à (7.35).

L'argument précédent indique de plus que l'approche liquide décrit correctement la thermodynamique du système, *indépendamment de la présence ou non d'amas*, pourvu seulement que s'ils existent, les amas d'équilibre soient en nombre exponentiel. Dans une telle situation, l'approche à un pas n'est nécessaire que pour explorer, avec $m \neq 1$, les amas non associés à l'équilibre, dits *métastables*. Bien sûr, en présence d'un phénomène de condensation des amas, c'est-à-dire lorsque les amas contenant les configurations d'équilibre deviennent en nombre subexponentiel, ceux-ci doivent être décrits par une température inverse β_1 artificiellement plus basse que la température extérieure β, ce qui exige l'introduction du second paramètre $m < 1$.

Pour résumer, à partir du potentiel à un pas $\phi_1(m, \beta)$, la thermodynamique d'équilibre est déterminée par la valeur $m^*(\beta)$ de m satisfaisant

$$\Sigma_1(m, \beta) = m^2 \frac{\partial}{\partial m}[\phi_1(m, \beta)/m] = 0. \tag{7.36}$$

Lorsque $m^*(\beta) \geq 1$, le calcul à un pas est superflu et le potentiel d'équilibre recherché $\phi(\beta)$ s'obtient par $\phi(\beta) = \phi_0(\beta) = \phi_1(m = 1, \beta)$. Par contre lorsque $m^*(\beta) < 1$, le calcul à un pas devient nécessaire et $\phi(\beta) = \phi_1(m^*(\beta), \beta)$. Ainsi qu'expliqué, le premier cas n'implique pas que le système soit liquide puisqu'il peut contenir un nombre exponentiel d'amas d'équilibre. L'étude de modèles tels que les verres sur réseaux montre en fait que la transition de condensation à β_s, dite *statique*, peut être précédée d'une transition dite *dynamique* à $\beta_d < \beta_s$, telle que pour $\beta \in [\beta_d, \beta_s]$ le système est constitué d'un nombre exponentiel d'amas d'équilibre, descriptible indifféremment par une approche liquide ou une approche à un pas avec $m = 1$. En général une troisième tem-

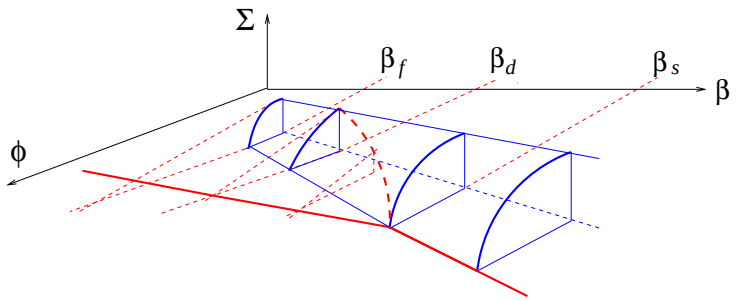

FIG. 7.3 – *Transition aléatoire du premier ordre.* Dans le plan horizontal, est représenté le potentiel d'équilibre $\phi(\beta)$, en fonction de la température inverse β. Il n'est non analytique qu'à β_s. La transition de phase est donc du deuxième ordre au sens thermodynamique, mais elle est qualifiée d'« aléatoire du premier ordre » en référence à la discontinuité du paramètre d'ordre ; à la différence des transitions ordinaires, une telle discontinuité est en effet compatible avec la continuité de ϕ car le paramètre d'ordre est une fonction. Dans la troisième dimension, est représentée la complexité $\Sigma(\phi_0, \beta)$; elle est non nulle à partir de β_f, et si $m_{\min}(\beta)$ et $m_{\max}(\beta)$ désignent pour chaque β ses pentes minimale et maximale, qui correspondent respectivement aux points où Σ est elle-même maximale et nulle, alors β_d correspond à $m_{\min}(\beta) = 1$, et β_s à $m_{\max}(\beta) = 1$.

pérature $\beta_f < \beta_d$ intervient également, qui correspond à la température de *fragmentation* de l'espace des phases, c'est-à-dire à l'apparition d'amas en nombre exponentiel ; pour $\beta \in [\beta_f, \beta_d]$ ces amas, décrits par $m > 1$, sont tous métastables et ne contribuent donc pas à la thermodynamique. Le scénario global lorsque ces trois températures sont distinctes (ce qui n'est toutefois pas le cas dans l'intégralité des modèles) est représenté schématiquement sur la figure 7.3.

Enfin, il convient de noter que le formalisme à température finie restitue comme attendu le formalisme à température nulle lorsque $\beta \to \infty$. Dans cette limite où $\phi_0(\beta)/\beta \to \epsilon$, il est nécessaire de prendre également $m \to 0$ à $y = m\beta$ fixé pour obtenir $\phi_1(m, \beta) \to \phi_1(y)$.

Deuxième pas

Dans le cadre de la température nulle, l'approche à un pas consiste à formuler le problème original d'optimisation sur $\sigma \in \mathcal{C}$ en un problème auxiliaire d'optimisation sur $\alpha \in \mathcal{S}$. Rien n'interdit alors de poursuivre cette construction en reformulant à son tour le problème auxiliaire en un troisième problème, puis de continuer ainsi indéfiniment. Ce type d'enchaîne-

ment multi-pas, qui correspond dans le langage des répliques à un schéma de brisure continue de la symétrie des répliques, semble en fait nécessaire à la résolution de certains modèles, dont l'archétype est le modèle SK des verres de spins [MPV87]. Cependant si multiplier les pas ne présente pas de difficulté conceptuelle majeure, les équations pour les modèles sur graphes dilués deviennent rapidement insolubles en pratique. Le formalisme correspondant au deuxième pas, à partir duquel tous les autres se déduisent récursivement, est cependant brièvement décrit ici en vue des études de stabilité du premier pas menées au chapitre 8.

Dans une approche à deux pas, les solutions $\alpha_1 \in \mathcal{S}$ aux équations de cavité sont elles mêmes organisées en amas α_2 contenant les α_1. Cette situation est parallèle à celle de température finie où il s'agissait également d'intégrer deux niveaux de grandes déviations, à savoir le pas zéro (liquide) et le premier pas. Une première complexité $\Sigma_1(\epsilon)$ est définie comme à l'accoutumée par

$$\#\{\alpha_1 \in \mathcal{S} : \epsilon^{(\alpha_1)} = \epsilon\} \asymp e^{N\Sigma_1(\epsilon)}. \tag{7.37}$$

Il lui est associé une température $y_1 = \partial_\epsilon \Sigma_1(\epsilon)$ et un potentiel $\phi_1(y_1)$. Une deuxième complexité $\Sigma_2(\phi_1, y_1)$ est de plus introduite pour une température y_1 donnée, par

$$\#\{\alpha_2 \in \mathcal{S}_{y_1} : \phi_1^{(\alpha_2)}(y_1) = \phi_1\} \asymp e^{N\Sigma_2(\phi_1, y_1)}, \tag{7.38}$$

encore associée à une température $y_2 = \partial_{\phi_1} \Sigma_2(\phi_1, y_1)$ et un potentiel $\phi_2(y_2, y_1)$.

Au premier niveau, en se limitant aux graphes simples pour alléger les écritures, il vient comme avant

$$e^{-\Delta\phi_1^{(i\to 0)}(y_1)} = \int d\Delta E P_1^{(i\to 0)}(\Delta E) e^{-y_1 \Delta E}, \tag{7.39}$$

qui définit une fonctionnelle $\Delta\hat{\phi}_1^{(i\to 0)}(y_1)[P_1^{(i\to 0)}]$. Au second niveau, le schéma des calculs est reproduit avec

$$e^{-\Delta\phi_2^{(i\to 0)}(y_1, y_2)} = \int \mathcal{D}P_1 P_2^{(i\to 0)}[P_1] e^{-y_2 \Delta\hat{\phi}_1^{(i\to 0)}(y_1)[P_1]}. \tag{7.40}$$

Comme auparavant, les différents déplacements de potentiel s'expriment au moyen de champs de cavité. Le paramètre d'ordre global, en moyenne sur un ensemble de graphes, est du type $\mathcal{P}[P_2[P_1]]$, et satisfait les équations

suivantes :

$$\mathcal{P}[P_2^{(0)}] = \mathbb{E}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{kp(k)}{\langle k\rangle}\int\prod_{j=1}^{k-1}\mathcal{D}P_2^{(j)}\mathcal{P}[P_2^{(j)}]\delta[P_2^{(0)} - \hat{P}_2^{(k-1)}[\{P_2^{(j)}\}]],$$

$$\hat{P}_2^{(k-1)}[\{P_2^{(j)}\}][P_1^{(0)}] = e^{\Delta\phi_2(y_1,y_2)}\prod_{j=1}^{k-1}\mathcal{D}P_1^{(j)}P_2^{(j)}[P_1^{(j)}]\delta[P_1^{(0)} - \hat{P}_1^{(k-1)}[\{P_1^{(j)}\}]]e^{-y_2\Delta\hat{\phi}_1^{(k-1)}[\{P_1^{(j)}\}]},$$

$$\hat{P}_1^{(k-1)}[\{P_1^{(j)}\}](h^{(0)}) = e^{\Delta\phi_1(y_1)}\prod_{j=1}^{k-1}dh^{(j)}P_1^{(j)}(h^{(j)})\delta(h^{(0)} - \hat{h}^{(k-1)}(\{h^{(j)}\}))e^{-y_1\Delta\hat{E}^{(k-1)}(\{h^{(j)}\})} \tag{7.41}$$

où $\mathbb{E}$ indique la moyenne sur les sources de désordre autre que la connectivité.

Des calculs explicites peuvent être réalisés avec ce formalisme dans les cas simples comme la couverture sur graphe régulier où les expressions ci-dessus se résument à une équation du type

$$\rho(\zeta_0) = \frac{1}{Z}\int\prod_{j=1}^{r-1}d\zeta_j\rho(\zeta_j)\delta\left(\zeta_0 - \frac{1-\prod_{j=1}^{r-1}\zeta_j}{1+(e^{y_1}-1)\prod_{j=1}^{r-1}\zeta_j}\right)\left(1+(e^{y_1}-1)\prod_{j=1}^{r-1}\zeta_j\right)^{y_2/y_1} \tag{7.42}$$

qui peut être résolue par dynamique de population. En se limitant à $y_2 = 0$ (ce qui revient formellement à des équations à un pas non factorisées) on trouve ainsi pour les graphes 3-réguliers un fondamental à $\epsilon_2 = 0,54924 \pm 0,00007$ qui est inférieur à la prédiction obtenue au 7.2, $\epsilon_1 = 0,54914$. La très faible différence entre ces deux nombres donnent cependant une idée de la précision des approximations successives ; à titre de comparaison, l'approche liquide donne $\epsilon_0 = (5\sqrt{5}-9)/4 \simeq 0,54508$. Ces différentes valeurs doivent physiquement former des bornes inférieures du résultat exact, ainsi que cela est prouvé pour certains modèles [FL03]. Chaque niveau supplémentaire de grandes déviations permet en effet une meilleur prise en compte du phénomène de frustration ; de ce point de vue l'approximation la plus grossière consiste à négliger complètement la frustration, c'est-à-dire à se placer sur un arbre, ce qui fournit la borne inférieure triviale $\epsilon_{-1} = 1/2$.

Graphes atypiques

Il est enfin possible d'étudier simultanément les grandes déviations internes et externes en introduisant deux températures distinctes, l'une y_{int} qui contrôle les amas et l'autre y_{ext} les graphes atypiques. Les équations ont comme ci-dessus une structure à deux niveaux. Dans la limite $y_{\text{int}} \to \infty$ des

amas d'énergie minimale, le niveau interne devient toutefois trivial et une seule température effective $x = y_{\text{ext}}/y_{\text{int}}$ émerge ; cette réduction est l'analogue de la limite de température nulle $\beta \to \infty$ qui conduit à la température interne effective $y = \beta m$ (mais dans ce cas c'est le niveau externe qui devient trivial). Appliqué au 3-coloriage, cette analyse conduit notamment à un diagramme de phase dans le plan (γ, x) présentant un point tricritique à l'intersection des phases SAT-facile, SAT-difficile et non-SAT [Riv05b].

Notes et références

La méthode à un pas présentée dans ce chapitre est due à Mézard et Parisi [MP01, MP03]. Hormis les calculs probabilistes, le traitement du coloriage reprend [MPWZ02, BMP$^+$03] ; ces résultats sont rappelés en préliminaire d'une part à leur extension aux graphes atypiques présentée dans [Riv05b], et d'autre part à l'étude de la géométrie de l'espace des solutions effectuée dans [MPR05a] et présentée au chapitre 9. Le scénario de transition vitreuse en température à un pas est par exemple exposé dans [MP00], où son contenu physique est explicité ; il se trouve notamment réalisé par les modèles de verre sur réseau étudiés dans [RBMM04].

Chapitre 8

Critères de cohérence

Ce chapitre passe en revue différents critères permettant de valider ou d'invalider les approches liquide et à un pas, puis examine les possibilités de généraliser ces approches dans les cas où elles sont toutes deux invalidées.

8.1 Cohérence locale

Plusieurs incohérences des approches liquide ou à un pas ont déjà été rencontrées. Ainsi l'apparition d'une entropie liquide négative, comme dans le REM et le polymère dirigé, mais aussi dans certains modèles de verre sur réseau [BM02] et dans les matchings multipartie [MMR04, MMR05], indique que la solution liquide doit subir une transition vitreuse. Dans le cas du coloriage, l'insuffisance de l'approche liquide se manifeste par une valeur négative de l'énergie. Un autre signal est donné par la présence de champs non entiers à température nulle qui se trouvent par exemple dans la couverture ou les modèles de verre sur réseau [RBMM04], à la fois au niveau liquide et à un pas. Plus généralement, pour que l'approche liquide (pas zéro) soit correcte, ses résultats doivent être reproduits à l'identique au sein du formalisme à un pas, et, de même, pour le premier pas au sein du formalisme à deux pas. Cette condition implique un critère de stabilité dérivé ci-après.

Plongement du liquide

Pour commencer avec l'approche liquide, se pose le problème de la façon dont ses prédictions peuvent être réobtenues à l'intérieur de la formulation à un pas. Il s'agit d'établir un lien entre le paramètre d'ordre liquide, $\mathcal{P}^{(0)}(h)$, distribution spatiale des champs sur les différents liens orientés, et le paramètre d'ordre à un pas $\mathcal{P}^{(1)}[P(h)]$, distribution spatiale des distributions

$P(h)$ sur les différents amas. De façon compacte, l'équation satisfaite par le paramètre d'ordre liquide, *cf.* (5.7), s'écrit

$$\mathcal{P}^{(0)} = \mathbb{E}_\xi \int \prod_{j=1}^{k(\xi)} dh_j \mathcal{P}^{(0)}(h_j) \delta_{\hat{h}^{(\xi)}(\{h_j\})} \tag{8.1}$$

où $\mathbb{E}_\xi$ inclut la moyenne sur la connectivité, et s'il y a lieu, sur toute autre source de désordre externe (ce chapitre se limite aux graphes simples pour alléger les notations), et $\hat{h}^{(\xi)}$ est la fonction d'itération des champs. Le paramètre d'ordre à un pas vérifie pour sa part, avec des notations similaires, *cf.* (7.12),

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(1)} &= \mathbb{E}_\xi \int \prod_{j=1}^{k(\xi)} \mathcal{D}P_j \mathcal{P}^{(1)}[P_j] \delta_{\hat{P}^{(\xi)}[\{P_j\}]}, \\ \hat{P}^{(\xi)}[\{P_j\}] &= \frac{1}{\hat{Z}^{(\xi)}[\{P_j\}]} \int \prod_{j=1}^{k(\xi)} dh_j P_j(h_j) \delta_{\hat{h}^{(\xi)}(\{h_j\})} e^{-y\Delta \hat{E}^{(\xi)}(\{h_j\})}. \end{aligned} \tag{8.2}$$

Le liquide se retrouve dans ces formules en prenant $y = 0$, ce qui correspond à sélectionner une solution de cavité typique. Un Ansatz qui réalise formellement cette réduction est

$$\mathcal{P}^{(1)}[P] = \delta[P - \mathcal{P}^{(0)}] \qquad \text{(1er type)}. \tag{8.3}$$

Ce plongement, dit du premier type, n'est cependant pas justifié physiquement puisqu'il consiste à identifier des distributions P et $\mathcal{P}^{(0)}$ portant sur des ensembles de nature différente, P étant relatif aux amas alors que $\mathcal{P}^{(0)}$ est relatif aux liens orientés. Suivant cet argument, la distribution $\mathcal{P}^{(0)}$ ne peut être associée qu'à $\mathcal{P}^{(1)}$, et, conformément à l'interprétation du liquide comme amas unique, c'est la distribution sur les amas P qui doit devenir triviale :

$$\mathcal{P}^{(1)}[P] = \int dh \mathcal{P}^{(0)}(h) \delta[P - \delta_h] \quad \text{(2nd type)}. \tag{8.4}$$

Injecté dans (8.2), cet Ansatz reproduit effectivement (8.1) avec les champs h représentés fonctionnellement par les δ_h ; on vérifie également que la valeur du potentiel à un pas ainsi calculée se ramène à l'énergie liquide.

Stabilité du liquide

Une condition nécessaire pour que le premier pas n'admette d'autre solution que celle liquide est que le plongement du second type corresponde

à un point fixe stable pour l'itération exprimée par (8.2). Formellement, il convient d'examiner si une perturbation par laquelle P dévie de δ_h dans (8.4) tend ou non à s'amplifier ; pour chaque h, on considère ainsi la fonctionnelle ϕ_h piquée autour de δ_h mais possédant une largeur finie dont la croissance ou décroissance sous l'itération détermine la stabilité. À partir de l'Ansatz

$$\mathcal{P}^{(1)}[P] = \int dh \mathcal{P}^{(0)}(h)\phi_h[P - \delta_h], \tag{8.5}$$

on définit donc une « largeur », qui se trouve elle-même être une fonction, par

$$\langle \delta P \rangle_h \equiv \int \mathcal{D}P \phi_h[P - \delta_h](P - \delta_h). \tag{8.6}$$

La substitution de (8.4) dans (8.2) avec $y = 0$ conduit alors, au premier ordre en δP, à la relation fonctionnelle

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(0)}(h_0)\langle \delta P \rangle_{h_0} = \mathbb{E}_\xi \int \prod_{i=1}^{k(\xi)} dh_i \mathcal{P}^{(0)}(h_i)\delta\left(h_0 - \hat{h}^{(\xi)}(\{h_i\})\right) \\ \sum_{j=1}^{k(\xi)} \int d\hbar_j \langle \delta P \rangle_{h_j}(\hbar_j)\left[\delta_{\hat{h}^{(\xi)}(\hbar_j, \{h_i\}_{i \neq j})} - \delta_{h_0}\right]. \end{aligned} \tag{8.7}$$

Cette expression, dont une interprétation est proposée plus bas, se simplifie notablement lorsque les champs sont discrets. En effet, lorsque $\mathcal{P}^{(0)} = \sum_a \eta_a \delta_{h_a}$, l'équation de cavité liquide (8.1) se récrit sous la forme de q équations ($a = 0, \ldots, q-1$), du type

$$\eta_a = \mathbb{E}_\xi \sum_{(b_1, \ldots, b_{k(\xi)}) \to a} \eta_{b_1} \ldots \eta_{b_k}, \tag{8.8}$$

où k et la règle symbolisée par $\to$ peuvent dépendre de ξ (voir le 5.1 où une notation analogue est utilisée pour la couverture, avec $a = 0, 1$). L'Ansatz du plongement de second type perturbé (8.5) devient $\mathcal{P}^{(1)}[P] = \sum_a \eta_a \phi_a[P - \delta_{h_a}]$, où les largeurs définies par (8.6) sont caractérisables par des scalaires $\lambda_{a \to d} \equiv \langle \delta P \rangle_{h_a}(h_d)$ avec $a \neq d$. La relation fonctionnelle (8.7) se résume alors à $q(q-1)$ équations scalaires,

$$\eta_a \lambda_{a \to d} = \mathbb{E}_\xi \sum_{(b_1, \ldots, b_k) \to a} \eta_{b_1} \ldots \eta_{b_k} \sum_{j=1}^{k} \sum_{\substack{(b_1, \ldots, b_{j-1}, c, b_{j+1}, \ldots, b_k) \to d \\ c \neq b_j}} \lambda_{b_j \to c}. \tag{8.9}$$

En l'absence de désordre externe, le critère de stabilité du liquide revient au calcul de la plus grande valeur propre de la matrice de taille $[q(q-1)] \times$

$[q(q-1)]$ définie par (8.9) ; en présence de désordre, la propagation de la perturbation est dictée par un produit de matrices aléatoires et le critère porte sur l'exposant de Lyapunov qui leur est associé.

Transition vitreuse pour la couverture

À titre d'exemple, les relations (8.9) permettent d'étudier la stabilité de la solution liquide du problème de couverture. Le calcul part des règles liquides, établies au 5.1,

$$\begin{aligned} 0 + \cdots + 0 &\to 1 \\ \text{autres combinaisons} &\to 0 \end{aligned} \tag{8.10}$$

qui se traduisent en équations par

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \mathbb{E}_k[\eta_0^k], \\ \eta_0 &= \mathbb{E}_k[1-\eta_0^k]. \end{aligned} \tag{8.11}$$

Ici le désordre réside uniquement dans la distribution des connectivités k, $\mathbb{E}_k[\varphi(k)] = \sum_k q(k)\varphi(k)$, avec $q(k) = \pi_\gamma(k)$ si on considère les graphes poissonniens ; en adoptant toujours les notation introduites au chapitre 5, $\eta_0 \equiv 1-\eta$ et $\eta_1 \equiv \eta$, d'où $\eta = e^{-\gamma\eta}$. Pour obtenir les coefficients de la matrice de stabilité, il faut d'après (8.9) envisager toutes les façons dans les « réactions » (8.10), de changer le « produit » en ne changeant qu'un et un seul des « réactifs ». Deux possibilités s'offrent,

$$\begin{aligned} (1|0) + 0 + \cdots + 0 &\to (0|1), \\ (0|1) + 0 + \cdots + 0 &\to (1|0), \end{aligned} \tag{8.12}$$

où $(d|a)$ signifie que a est remplacé par d, et se traduit par un terme $\eta_a\lambda_{a\to d}$ dans les équations ; de la sorte, le système (8.12) s'exprime algébriquement comme

$$\begin{aligned} \eta_1\lambda_{1\to 0} &= \mathbb{E}_k[\eta_0^k\lambda_{0\to 1}], \\ \eta_0\lambda_{0\to 1} &= \mathbb{E}_k[k\eta_0^{k-1}\eta_1\lambda_{1\to 0}]. \end{aligned} \tag{8.13}$$

En utilisant $\eta_1 = 1-\eta_0 = \eta$, ces relations se récrivent

$$\begin{aligned} \eta\lambda_{1\to 0} &= \gamma(1-\eta)e^{-\gamma\eta}\lambda_{0\to 1}, \\ (1-\eta)\lambda_{0\to 1} &= \gamma\eta e^{-\gamma\eta}\lambda_{1\to 0}, \end{aligned} \tag{8.14}$$

d'où compte tenu de la relation $\eta = e^{-\gamma\eta}$ on tire la matrice de stabilité

$$\Lambda_{\text{liq}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma\eta^2/(1-\eta) \\ \gamma(1-\eta) & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.15}$$

Cette matrice possède deux valeurs propres dégénérées égales à $(\gamma\eta)^2$, ce qui conduit au critère de stabilité du liquide pour la couverture sur graphes poissonniens

$$\gamma\eta < 1. \tag{8.16}$$

De cette condition, on déduit qu'il existe une connectivité critique γ_c donnée par $\gamma_c\eta = 1$ telle que pour $\gamma > \gamma_c$, la solution liquide est instable, donc nécessairement fausse, avec dans le cas présent $\gamma_c = e \simeq 2,71$.

La stabilité du liquide pour $\gamma < \gamma_c$ ne garantit toutefois pas *a priori* qu'il décrive correctement le problème dans ce domaine : il est en effet possible qu'ait lieu à une connectivité plus basse une transition de nature discontinue qui ne soit pas signalée par une instabilité locale. Cette éventualité se trouve par exemple réalisée dans plusieurs modèles de verre sur réseau [BM02, RBMM04] ; pour la couverture, une analyse des équations au niveau du premier pas permet toutefois de l'écarter [Zho03]. La validité de l'approche liquide à la couverture pour $\gamma < \gamma_c$ se trouve également confirmée par une analyse du problème en terme de processus d'effeuillage [BG01]. L'algorithme d'effeuillage à considérer ici s'apparente à celui défini pour localiser le 2-cœur à la section 4.3, à la différence qu'on supprime désormais simultanément un nœud de connectivité unité *et* son unique voisin. En effet, pour tout couple de nœuds connectés, un des deux membres doit être découvert et s'il y a un nœud de connectivité unité il est toujours avantageux qu'il soit couvert ; son voisin doit alors être découvert, ce qui n'induit aucune contrainte sur le reste du graphe et permet de l'ignorer pour examiner le problème sur les nœuds restants. Le résultat de cette opération d'effeuillage sur un graphe poissonnien typique de connectivité moyenne γ est par définition un *cœur*, contenant $c(\gamma)N + O(1)$ nœuds, plus un ensemble de $i(\gamma)N$ nœuds isolés. Ce cœur subit lorsque γ croît une transition de percolation, dont l'analyse [BG01] révèle qu'elle a lieu exactement à $\gamma_c = e$. Pour $\gamma < e$, il n'y a pas de cœur extensif, $c(\gamma) = 0$, et l'effeuillage fournit un algorithme de couverture conduisant à $\epsilon = [1 - i(\gamma)]/2$, dont la valeur est conforme à la prédiction liquide. Cette approche explique ainsi la similarité constatée en 5.1 entre l'équation de cavité (5.9) pour la couverture et celle (4.12) pour le 2-cœur en la liant à l'existence commune d'un algorithme d'effeuillage. Pour $\gamma > e$ enfin, il reste un cœur non trivial, $c(\gamma) > 0$, dont la présence attribue une origine géométrique à l'échec de l'approche liquide.

Stabilité du premier pas

Compte tenu de la structure récursive de l'emboîtement des différents pas les uns dans les autres, le problème de la stabilité du premier pas vis-

à-vis du deuxième est formellement très similaire à celui du liquide (« pas zéro ») vis-à-vis du premier. Les différents paramètres d'ordre à considérer sont maintenant

$$\begin{aligned} &\mathcal{P}^{(1)}[P^{(0)}(h)] && \text{(un pas)}, \\ &\mathcal{P}^{(2)}[P^{(2)}[P^{(1)}(h)]] && \text{(deux pas)}. \end{aligned} \tag{8.17}$$

À la différence du cas liquide, il y a deux types de réduction du deuxième pas vers le premier qui sont toutes deux physiquement acceptables, selon que P_1 ou P_2 se ramène à P

$$\begin{aligned} P_i^{(2)}[P^{(1)}] &= \delta[P^{(1)} - P_i^{(0)}] && \text{(1er type)}, \\ P_i^{(2)}[P^{(1)}] &= \int dh P_i^{(0)}(h)\delta[P^{(1)} - \delta_h] && \text{(2nd type)}. \end{aligned} \tag{8.18}$$

Le premier s'interprète comme une agrégation des amas en structures plus grandes, tandis que le second s'interprète comme une fragmentation des amas en structures plus petites [RBMM04]. Le premier type d'instabilité est associé à la stabilité d'un point fixe, ainsi qu'expliqué ci-dessous sur l'exemple de la couverture. Le second type instabilité s'étudie lui selon le même principe que l'instabilité liquide ; l'analogue de l'équation (8.7) est ainsi

$$\begin{aligned} &P_0^{(0)}(h_0)\langle\delta P_0^{(1)}\rangle_{h_0} = \frac{1}{Z_0}\int \prod_i dh_i P_i^{(0)}(h_i)\delta(h_0 - \hat{h}(\{h_i\})) \\ &\sum_j \int d\hbar_j \langle\delta P_j^{(1)}\rangle_{h_j}(\hbar_j)\left[\delta_{\hat{h}(\hbar_j,\{h_i\}_{i\neq j})} e^{-y\Delta\hat{E}(\hbar_j,\{h_i\}_{i\neq j})} - \delta_{h_0} e^{-y\Delta\hat{E}(\{h_i\})}\right], \end{aligned} \tag{8.19}$$

où la normalisation Z_0 est exactement celle apparaissant dans le formalisme à un pas non perturbé,

$$Z_0 = \int \prod_i dh_i P_i^{(0)}(h_i) e^{-y\Delta\hat{E}(\{h_i\})}. \tag{8.20}$$

Ici encore, la présence de champs discrets permet de se ramener à un ensemble fini d'équations, du type

$$\eta_a \lambda_{a\to e} = \frac{1}{Z}\sum_{(b_1\ldots b_k)\to a} \eta_{b_1}\ldots\eta_{b_k} \sum_{j=1}^{k} \sum_{\substack{(b_1,\ldots,b_k)\to c \\ c\neq b_j}} e^{-y\Delta E_{c,b_2,\ldots,b_k}} \lambda_{b_j\to c}. \tag{8.21}$$

Ces équations sont écrites ci-dessus pour une situation factorisée, mais le cas plus général admet une formulation similaire où les η se voient attribués une distribution spatiale sur laquelle il convient de moyenner.

Nature des phases vitreuses

Le problème de la couverture sur graphe régulier est un cas particulièrement simple où la factorisation s'applique. Avec les notations utilisées en 7.2, la solution à un pas est décrite par $\mathcal{P}^{(1)}[P^{(0)}] = \delta[P^{(0)} - P^*]$ où $P^* = \zeta^*\delta_0 + (1-\zeta^*)\delta_1$ et ζ^* est le point fixe de $\hat{\zeta}^{(r-1)}(\zeta, \ldots, \zeta)$ donné d'après (7.14) par

$$\hat{\zeta}^{(r-1)}(\zeta_1, \ldots, \zeta_{r-1}) = \frac{1 - \prod_j \zeta_j}{1 + (e^y - 1)\prod_j \zeta_j}. \tag{8.22}$$

La solution à deux pas est elle décrite par la distribution $\rho(\zeta)$ qui satisfait la relation (7.42). Dans ce cadre, l'instabilité du premier type concerne la propension de l'Ansatz $\rho(\zeta) = \delta(\zeta - \zeta^*)$ à s'élargir sous l'itération (7.42). Celle-ci se caractérise au moyen du second moment de ρ puisque le premier moment correspond à un déplacement global du pic associé physiquement à une instabilité de type ferromagnétique que la frustration induite par les boucles exclut sur graphe aléatoire. Ainsi le critère de stabilité du premier type s'exprime comme

$$\sqrt{r-1}|\partial_1 \hat{\zeta}^{(r-1)}(\zeta^*, \ldots, \zeta^*)| < 1. \tag{8.23}$$

Pour le critère du second type, l'analyse suit celle de l'instabilité du liquide, comme détaillé dans l'appendice C de [RBMM04] ; il vient ainsi

$$(r-1)^2 \left(\frac{1-\zeta^*}{\zeta^*}\right)^2 e^{-y} < 1. \tag{8.24}$$

La vérification de ces critères peut dépendre de la valeur de y. On trouve génériquement qu'existent des valeurs critiques $y_s^{(1)}$ et $y_s^{(2)}$ telles que le critère du premier type est satisfait pour $y < y_s^{(1)}$ et celui du second type pour $y > y_s^{(2)}$. La question est alors de savoir s'il existe un intervalle d'énergie où l'approche à un pas est stable, c'est-à-dire si $y_s^{(2)} < y_s^{(1)}$, puis si l'énergie optimale appartient à cet intervalle (ce qui permet de valider son calcul). La situation pour la couverture sur graphes r-réguliers avec $r = 3$ et $r = 4$ est résumée sur la figure 8.1. Conformément aux résultats à deux pas évoqués en 7.4, il ressort que l'approche à un pas n'est pas correcte pour la couverture sur graphe régulier. La même conclusion s'applique aux graphes poissonniens de connectivité moyenne $\gamma > \gamma_c = e$. Une conjecture est qu'il est nécessaire pour ces graphes d'envisager les grandes déviations sur un nombre infini de pas ; cependant ce scénario n'étant pas accessible aux calculs explicites, aucune valeur numérique fondée sur cette hypothèse ne peut être proposée. De façon intéressante, les verres sur réseau [BM02] offrent des modèles dont la définition s'apparente à celle de la couverture, mais pour lesquels les analyses de stabilité suggèrent que l'approche à un pas est exacte [RBMM04].

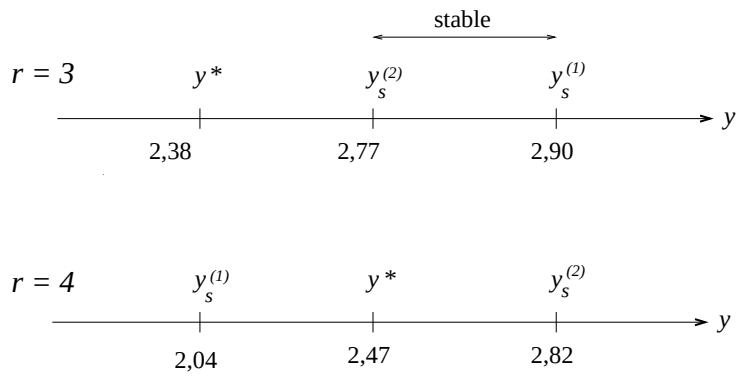

FIG. 8.1 – *Stabilité de l'approche à un pas pour la couverture sur graphes r-réguliers.* Pour $r = 3$, il existe une fenêtre dans laquelle le premier pas est stable (ce qui n'assure toutefois pas qu'il soit correct), tandis que pour $r = 4$ (et pour $r \geq 5$ de même) l'analyse de stabilité exclut qu'il s'applique, quelque soit la valeur de y.

8.2 Stabilités

L'analyse formelle présentée ci-dessus admet une interprétation physique : les instabilités formelles d'un pas vers l'autre correspondent en effet aussi à des instabilités physiques qui se manifestent lorsque le système est soumis à une perturbation extérieure. Cette approche physique possède aussi l'intérêt de suggérer une méthode pratique pour localiser les instabilités dans les cas où les champs ne sont pas discrets.

Susceptibilités

En vertu de la relation fluctuation-dissipation, l'analyse de la réponse d'un système peut s'effectuer par le biais de l'étude de ses corrélations. On considère dans un premier temps le cas des champs scalaires, associés à des systèmes pour lesquels les variables dynamiques prennent deux valeurs, $\sigma_i = \pm 1$. Une mesure des corrélations est fournie par la *susceptibilité* d'ordre p qui est définie par

$$\chi_p = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_c^p, \tag{8.25}$$

où $\langle n_i n_j \rangle_c$ désigne la fonction de corrélation connexe, avec $\langle \cdot \rangle$ représentant une moyenne thermique. Le cas linéaire $p = 1$ définit la susceptibilité « ferromagnétique », qui décrit l'émergence de corrélations toutes de même signe. Elle est ignorée ici car cela correspond sur un arbre à l'apparition d'un ordre cristallin où tous les spins sont orientés dans une direction commune, qui est

une phase non frustrée donc absente sur graphe aléatoire. Le cas non-linéaire $p = 2$ correspond par contre à une susceptibilité « verre de spin » et décrit des corrélations adoptant des signes différents ; sa divergence signale l'entrée continue dans une phase vitreuse avec des variables (partiellement) gelées dans des directions différentes.

La stabilité du liquide vis-à-vis de l'établissement d'une phase vitreuse s'exprime ainsi physiquement par la finitude de la susceptibilité non-linéaire. Or

$$\chi_2 = \sum_{r=0}^{\infty} n(r)\overline{\langle\sigma_0\sigma_r\rangle_c^2}, \tag{8.26}$$

où $n(r)$ compte le nombre de nœuds à distance r d'un nœud 0 arbitraire, et la barre supérieure désigne une moyenne spatiale sur le désordre. Asymptotiquement, $n(r) \sim \langle k\rangle^r$ où $\langle k\rangle$ est la connectivité moyenne du graphe ; ainsi, la série diverge selon le signe de

$$\lambda_r = \ln\langle k\rangle + \ln\left(\overline{\langle\sigma_0\sigma_r\rangle_c^2}\right)/r \tag{8.27}$$

pour $r \to \infty$.

Équivalences

L'instabilité physique qui se manifeste par l'intermédiaire de la divergence de la susceptibilité non-linéaire est en fait équivalente à l'instabilité formelle du liquide à l'intérieur du formalisme à un pas. En effet, comme détaillé dans [RBMM04], le calcul de la fonction de corrélation à deux points $\langle\sigma_0\sigma_r\rangle_c$ fait intervenir la matrice de transfert

$$T(h_0, h_1) = \int \prod_{i\geq 2} dh_i \mathcal{P}_i^{(0)}(h_i)\delta(h_0 - \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2}))\left(\partial_1\hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2})\right)^2. \tag{8.28}$$

Or cette matrice apparaît également dans le traitement de l'instabilité formelle du liquide : soit en effet $Q(h_i)$ la mesure la déviation entre h_i and $\hbar_i$ dans l'équation (8.7), définie par

$$Q(h_i) \equiv \int d\hbar_i \mathcal{P}^{(0)}(h_i)\langle\delta P\rangle_{h_i}(\hbar_i)(\hbar_i - h_i)^2. \tag{8.29}$$

En insérant cette expression pour Q dans l'équation (8.19), et en ne retenant que le premier ordre en $(\hbar_j - h_j)$, on obtient alors

$$Q(h_0) = \sum_i \int dh_i T(h_0, h_i)Q(h_i) \tag{8.30}$$

où $T(h_0, h_i)$ correspondant exactement à la matrice de transfert définie en (8.28).

Champs non scalaires

La généralisation aux champs non scalaires de cette équivalence est conceptuellement identique mais exige techniquement de recourir à des produits tensoriels. En effet, pour introduire une matrice de transfert dans l'exponentiation d'un produit de jacobiens tel qu'il apparaît dans l'équation (75) de [RBMM04], une relation utile est

$$({}^tXAY)^p = {}^tX^{\otimes p} A^{[p]} Y^{\otimes p} \tag{8.31}$$

où $A^{[p]}$ désigne la matrice A p-fois tensorialisée, avec par exemple $A^{[2]}(X \otimes Y) = (AX) \otimes (AY)$. En notant que $(\prod_i M_i)^{[p]} = \prod_i (M_i^{[p]})$, on peut ainsi écrire la matrice de transfert qui intervient dans le calcul de la susceptibilité non-linéaire comme

$$T(h_0, h_1) = \int \prod_{i \geq 2} dh_i \mathcal{P}^{(0)}(h_i) \delta(h_0 - \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2})) \left(\partial_1 \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2})\right)^{[2]}. \tag{8.32}$$

Du point de vue de la stabilité formelle du liquide vis-à-vis du premier pas, décrite par (8.19), les $Q(h_i)$ sont maintenant définis comme

$$Q^{(a,b)}(h_i) \equiv \int d\hbar_i \mathcal{P}^{(0)}(h_i) \langle \delta P \rangle_{h_i}(\hbar_i)(\hbar_i^{(a)} - h_i^{(a)})(\hbar_i^{(b)} - h_i^{(b)}), \tag{8.33}$$

où les deux indices a et b correspondent aux composantes des champs de cavité ($a, b = 0, \ldots, q-1$), et où $d\hbar_i = \prod_a d\hbar_i^{(a)}$, comme implicitement supposé dans toutes les formules écrites précédemment. L'équivalence des approches physique et formelle s'étend donc au cas des champs vectoriels avec

$$Q^{(a,b)}(h_0) = \sum_i \int dh_i \sum_{c,d} T^{(a,b),(c,d)}(h_0, h_i) Q^{(c,d)}(h_i). \tag{8.34}$$

Comme discuté dans [RBMM04], le cas des champs discrets nécessite une attention particulière car la relation fluctuation-dissipation, reliant les susceptibilités aux fonctions de réponse n'est plus applicable en raison de la présence de variables gelées. En conséquence, l'analogue de Q ne peut être introduit et il n'est plus possible de contracter les deux indices continus de la matrice de transfert en un seul. Physiquement, l'effet d'une perturbation dans un tel cas ne peut être que de provoquer une transition d'un

état $a \in \{0, \ldots, q-1\}$ à un autre $b \neq a$, et non pas d'induire un changement infinitésimal $h_a \to h_b = h_a + \delta h$ comme cela est possible avec des champs continus. La correspondance entre les approches formelle et physique reste cependant valable, mais la stabilité sous perturbation doit s'étudier directement en terme des fonctions de réponse du système, sans passer par l'intermédiaire des fonctions corrélations qui sont triviales dans une phase gelée.

Extension à un pas

La dérivation précédente concernant l'instabilité du liquide vis-à-vis du premier pas, s'applique *mutatis mutandis* à l'instabilité du second type du premier pas vers le deuxième. Les détails sont présentés dans [RBMM04], dont il convient seulement ici de corriger l'équation (78) dont la forme correcte est

$$\begin{aligned} T_n(h_0, h_1) &= \int \prod_{i\geq 2} dh_i P_i^{(0)}(h_i)\delta(h_0 - \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2})) \\ &\qquad \left(\partial_1 \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2})\right)^2 e^{-y\Delta\hat{E}(h_1,\{h_i\}_{i\geq 2})}, \qquad (8.35) \\ T_d(h_0, h_1) &= \int \prod_{i\geq 2} dh_i P_i^{(0)}(h_i)\delta(h_0 - \hat{h}(h_1, \{h_i\}_{i\geq 2}))e^{-y\Delta\hat{E}(h_1,\{h_i\}_{i\geq 2})}. \end{aligned}$$

La formulation des instabilités en terme de matrices de transfert a l'intérêt de se prêter aux calculs numériques dans les cas non factorisés où il n'est plus possible comme pour la couverture ci-dessus de procéder analytiquement. Ceci est par exemple utile pour tester la stabilité du liquide dans les matchings multipartie [MMR05]. Il est aussi possible d'étudier la stabilité du premier pas lorsque les champs sont piqués mais leur distribution non factorisée ; le résultat d'une telle étude pour le 3-coloriage [KPW04] est présenté sur la figure 8.2. Il en ressort que l'approche à un pas est cohérente pour un intervalle $[\gamma_s^{(2)}, \gamma_s^{(1)}]$ qui inclut le seuil γ_c ; ce schéma est qualitativement reproduit pour les autres valeurs de q [KPW04] et pour les problèmes K-SAT [MMZ03, MPRT04], ce qui suggère qu'il soit générique aux problèmes de satisfaction de contraintes. Pour les graphes appartenant à la fenêtre de stabilité, le fondamental ϵ^* décrit par y^* (avec $\epsilon^* = 0$ et $y^* = \infty$ pour $\gamma < \gamma_c$) est par définition stable mais une étude aux autres valeurs de y [KPW04] révèle qu'une instabilité se développe au delà d'une certaine énergie $\epsilon_G > \epsilon^*$ ($y_G < y^*$) dite *énergie de Gardner*. Ce trait semble également générique et se retrouve dans tous les modèles dont le fondamental est décrit par une approche à un pas [MRT03, RBMM04] ; ainsi que discuté plus bas, l'éner-

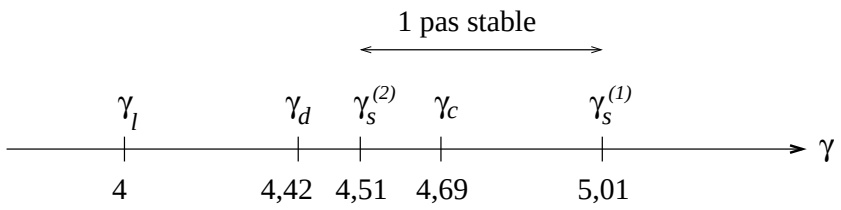

FIG. 8.2 – *Diagramme de phase du 3-coloriage sur graphes poissonniens.* L'approche à un pas est trouvée cohérente pour $\gamma \in [\gamma_s^{(2)}, \gamma_s^{(1)}]$ où $\gamma_s^{(1)}$ et $\gamma_s^{(2)}$ représentent les points d'instabilité du premier et second type dont les valeurs indiquées sont tirées de [KPW04]. Le diagramme inclut aussi $\gamma_l = 4$ qui marque l'instabilité des champs liquides évanescents dont il sera question au 9.3 : $\gamma_l < \gamma_d$ signifie qu'une structure en amas sans variable gelée (sans couleur imposée) doit également être présente (au moins) lorsque $\gamma \in [\gamma_l, \gamma_d]$.

gie de Gardner correspond en effet au seuil, qui doit exister, au delà duquel l'hypothèse (7.2) ne s'applique plus.

8.3 Critères globaux

La stabilité locale d'un pas vis-à-vis du suivant est un critère nécessaire mais non suffisant de validité. Les modèles de verre sur réseau et les matchings multipartie fournissent ainsi des exemples où le liquide reste stable au delà du point où il subit une crise entropique : une transition vitreuse doit alors se produire à température plus basse et être de nature discontinue puisque non détectable par analyse locale. Un critère global permettant de traiter ces situations consiste à se placer dans le formalisme à un pas et à y étudier la présence d'une solution non liquide. Les analyses mathématiques, qui en général ignorent cette possibilité, suggèrent toutefois d'autres critères globaux dont on explore ici le caractère nécessaire ou suffisant.

Endogénie

L'*endogénie*, introduite par Aldous et Bandyopadhyay [AB05], est un exemple de condition globale que doit nécessairement satisfaire une solution liquide pour être valable. Soit d'abord $\hat{I}[P;\xi]$ la fonctionnelle dont le paramètre d'ordre liquide $\mathcal{P}$ est le point fixe,

$$\hat{I}[P;\xi] = \mathbb{E}_\xi \left[\int \prod_{i=1}^{k(\xi)} dh_i P(h_i) \delta_{\hat{h}^{(\xi)}(\{h_i\})} \right] \tag{8.36}$$

où ξ désigne comme pour (8.1) une variable aléatoire incluant les différentes sources de désordre, dont la connectivité $k(\xi)$. L'idée consiste à étudier deux répliques couplées par l'intermédiaire d'un environnement commun, en définissant une fonctionnelle $\hat{I}^{(2)}$ agissant sur les distributions de l'espace produit des champs de cavité, du type $P(h_1, h_2)$,

$$\hat{I}^{(2)}[P;\xi] = \mathbb{E}_\xi \left[\int \prod_{i_1=1}^{k(\xi)} dh_{i_1} \int \prod_{i_2=1}^{k(\xi)} dh_{i_2} P(h_{i_1}, h_{i_2}) \delta_{(\hat{h}_\xi(\{h_{i_1}\}), \hat{h}_\xi(\{h_{i_2}\}))} \right]. \quad (8.37)$$

Si $\mathcal{P}$ est un point fixe de $\hat{I}$, alors nécessairement la distribution diagonale $\mathcal{P}^{\nearrow}$ définie par $\mathcal{P}^{\nearrow}(h_1, h_2) \equiv \mathcal{P}(h_1)\delta(h_1 - h_2)$ est un point fixe de $\hat{I}^{(2)}$. La propriété d'endogénie [AB05] est satisfaite si une itération de $\hat{I}^{(2)}$ à partir de $\mathcal{P} \otimes \mathcal{P}$ défini par $\mathcal{P} \otimes \mathcal{P}(h_1, h_2) = \mathcal{P}(h_1)\mathcal{P}(h_2)$ converge vers $\mathcal{P}^{\nearrow}$, soit,

$$\hat{I}^{(2)^n}[\mathcal{P} \otimes \mathcal{P};\xi] \to \mathcal{P}^{\nearrow} \quad (n \to \infty). \quad (8.38)$$

Formulé ainsi, ce critère présente l'intérêt d'être vérifiable numériquement, en utilisant une méthode de dynamique de population.

Avant de discuter du caractère nécessaire de l'endogénie, il convient au préalable de noter qu'il généralise le critère de stabilité locale, qui est réobtenu en étudiant la stabilité locale du point fixe $\mathcal{P}^{\nearrow}$ sous l'itération de $\hat{I}^{(2)}$. Au voisinage de ce point fixe, $P(h_1, h_2)$ prend la forme

$$P(h_1, h_2) = \mathcal{P}(h_1)[\delta(h_1 - h_2) + \varepsilon(h_1, h_2)], \quad (8.39)$$

où la fonction $\varepsilon(h_1, h_2)$ peut être supposée symétrique puisque l'espace des fonctions symétriques est laissé invariant par $\hat{I}^{(2)}$, et que la condition initiale $\mathcal{P} \otimes \mathcal{P}$ est elle-même symétrique. En linéarisant alors la récursion au premier ordre en ε on obtient

$$\varepsilon(h_0, \hbar_0) = \int \prod_i dh_i \mathcal{P}(h_i)\delta(h_0 - \hat{h}_\xi(\{h_i\})) \sum_j \int d\hbar_j \varepsilon(h_j, \hbar_j)\delta(\hbar_0 - \hat{h}_\xi(\hbar_j, \{h_i\}_{i \neq j})). \quad (8.40)$$

La mesure de l'écart au point fixe se définit par $Q(h_i) = \int d\hbar_i \varepsilon(h_i, \hbar_i)(h_i - \hbar_i)^2$, où le second moment est retenu car le premier est nul par symétrie ; on vérifie alors que Q satisfait l'équation (8.30), ce qui établit l'équivalence entre la stabilité de ce point fixe et celle du liquide dans le formalisme à un pas.

La dérivation précédente, fondée sur une perturbation autour de $\mathcal{P}^{\nearrow}$, fait l'hypothèse tacite que $\mathcal{P} \otimes \mathcal{P} \neq \mathcal{P}^{\nearrow}$. Cette condition est pourtant violée lorsque l'itération $\hat{I}$ ne fait intervenir aucun désordre local, comme par exemple avec la couverture ou le coloriage sur graphe régulier, pour lesquels $\mathcal{P} = \delta_{h_{\mathrm{liq}}}$ et $\mathcal{P} \otimes \mathcal{P} = \mathcal{P}^{\nearrow}$. Dans cette situation, la propriété d'endogénie est trivialement satisfaite, sans que rien ne puisse être dit sur la stabilité. La couverture et le coloriage sur graphes réguliers étant aussi des exemples pour lesquels $\mathcal{P} = \delta_{h_{\mathrm{liq}}}$ ne fournit pas la solution correcte, cette observation implique que l'endogénie, si elle est nécessaire, n'est pas un critère suffisant de validité. De plus, même en excluant les $\mathcal{P}$ piqués sur une seule valeur, on peut encore exhiber un exemple de solution endogène non valable : ainsi toujours pour la couverture sur graphe régulier, la distribution de la forme $\mathcal{P} = \eta\delta_0 + (1-\eta)\delta_1$, qui formellement décrit une solution à un pas avec $y = 0$, est endogène bien qu'elle soit erronée. L'insuffisance du critère d'endogénie dans ces cas se comprend aisément : l'absence de désordre local prive les deux répliques d'une interaction attractive.

Unicité asymptotique essentielle

Une autre approche, également due à Aldous [Ald01], est fondée sur une formalisation de l'idée selon laquelle un problème d'optimisation est liquide si « les solutions presque optimales sont presque la solution optimale », c'est-à-dire si les configurations d'énergie voisine sont elles-mêmes voisines dans l'espace des phases. L'hypothèse est d'abord faite que le problème admet une solution optimale unique, notée σ^*, dont la proximité vis-à-vis d'une autre configuration est mesurée par la distance

$$d_N(\sigma, \sigma^*) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta_{\sigma_i, \sigma_i^*}. \tag{8.41}$$

À partir de la différence de coût pour une instance donnée I (dont dépend aussi σ^*),

$$\Delta E_I(\sigma) = E_I[\sigma] - E_I[\sigma^*]. \tag{8.42}$$

est introduite la fonction

$$\varepsilon(d) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \mathbb{E}_I \left[\min_{\sigma : d(\sigma,\sigma^*)=d} \Delta E_I(\sigma) \right] \tag{8.43}$$

où l'espérance $\mathbb{E}_I$ porte sur les différentes instances I de taille N ; physiquement, la limite doit exister, mais on peut aussi s'affranchir de cette hypothèse en remplaçant « lim » par « lim inf ». La *propriété d'unicité asymptotique*

[Ald01] est alors satisfaite si $\varepsilon(d) \to 0$ pour $d \to 0$, dont l'étude peut encore se faire par la méthode de cavité [AP03, PPR03].

La propriété d'unicité essentielle est cependant seulement un critère suffisant de validité du liquide. En effet, elle suppose qu'il existe une solution unique, ce qui n'est certainement pas le cas par exemple dans la phase liquide du coloriage. De plus, la fonction $\varepsilon(d)$ est définie par rapport aux pires solutions presque optimales, qui peuvent être statistiquement non pertinentes. La définition pourrait cependant être adaptée pour prendre en compte ces remarques. Plus subtilement, comme tout critère fondé sur des quantités intensives, il ne permet pas de discerner certains effets subextensifs pourtant cruciaux. Par exemple, des études numériques [Méz90] suggèrent que le polymère dirigé en deux dimensions viole la propriété d'unicité asymptotique, bien qu'il soit décrit par une solution liquide, ceci en raison d'une différence subextensive entre les énergies des « amas » (appelés dans ce cas *vallées*, le terme d'*amas* étant réservé aux vallées séparées par des barrières d'énergie extensives) ; l'énergie typique entre deux vallées se comporte en effet comme $\Delta E_N \sim N^\theta$ avec $\theta < 1$ ($\theta = 1/3$ pour le polymère dirigé en deux dimensions [Méz90]) tandis que leur distance typique vérifie $d_N \sim d_0 > 0$. Il est également possible que le système soit liquide et des vallées soient présentes mais que la propriété d'unicité asymptotique ne soit pas violée, comme dans les matchings euclidiens pour lesquels des études numériques [HM98] indiquent $\Delta E_N \sim N^{1/2}$ et $d_N \sim N^{-1/2}$.

Ces subtilités semblent toutefois confinées aux modèles en dimension finie ; pour les modèles sur graphe aléatoire, la présence d'une phase vitreuse à un pas se relie plus simplement à la géométrie de l'espace des phases, ainsi que discuté en 9.4.

Conditions au bord des arbres

D'après la discussion menée en 5.1, un critère suffisant pour que l'approche liquide soit valable est que sur l'arbre les champs soient indépendants des conditions au bord, ce qui implique en particulier que l'itération de cavité liquide (8.1) portant sur $\mathcal{P}^{(0)}(h)$ soit elle-même stable. Or, selon la terminologie développée dans ce chapitre, ce critère relève du premier type, tel qu'exprimé par (8.3), dont il a été argumenté qu'il était non physique. Néanmoins, l'étude naïve de la stabilité du point fixe $\eta = e^{-\gamma\eta}$ pour la couverture sur graphes poissonniens reproduit exactement les prédictions de l'analyse physique par le deuxième type (8.4), à savoir $\gamma_c = e$. L'analyse qui suit entend élucider les conditions sous lesquelles une telle « coincidence » peut

se produire ; il ne s'agit en effet certainement pas d'une nécessité comme le confirme par exemple l'examen des modèles de verres sur réseau, où la propriété d'indépendance vis-à-vis du bord, exprimée par le premier type, se révèle un critère strictement plus fort que le critère de stabilité physique relevant du second type.

Cette coïncidence est l'apanage des systèmes pour lesquels $\mathcal{P}^{(0)}$ est piqué sur seulement deux valeurs, bien que cette restriction soit elle-même non suffisante. De façon générale pour les systèmes à variables binaires, la solution liquide est caractérisée par un point fixe du type $\eta = f(\eta)$ et le point fixe est stable au sens fort (du premier type) si $|f'(\eta)| < 1$. Comme seuls deux états 0 et 1 sont présents, les réactions du type (8.10) peuvent être décrites par une fonction $\phi : \{0, \ldots, k\} \to \{0, 1\}$ dont l'argument est le nombre de parents (réactifs) de type 1, et le résultat est l'état, 0 ou 1, de l'enfant produit (on suppose donc qu'un seul état est accessible à l'enfant, ce qui correspond à une contrainte dure selon la terminologie du chapitre suivant). Avec ces notations, la fonction $f(\eta)$ se définit par

$$f(\eta) = \sum_{n\ :\ \phi(n)=1} \binom{k}{n} \eta^n (1-\eta)^{k-n}. \tag{8.44}$$

Pour déterminer la matrice de stabilité physique (donc du second type), seules importent les différences $\phi(n) - \phi(n-1)$. On trouve ainsi que les équations (8.9) s'écrivent

$$\begin{aligned} \eta\lambda_{1\to 0} &= A\eta\lambda_{1\to 0} + B(1-\eta)\lambda_{0\to 1}, \\ (1-\eta)\lambda_{0\to 1} &= A(1-\eta)\lambda_{0\to 1} + B\eta\lambda_{1\to 0}, \end{aligned} \tag{8.45}$$

avec pour les coefficients A et B les expressions

$$\begin{aligned} A &= \sum_{n\ :\ \phi(n)=1, \phi(n-1)=0} \binom{k}{n} n\eta^{n-1}(1-\eta)^{k-n}, \\ B &= \sum_{n\ :\ \phi(n)=1, \phi(n+1)=0} \binom{k}{n} (k-n)\eta^{n}(1-\eta)^{k-n-1}. \end{aligned} \tag{8.46}$$

La matrice de stabilité a donc pour valeurs propres $A \pm B$, et le critère de stabilité physique du liquide est $A + B < 1$. Ce critère se compare aisément à la condition $|f'(\eta)| < 1$ en remarquant

$$f'(\eta) = \sum_{n\ :\ \phi(n)=1} \binom{k}{n} n\eta^{n-1}(1-\eta)^{k-n} + \sum_{n\ :\ \phi(n)=1} \binom{k}{n} (k-n)\eta^{n}(1-\eta)^{k-n-1}. \tag{8.47}$$

Il vient donc de façon générale $A + B \leq f'(\eta)$, c'est-à-dire que la stabilité au sens fort $|f'(\eta)| < 1$ est une condition suffisante à la stabilité physique $A + B < 1$. De plus, l'égalité ne se produit que si et seulement si $\phi(n) = 1$ implique $\phi(n \pm 1) = 0$, comme il se trouve être le cas pour la couverture.

8.4 Au delà du premier pas

L'échec systématique de l'approche du premier pas au delà de l'énergie de Gardner est imputable à l'hypothèse formulée par (7.2) qui relie sans en modifier le nombre les niveaux d'énergie des systèmes de taille N et $N + 1$. Pallier à ce niveau la défaillance du premier pas requiert donc de s'affranchir de cette hypothèse : quelques possibilités en ce sens sont explorées ici.

Stabilité sous addition d'un nœud

Une première remarque intéressante est qu'il est possible, en toute généralité, de mettre en relation de façon exacte les énergies de systèmes de taille N et $N + 1$. L'idée sous-jacente en ait très simple : l'effet d'un $(N + 1)$-ème nœud sur le système de N nœuds est équivalent à l'application d'un champ extérieur dont la valeur est choisie de façon adéquate. Très généralement, sur un graphe simple les équations de cavité peuvent être écrites sous la forme

$$E^{(a)}(h) = B^{(a)} \tag{8.48}$$

où a désigne dans le présent contexte un lien orienté, $a = (i \to j)$, et h l'ensemble des champs de cavité, $h \equiv \{h^{(a)}\}_a$. Un exemple concret est par exemple le verre de spin sous champ magnétique, qui correspond en terme de problème de satisfaction de contraintes à prendre $\mathcal{E}_{ij}[\sigma_i, \sigma_j] = J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ et $\mathcal{B}_i[\sigma_i] = H_i$ dans (4.8), auquel cas

$$h^{(i\to 0)} = \sum_{j\in i-0} \hat{u}(h^{(j\to i)}) + H^{(i)} \tag{8.49}$$

et

$$E^{(i\to 0)}(h) = h^{(i\to 0)} - \sum_{j\in i-0} \hat{u}(h^{(j\to i)}), \quad B^{(i\to 0)} = H^{(i)}. \tag{8.50}$$

Pour les graphes dilués, la dépendance en h de $E^{(a)}(h)$ n'est en fait que locale mais à ce stade cette hypothèse n'est pas nécessaire.

Soit à supprimer un nœud arbitraire, noté 0, du graphe à $(N+1)$ nœuds. Les valeurs des champs de cavité sont inchangées pourvu que l'effet du nœud

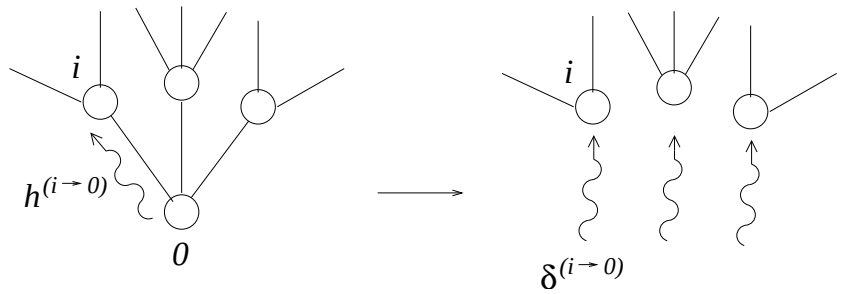

FIG. 8.3 – *Substitution d'un nœud par des champs extérieurs.* Les champs de cavité dans les deux systèmes sont strictement identiques pourvu que la suppression du nœud 0 soit compensée par l'introduction de champs « externes » $\delta^{(0\to i)}$ dont la valeur corresponde aux champs de cavité $h^{(0\to i)}$ du système incluant 0.

supprimé soit simulé par un champ supplémentaire δ (voir la figure 8.3). Explicitement, il convient de remplacer dans les équations le terme $\hat{u}(h^{(0\to i)})$, qui satisfait $h^{(0\to i)} = \sum_{j\in 0-i} \hat{u}(h^{(j\to 0)}) + H^{(0)}$, par $\delta^{(0\to i)}$, défini par

$$\delta^{(0\to i)} = \hat{u}\left(\sum_{j\in 0-i} \hat{u}(h^{(j\to 0)}) + H^{(0)}\right). \tag{8.51}$$

Quant aux variables $h^{(i\to 0)}$, elles n'apparaissent que dans les équations du type $E^{(0\to j)}(h) = B^{(0\to j)}$ qui se trouvent à présent supprimées. Ainsi, l'ensemble des équations $E^{(a)}(h) = B^{(a)}$ est-il remplacé par un ensemble réduit mais strictement équivalent du type $E^{(a)}(h) = B^{(a)} + \delta^{(a)}(h)$, où l'ensemble des a n'inclut plus les liens contenant 0.

Il est possible de déduire à partir de là une relation générale concernant la complexité totale Σ [CGP05], définie à partir du nombre $\mathcal{N}_N(B)$ de solutions de (8.48) par $\mathcal{N}_N(0) = \exp(N\Sigma)$. Très généralement, le nombre de solutions, indicées par α, peut s'écrire

$$\begin{aligned}\mathcal{N}_N(B) &= \sum_\alpha \int \prod_a dh^{(a)} \delta(h^{(a)} - h_\alpha^{(a)}) \\ &= \int \prod_a dh^{(a)} \delta(E^{(a)}(h) - B^{(a)}) |\det \partial_b E^{(a)}(h)|\end{aligned} \tag{8.52}$$

où $\det \partial_b E^{(a)}(h)$ désigne le déterminant de la matrice dont les éléments sont $\partial_b E^{(a)}(h) \equiv \partial E^{(a)}(h)/\partial h^{(b)}$ (cette matrice est en fait diluée lorsque le graphe l'est lui-même). Le nombre de solutions du problème à $(N+1)$-nœuds est *via* la construction ci-dessus relié à celui à N nœuds mais avec un champ extérieur

approprié. En général, une relation ne peut être écrite directement au niveau de $\mathcal{N}_N(B)$ car le champ ajouté δ n'est pas indépendant des champs (internes) de cavité, puisqu'il est déterminé de façon autocohérente selon $\delta = \delta(h)$. Une relation peut par contre s'écrire pour la densité de solutions $\rho_N(h|B)$ définie par

$$\mathcal{N}_N(B) \equiv \int dh \rho_N(h|B). \tag{8.53}$$

D'après (8.52), il vient

$$\rho_N(h|B) = \prod_a \delta(E^{(a)}(h) - B^{(a)})|\det \partial_b E^{(a)}(h)|. \tag{8.54}$$

D'autre part, l'équivalence entre la suppression du nœud 0 et l'addition du champ δ revient formellement à remplacer $E^{(a)}$ par $E^{(a)} - \delta^{(a)}$, de sorte que

$$\mathcal{N}_{N+1}(B) = \int \prod_a dh^{(a)} \delta(E^{(a)}(h) - B^{(a)} - \delta^{(a)})|\det \partial_b (E^{(a)} - \delta^{(a)})(h)|, \tag{8.55}$$

soit

$$\rho_{N+1}(h|B) = \left(\prod_a \delta(E^{(a)}(h) - B^{(a)} - \delta^{(a)})\right) |\det \partial_b (E^{(a)} - \delta^{(a)})(h)|. \tag{8.56}$$

où les indices a décrivent les liens orientés du graphe à N nœuds. La comparaison avec $\rho_N(h|B + \delta)$ tel que donné par (8.53) conduit alors à

$$\rho_{N+1}(h|B) = \frac{|\det \partial_b (E^{(a)} - \delta^{(a)}(h)|}{|\det \partial_b E^{(a)}(h)|} \rho_N(h|B + \delta(h)). \tag{8.57}$$

Un terme de repondération apparaît ainsi naturellement, qui comme dans l'approche à un pas où il provient de la fixation de l'énergie, s'explique par la sélection du champ extérieur ; physiquement ce facteur exprime la possibilité que de nouvelles solutions soient créées ou annihilées. Comme ce calcul concerne le nombre de solutions total ($y = 0$ avec les notations des chapitres précédents), le terme de repondération habituel pourrait aussi être ajouté pour fixer une énergie atypique.

La mise en relation de l'addition d'un nœud avec l'application d'un champ externe permet d'expliquer pourquoi l'instabilité du second type est l'exact signal de l'inapplicabilité de la relation (7.2). En effet, l'ajout d'un site revient à l'application d'un champ externe qui lorsque le système est stable ne modifie que localement les solutions de cavité, dont le nombre reste alors conservé :

le terme de repondération dérivé ci-dessus doit alors être trivial. De ce point de vue, l'étude de la stabilité par perturbation dans le deuxième pas est quelque peu anecdotique et n'importe quel autre type de perturbation peut aussi bien faire l'affaire ; ceci est illustré dans [RBMM04] où l'instabilité du second type est identifiée avec le développement de champs non entiers, ou dans [MPRT04] où elle est identifiée avec celui de champs évanescents à température finie.

Brisure de supersymétrie

Pour tous les modèles sur graphes aléatoires, l'approche à un pas est soit toujours instable, à l'instar de la couverture sur graphe régulier, soit, comme rappelé ci-dessus, le devient pour des énergies au delà du seuil de Gardner ϵ_G. Pour obtenir une description adéquate dans ces cas, une possibilité souvent suggérée, dans le prolongement de l'extension du liquide au premier pas est de multiplier les niveaux de grandes déviations. Cependant, « briser la symétrie des répliques » de la sorte, même à l'infini, est voué à ne jamais venir à bout des instabilités. En effet, le schéma d'enchaînement des pas reste toujours fondé sur une relation du type (7.2) qui, si la complexité est non-triviale, doit être nécessairement violée, au moins pour les états dominants.

Le formalisme doit donc être étendu dans une direction différente, capable de prendre en compte les *états marginaux* (baptisé ainsi car marginalement stables) dont le nombre varie lorsque des nœuds sont ajoutés. La relation (8.57) semble un point de départ évident dont il a été montré qu'il était concluant pour les modèles sur graphes complètement connectés [CGP05]. En l'absence pour l'heure d'une dérivation analogue pour les modèles sur graphes aléatoires, une méthode indirecte a été proposée par Rizzo [Riz] : elle consiste à considérer des états atypiques, dont une autre grandeur que ϕ (ou ϵ) est également contrainte : à l'image de ceux de basse énergie $\epsilon < \epsilon_G$, ces états ne sont généralement pas marginaux et sont correctement décrits par l'approche standard à un pas. Dans la limite où la contrainte supplémentaire est envoyée à zéro, cette procédure permet ainsi de calculer une complexité pour les états marginaux. Techniquement, cela revient à introduire un second champ de cavité z, couplé au champ standard h, et qui ne devient non nul que dans la phase « brisant la supersymétrie » où les états marginaux dominent [Riz]. Physiquement, ce champ z décrit la réponse à une perturbation infinitésimale, qui doit être nulle lorsque (7.2) s'applique ; par contre lorsque cette hypothèse ne s'applique plus, les z sont non nuls et contrôlent un facteur de repondération supplémentaire dans les équations de cavité, du type de celui de (8.57), qui rend compte de la création et de l'annihilation

d'états sous l'effet d'une perturbation.

De la discussion menée dans ce chapitre, il ressort que l'instabilité du second type, puisqu'elle reflète l'instabilité du système vis-à-vis d'une perturbation arbitraire dont l'ajout d'un nœud est une réalisation particulière, doit coïncider avec le seuil de marginalité où les champs z deviennent non triviaux, ainsi qu'observé sur des modèles particuliers [CLR05]. Pour conclure, brisure de la symétrie (prise en compte des états marginaux par ajout du champ z) et brisure de la symétrie des répliques (prise en compte de la fragmentation des amas par multiplication des pas) apparaissent donc comme deux corrections possibles à l'approche à un pas ; de plus, la première est inévitable pour l'étude des états de suffisamment haute énergie dans tous les modèles possédant une complexité non triviale.

Notes et références

L'analyse de la stabilité du premier pas à l'intérieur du formalisme à deux pas a été initiée par Montanari et Ricci-Tersenghi [MRT03]. L'équivalence avec le calcul de susceptibilité est présentée dans [RBMM04].

Les critères globaux d'endogénie et d'unicité asymptotique essentielle ont été introduits par Aldous dans le cadre de sa solution au problème du matching bipartie [Ald01], pour lequel ces deux critères s'appliquent. En fait l'endogénie est prouvée dans ce contexte en montrant que $\mathcal{P}$ est le seul point fixe de $\hat{I}^{(2)}$ [Ban04], ce qui est une propriété plus forte que nécessaire.

Le critère fort d'indépendance aux conditions au bord a été formalisé par Gamarnik *et al.* dans [GNS03] qui l'utilisent pour démontrer rigoureusement la validité de la solution liquide pour la couverture sur graphes poissonniens de connectivité moyenne $\gamma < e$, ainsi que pour plusieurs variantes de ce modèle. Cette méthode leur permet d'atteindre les limites physiques du liquide grâce à la coïncidence discutée plus haut. Cette dernière soulève la question plus générale de l'influence des conditions au bord, qui relève en mathématiques des problèmes de reconstruction dans les arbres [Mos04].

Les développements menant à (8.57) reprennent une analyse de Cavagna, Giardina et Parisi [CGP05] effectuée dans le cadre du modèle SK. La méthode de cavité non supersymétrique pour les modèles sur graphes aléatoires a été développée par Rizzo [Riz], aussi en partant de l'expérience du modèle SK. Un problème non pris en compte jusque là et qui doit devenir crucial dans le cas non supersymétrique est que seules les solutions de cavité correspondant à des minima de l'énergie libre variationnelle sont physiquement à retenir ; avoir ignoré cet aspect est sans conséquence dans l'approche standard où les minima sont censés dominer, mais doit être pris en compte lorsque ce sont des points selles d'ordre un deviennent dominants.

Chapitre 9

Géométrie des phases vitreuses

Ce dernier chapitre décrit comment la condensation dans l'espace des champs de cavité se traduit géométriquement dans l'espace des phases du problème original, c'est-à-dire sur la distribution des configurations en fonction de leur énergie.

9.1 Un pas gelé

De façon très générale, le formalisme développé en 7.4 indique que le comportement en température d'un système dont la phase vitreuse est décrite par l'approche à un pas est dicté par un potentiel $\phi_1(m,\beta)$ qui ne s'identifie au potentiel liquide $\phi_0(\beta)$ que lorsque m adopte la valeur particulière $m=1$. Le REM et le polymère dirigé étudiés dans la première partie, qui subissent un gel à la température où leur entropie s'annule, sont pourtant décrits par un potentiel $\phi_1(m,\beta)$ qui se ramène au potentiel liquide $\phi_0(\beta)$ pour toutes les valeurs de m, selon la relation $\phi_1(m,\beta)=\phi_0(\beta m)$. Les conditions sous lesquelles un tel scénario de gel s'applique sont ici examinées en détail, ainsi que ses implications sur la structure de l'espace des phases.

Géométrie des phases gelées

La condition sous laquelle le potentiel $\phi_1(m,\beta)$ ne dépend en fait de ses deux variables m et β que par l'intermédiaire de leur produit βm se lit sur la relation de définition, *cf.* (7.33),

$$e^{-N\phi_1(\beta,m)}=\sum_{\alpha\in\mathcal{S}} e^{-Nm\phi_0^{(\alpha)}(\beta)}. \tag{9.1}$$

En effet, puisque $\phi_0^{(\alpha)}(\beta)=\beta\epsilon^{(\alpha)}-s^{(\alpha)}(\beta)$, il est nécessaire d'avoir $s^{(\alpha)}(\beta)=0$ pour tout $\alpha\in\mathcal{S}$. Ainsi chaque amas a une entropie interne nulle, c'est-

à-dire ne contient qu'un nombre subextensif de configurations, ce qui, du point de vue thermodynamique est équivalent à des amas constitués d'une seule solution. En conséquence dans un tel cas les solutions de cavité $\alpha \in \mathcal{S}$ s'identifient aux configurations $\sigma \in \mathcal{C}$, ainsi qu'en rend compte la réduction du premier pas au pas zéro.

Réduction gel-liquide

L'argument précédent relie le scénario de gel à une propriété géométrique de la phase vitreuse, qui doit être constituée de configurations isolées (les amas sans entropie). La relation $\phi_1(m,\beta) = \phi_0(\beta m)$ qui établit une correspondance entre cette phase vitreuse gelée et celle d'un liquide dans un tel cas peut être observé au niveau des équations de cavité, dont la forme, à température finie est,

$$\psi_{\sigma_0}^{(i\to 0)} = e^{\Delta\phi_0^{(i\to 0)}} \sum_{(\sigma_1,\ldots,\sigma_k)\to\sigma_0} e^{-\beta\mathcal{E}_{\sigma_0,\ldots,\sigma_k}} \prod_{j\in i-0} \psi_{\sigma_j}^{(j\to i)}, \tag{9.2}$$

où $(\sigma_1,\ldots,\sigma_k) \to \sigma_0$ indique que la somme s'effectue sur les $(\sigma_1,\ldots,\sigma_k)$ tels que $\mathcal{E}_{\sigma_0,\ldots,\sigma_k} < \infty$; cette précision n'est bien sûr pas nécessaire en raison du facteur $e^{-\beta\mathcal{E}}$, et était d'ailleurs absente dans (5.35), mais elle s'avère utile dans le présent contexte. La relation (9.2) définit comme à l'accoutumée les fonctions $\hat{\phi}^{(i\to 0)}$ et $\Delta\hat{\phi}^{(i\to 0)}$ qu'incorpore le pas suivant,

$$\begin{aligned} &P^{(i\to 0)}(\psi^{(i\to 0)})e^{-\Delta\phi_1^{(i\to 0)}(m,\beta)} = \\ &\int \prod_{j\in i-0} d\psi^{(j\to i)} P^{(j\to i)}(\psi^{(j\to i)})\delta(\psi^{(i\to 0)} - \hat{\psi}^{(i\to 0)}(\{\psi^{(j\to i)}\}))e^{-\Delta\hat{\phi}_0^{(i\to 0)}(\{\psi^{(j\to i)}\})}. \end{aligned} \tag{9.3}$$

La première observation est que les équations à un pas (9.3) avec $m = 1$ se réduisent toujours, indépendamment de la structure des amas, aux équations de pas zéro (9.2). Pour $m = 1$ en effet, toute l'information contenue par les $P^{(j\to i)}$, c'est-à-dire l'information nécessaire au calcul des potentiels, se résume sous une forme vectorielle, en termes des champs liquides, de la façon suivante :

$$\psi^{(i\to 0)} = \int d\psi P^{(i\to 0)}(\psi)\psi \qquad (m = 1). \tag{9.4}$$

Afin d'établir cette relation, tout en anticipant sur sa généralisation à $m \neq 1$, on introduit la fonctionnelle $\hat{\Psi}_n[P] = \int d\psi P(\psi)\psi^n$ donnant le moment n-ème

de la distribution P. En appliquant $\hat{\Psi}_n$ à l'équation à un pas (9.3), il vient

$$\hat{\Psi}_n[P^{(i\to 0)}] = \\ e^{\Delta\phi_1^{(i\to 0)}(m,\beta)} \int \prod_{j\in i-0} d\psi^{(j)} P^{(j\to i)}(\psi_j) \left[\hat{\psi}^{(i\to 0)}(\{\psi_j\})\right]^n e^{-\Delta\hat{\phi}_0^{(i\to 0)}(\{\psi_j\})}. \tag{9.5}$$

Or, d'après la définition (9.2) des fonctions $\hat{\psi}^{(i\to 0)}$ et $\Delta\hat{\phi}^{(i\to 0)}$, le choix $m = n$ conduit à

$$\hat{\Psi}_m[P^{(i\to 0)}]_{\sigma_0} = \\ e^{\Delta\phi_1^{(i\to 0)}(m,\beta)} \int \prod_{j\in i-0} d\psi^{(j)} P^{(j\to i)}(\psi_j) \left(\sum_{(\sigma_1,\ldots,\sigma_k)\to\sigma_0} e^{-\beta\mathcal{E}_{\sigma_0,\ldots,\sigma_k}} \prod_{j\in i-0} \psi_{\sigma_j}^{(j\to i)} \right)^m . \tag{9.6}$$

Le rôle particulier joué par $m = 1$, apparaît à ce niveau, puisqu'en adoptant cette valeur les équations deviennent

$$\hat{\Psi}_1[P^{(i\to 0)}]_{\sigma_0} = e^{\Delta\phi_1^{(i\to 0)}(1,\beta)} \sum_{(\sigma_1,\ldots,\sigma_k)\to\sigma_0} e^{-\beta\mathcal{E}_{\sigma_1,\ldots,\sigma_k}} \prod_{j\in i-0} \hat{\Psi}_1[P^{(j\to i)}]_{\sigma_j}, \tag{9.7}$$

soit encore

$$\hat{\Psi}_1[P^{(i\to 0)}] = \hat{\psi}^{(k)}(\{\hat{\Psi}_1[P^{(j\to i)}]\}_{j\in i-0}), \tag{9.8}$$

qui, par définition des champs liquides, implique la relation (9.4). Suivant le même schéma, on établit également que les potentiels coïncident, $\phi_1(m = 1, \beta) = \phi_0(\beta)$, conformément à la relation (7.35).

Pour les systèmes dont les amas n'ont pas d'entropie interne, une correspondance analogue peut être établie à toute valeur de m. Il convient cette fois de considérer $\hat{\Psi}_m$ et, afin que (9.5) se réduise à un liquide, il faut explicitement prendre en compte la structure particulière des amas. Formellement, au niveau de (9.5), deux possibilités sont offertes. La première exige des $P^{(j\to i)}(\psi)$ qu'ils se concentrent sur un seul type, soit $P^{(j\to i)}(\psi) = \delta(\psi - \psi^{(j\to i)})$, ce qui d'après l'interprétation des $P^{(j\to i)}$ en terme de distribution sur les amas signifie qu'il n'y a en fait qu'un seul amas : on retrouve ainsi que pour un système liquide le premier pas reproduit le pas zéro. La seconde possibilité autorise elle une phase vitreuse, c'est-à-dire des $P^{(j\to i)}$ non triviaux, mais requiert qu'ils soient de la forme $P^{(j\to i)} = \sum_a \psi_a^{(j\to i)}\delta_a$, ce qui s'interprète cette fois en disant que les amas ont des contenus triviaux. Une telle forme est également en accord avec la discussion donnée en 8.1, à partir de laquelle elle aurait pu être alternativement dérivée.

Conséquences

Une telle réduction n'est compatible avec les équations ci-dessus qu'à la condition que chaque combinaison de l'état des parents impose l'état de l'enfant, soit

$$\forall(\sigma_1, \ldots, \sigma_k) \quad \exists!\sigma_0 \quad (\sigma_1, \ldots, \sigma_k) \to \sigma_0, \tag{9.9}$$

relation qui doit valoir à la fois pour l'ajout d'une racine aux arbres tronqués, et pour l'ajout d'un nœud au graphe total. Les systèmes sujets à cette condition, dont différents exemples sont examinés ci-après, sont dits à *contraintes dures*.

Dans la mise en œuvre pratique de la méthodologie développée jusqu'ici, la prise en compte de la présence de contraintes dures est essentielle. En effet, que les ψ soient piqués signifie dans un formalisme à température nulle que les champs h qui leur sont associés prennent des valeurs nulles ou infinies : se placer directement à température nulle dans un tel cas conduit donc en particulier à la divergence des algorithmes de dynamique de population ou de passage de message.

La présence de contraintes dures est une condition nécessaire pour que le scénario de gel s'applique ; elle s'ajoute aux conditions suivantes :
(i) l'entropie liquide doit s'annuler à température finie, $\beta_c < \infty$;
(ii) le liquide doit être stable jusqu'à β_c (et éventuellement au delà) ;
(iii) aucune transition discontinue à un pas ne doit se produire avant β_c.

9.2 Contraintes dures

La condition de contraintes dures exprimée par (9.9) est particulièrement restrictive. La version température finie des deux systèmes sur graphes aléatoires étudiés jusqu'ici, couverture et coloriage, c'est-à-dire les modèles de sphères dures et de Potts antiferromagnétique, ne satisfont pas cette condition, ni non plus les modèles de verre sur réseau. Les systèmes à contraintes dures existent cependant, et ceux ayant fait l'objet d'une étude sont recensés ci-dessous.

Avant de les aborder, il convient de mentionner que le REM et le polymère subissent un scénario de gel sans être à strictement parlé à contraintes dures, puisqu'étant définis directement au niveau de leur spectre d'énergie, ils n'admettent pas de description en termes de champs de cavité. Cependant, la

raison pour laquelle le REM a pour amas des configurations isolées s'explique plus simplement par le fait que ses configurations sont dépourvues de corrélation. Cet argument ne s'applique pas au polymère dirigé, mais on peut lui substituer le suivant : étant donnée la structure hiérarchique des corrélations, la présence d'amas non triviaux impliquerait qu'existe une distance intermédiaire entre la racine et les feuilles, correspondant au recouvrement typique entre configurations d'un même amas (autrement dit, l'arbre ultramétrique des répliques s'identifie ici avec l'arbre géométrique). Or aucune échelle de longueur n'est présente dans le modèle qui permette de fixer cette distance dans la limite thermodynamique, justifiant qu'elle ne puisse être que nulle (cas liquide) ou infinie (cas vitreux).

Durcissement asymptotique

De nombreux modèles deviennent à contraintes dures lorsqu'ils sont pris dans une certaine limite. Le REM lui même, qui constitue l'archétype du système à phase vitreuse gelé, a été originellement introduit par Derrida comme limite à $p \to \infty$ de systèmes de p-spins [Der81], c'est-à-dire de modèles à variables binaires sujettes à des interactions à p corps ($\ell_a = p$, $\forall a$).

Comme souligné ci-dessus, le modèle de sphères dures n'est pas à contraintes dures, mais il le devient toutefois dans la limite $\mu \to \infty$ où il définit le problème d'optimisation de la couverture. La même conclusion vaut pour les modèles de verre sur réseau. Les contraintes dures ne concernant que la limite $\mu \to \infty$, cette observation ne contredit néanmoins pas le fait que la transition vitreuse à $\mu < \infty$ s'effectue selon un scénario du type discuté en 7.4, qui diffère d'une transition de gel.

Par contre, le modèle de Potts reste lui « mou » même dans la limite $\beta \to \infty$ où il décrit le coloriage. Ceci se traduit au niveau des champs de cavité par une probabilité $(1 - q\eta)$ non nulle d'avoir un champ $u = 0$ n'imposant aucune couleur (voir 7.3). Cependant, dans la limite d'un nombre infini de couleurs, $q \to \infty$, il peut être montré que $\eta \sim 1/q$ [KPW04], ce qui signale un durcissement progressif. De même, le problème K-SAT devient-il asymptotiquement dur dans la limite $K \to \infty$ puisque le poids du pic en $u = 0$ pour ce modèle se comporte comme 2^{-K} [MMZ03].

Matchings

À la différence des modèles précédents, les problèmes de matchings d-partie forment des systèmes à contraintes dures à toute température, et pré-

sentent une transition à température finie effectivement décrite par un scénario de gel lorsque $d \geq 3$. Le traitement par la cavité de ces modèles attribue la dureté des contraintes à une limite de type $\mu \to \infty$ [MMR04, MMR05]. En effet, en relâchant partiellement les contraintes, les configurations admissibles peuvent être définies comme les solutions de densité maximale d'une modèle auxiliaire de type sphères dures, qui, dans la limite $\mu \to \infty$ est, comme les modèles de verre sur réseau, à contraintes dures.

Le cas particulier $d = 2$ des matchings bipartie montre également que la présence de contraintes dures est une condition nécessaire mais non suffisante à la présence d'une transition de type gel : dans ce cas en effet l'entropie ne s'annule qu'à $\beta = \infty$ et aucune phase vitreuse n'est présente.

Perceptron binaire

Le perceptron binaire est un autre exemple de système à contraintes dures à toute température dont la nature des contraintes est attribuable au durcissement asymptotique d'un modèle auxiliaire, K-SAT pour $K \to \infty$ en l'occurrence. Le *perceptron* est un réseau de N *neurones* binaires $\sigma_i = \pm 1$ couplés par des *synapses* J_{ij} qui évoluent au cours du temps t selon la dynamique

$$\sigma_i(t+1) = \text{Signe}\left(\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\sigma_j(t)\right). \tag{9.10}$$

Ce modèle s'utilise comme mémoire associative pour retenir M *prototypes*, $\mu = 1, \ldots, M$. Un prototype μ, décrit par N bits, $\{\xi_i^\mu\}_{i=1,\ldots,N}$ avec $\xi_i^\mu = \pm 1$, est appris s'il est un point fixe de la dynamique,

$$\xi_i^\mu = \text{Signe}\left(\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\xi_j^\mu\right). \tag{9.11}$$

Cette condition se récrit plus commodément $\sum_j J_{ij}\zeta_j^\mu > 0$ avec les $\zeta_j^\mu \equiv \xi_i^\mu \xi_j^\mu$ formant des variables aléatoires indépendantes prenant valeurs ± 1 avec probabilité $1/2$.

Un problème central est la détermination de la *capacité* $\alpha_c = p/N$ du perceptron, c'est-à-dire le nombre maximal de prototypes qu'il peut mémoriser dans la limite $N \to \infty$. Cette question peut être posée pour une règle d'apprentissage donnée, comme par exemple la règle de Hebb $J_{ij} = (1/N)\sum_\nu \xi_i^\nu \xi_j^\nu$, auquel cas $\alpha_c \simeq 0,14$ [Hop82], ou en l'absence de contraintes sur les J_{ij}, soit pour la meilleure règle possible, auquel cas $\alpha_c = 2$ [Gar88]. Le

perceptron binaire est intermédiaire entre ces deux extrêmes : aucune règle n'est fixée mais que les synapses sont contraintes à être binaires, $J_{ij} = \pm 1$.

Par le biais des répliques, Krauth et Mézard [KM89] ont proposé pour ce modèle un scénario de gel et ainsi obtenu pour sa capacité $\alpha_c \simeq 0,83$. Un argument supplémentaire en faveur de leur solution est donné ici par une reformulation en termes de problème de satisfaction de contraintes. Dans ce cadre, les $M = \alpha N$ prototypes ζ^μ constituent le désordre externe définissant chaque instance, et l'analyse s'effectue sur l'espace des configurations défini par l'ensemble des synapses J_i, la capacité correspondant à un seuil de satisfaisabilité pour des prototypes typiques. La fonction de coût est définie par le nombre de prototypes non mémorisés pour une configuration J donnée des synapses,

$$E_\zeta[J] = \sum_{\mu=1}^{M} \theta\left(-\sum_{j=1}^{N} J_j \zeta_j^\mu\right), \tag{9.12}$$

où $\theta(x) = 1$ si $x > 0$, et 0 sinon. Une version diluée de ce modèle, qui permet de le rapprocher des problèmes de satisfaisabilité considérés jusqu'ici, consiste à fixer à K (et non plus N) le nombre de synapses intervenant dans la mémorisation de chaque prototype ; lorsque ces synapses sont choisies aléatoirement et indépendamment, cette condition donne lieu à une structure aléatoire où le nombre de prototypes auxquels une synapse est associé suit une loi de Poisson de moyenne αK. On est ainsi ramené à un problème de satisfaction de contraintes dans lequel chaque clause a connectivité fixe K. Or un tel modèle devient à contraintes dures dans la limite $K \to \infty$ [MMZ03], ce qui justifie de retenir, dans la méthode à un pas, un scénario de gel.

Le lien avec les problèmes K-SAT apparaît plus précisément lorsque il est exigé que les configurations associées à des prototypes distincts diffèrent par au moins $\kappa/2$ bits, ce qui revient à remplacer la fonction coût par

$$E_\zeta[J] = \sum_{\mu=1}^{M} \theta\left(\kappa - \sum_{j\in\mu} J_j \zeta_j^\mu\right). \tag{9.13}$$

Le choix $\kappa = K - 1$ pour ce *paramètre de stabilité* signifie ainsi que chaque clause élimine uniquement un sommet de l'hypercube de dimension 2^K formé par les variables J_j avec $j \in \mu$, ce qui correspond exactement à la définition donnée en 4.2 du modèle K-SAT.

Le cœur de XOR-SAT

Le modèle de satisfaction de contraintes XOR-SAT, qui est la version température nulle du système de p-spin dont le REM est la limite pour $p \to \infty$, constitue à bien des égards, un cas très particulier. Il est défini pour des variables $\{\sigma_i\}_i$ binaires ($q = 2$), $\sigma_i \in \{0, 1\}$, et $\ell_a = p$, $\forall a$, avec des fonctions coûts données par

$$\mathcal{E}_a[\sigma_a] = \left| \sum_{i \in a} \sigma_i - y_a \right| , \tag{9.14}$$

où les sommes sont à effectuer modulo 2 ; les y_a font partie du désordre externe et valent 0 ou 1 aléatoirement pour chaque a. Pour $p \geq 3$, il satisfont en fonction de γ (connectivité moyenne des nœuds) un scénario similaire à celui du coloriage, avec une transition dynamique à γ_d suivie par une transition statique à γ_c [RTWZ01]. La géométrie des amas est cependant très particulière, comme le révèle une analyse alternative de ce modèle, fondée sur un algorithme d'effeuillage [CDMM03, MRTZ03]. Les amas sont en effet spécifiés par les valeurs des variables sur le 2-cœur des nœuds avec connectivité au moins 2. À la différence du cas $p = 2$ traité en 4.3, le 2-cœur apparaît pour les hypergraphes ($p \geq 3$) à une valeur différente de celle de la percolation des hyperboucles (comme avec 3-cœur pour les graphes simples), ces deux transitions s'identifiant respectivement avec γ_d et γ_c.

Il ressort ainsi de cette analyse que XOR-SAT, restreint au 2-cœur, forme un système à contraintes dures, dont l'origine ne semble pas procéder d'une prise de limite. Un cas particulier, important en pratique car central à une famille particulièrement performante de codes correcteurs d'erreur (codes de Gallager) est celui des graphes aléatoires réguliers [Mon01]. Ceux-ci sont en effet, par nature, dépourvus de nœuds de connectivité nulle ou unité, et correspondent ainsi à des systèmes XOR-SAT à contraintes dures. Une telle géométrie des solutions constituée de configurations isolées est en fait cruciale pour les codes correcteurs d'erreur, où les mots de code doivent différer suffisamment pour qu'ils puissent être distingués même après l'altération de certains de leurs bits.

Durcissement par extension

De façon très générale, les contraintes de tout système descriptible par une approche à un pas peuvent être artificiellement durcies en introduisant un état supplémentaire pour définir un système *étendu*, qui possède la même complexité que le système initial mais dont les amas se réduisent à de simples configurations. Cette construction, proposée par Braunstein et

Zecchina [BZ04], permet d'interpréter directement le paramètre y en terme de température et la transition vitreuse en terme de scénario de gel ; elle est rediscutée brièvement ci-dessous en conjonction avec le calcul de l'entropie des amas pour les systèmes à contraintes molles.

9.3 Taille des amas et dénombrement

Une question plus générale que celle de l'existence ou non de solutions dans les problèmes de décision concerne le calcul du nombre de solutions. L'approche à un pas, fondée sur le calcul de la complexité, fournit déjà une information, à savoir le nombre d'amas de solutions. Pour les systèmes dont la phase vitreuse n'est pas gelée, comme le coloriage, cette information est toutefois insuffisante et doit être complétée par un calcul de l'entropie interne des amas. Plus exactement, un calcul de la fonction de grandes déviations de l'entropie interne sur les différents amas est nécessaire, les amas les plus nombreux n'étant pas nécessairement ceux qui contribuent majoritairement à l'entropie totale.

Entropie liquide

Le problème du dénombrement des solutions se pose déjà, quoique plus simplement, pour les systèmes en phase liquide, tel le coloriage sur graphes poissonniens de faible connectivité, $\gamma < \gamma_d$. Soit, pour un problème de satisfaction de contraintes arbitraire, $Z_{\sigma_i}^{(i\to a)}$ le nombre de solutions en l'absence de la clause a et avec le nœud i contraint à valoir σ_i. La récursion sur les arbres tronqués (*cf.* figure 5.3) de cette quantité satisfait la relation

$$Z_{\sigma_i}^{(i\to a)} = \prod_{b\in i-a} \sum_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \mathcal{E}_b[\sigma_b]=0}} \prod_{j\in b-i} Z_{\sigma_j}^{(j\to b)} \tag{9.15}$$

où la contrainte $\mathcal{E}_b[\sigma_b] = 0$ assure que seules les solutions, c'est-à-dire les configurations d'énergie nulle, sont comptabilisées. Suivant la procédure habituelle, on définit un champ de cavité

$$\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} = \frac{Z_{\sigma_i}^{(i\to a)}}{\sum_\tau Z_\tau^{(i\to a)}} \tag{9.16}$$

dont l'itération se décompose en deux étapes,

$$\begin{aligned}\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \frac{\prod_{b\in i-a}\nu_{\sigma_i}^{(b\to i)}}{\sum_\tau \prod_{b\in i-a}\nu_\tau^{(b\to i)}},\\ \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \sum_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \mathcal{E}_b[\sigma_b]=0}} \prod_{j\in b-i}\psi_{\sigma_j}^{(j\to b)}.\end{aligned} \tag{9.17}$$

Toujours suivant la procédure exposée dans les chapitres précédents, à l'addition d'un nœud ou d'une clause sont associés des déplacements d'entropie donnés par

$$\begin{aligned}\Delta S^{(i\to a)} &= \ln\sum_\tau \prod_{b\in i-a}\nu_\tau^{(b\to i)},\\ \Delta S^{(i+a\in i)} &= \ln\sum_\tau \prod_{a\in i}\nu_\tau^{(a\to i)},\\ \Delta S^{(a)} &= \ln\sum_{\substack{\sigma_a,\\ \mathcal{E}_a[\sigma_a]=0}} \prod_{i\in a}\psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}.\end{aligned} \tag{9.18}$$

À partir de ces fonctions, l'entropie liquide totale s'écrit

$$s_0 = \frac{1}{N}\left(\sum_i \Delta S^{(i+a\in i)} - \sum_a (\ell_a - 1)\Delta S^{(a)}\right), \tag{9.19}$$

ou sous une forme duale équivalente qui revient à interchanger formellement les a et les i.

Appliquées au coloriage, les formules (9.17) s'écrivent

$$\begin{aligned}\psi_{\sigma_i}^{(i\to 0)} &= \frac{\prod_{j\in i-0}\nu_{\sigma_i}^{(j\to i)}}{\sum_\tau \prod_{j\in i-0}\nu_\tau^{(j\to i)}},\\ \nu_{\sigma_i}^{(j\to i)} &= 1-\psi_{\sigma_i}^{(j\to i)}.\end{aligned} \tag{9.20}$$

La probabilité $\psi_{\sigma_i}^{(i\to 0)}$ que i porte la couleur σ_i est en effet proportionnelle à la probabilité qu'aucun de ses parents $j \in i-0$ ne porte cette couleur, qui est le produit des $\nu_{\sigma_i}^{(j\to i)}$, les probabilités que les j aient une couleur différente de σ_i. Les déplacements d'entropie correspondant, qui admettent

des interprétations analogues, s'écrivent

$$\begin{aligned}
\Delta S^{(i\to 0)} &= \ln \sum_{\tau} \prod_{j\in i-0} (1-\psi_\tau^{(j\to i)}),\\
\Delta S^{(i+a\in i)} &= \ln \sum_{\tau} \prod_{j\in i} (1-\psi_\tau^{(j\to i)}),\\
\Delta S^{(i,j)} &= \ln \left(1-\sum_{\tau} \psi_\tau^{(i\to j)}\psi_\tau^{(j\to i)}\right).
\end{aligned} \tag{9.21}$$

Ainsi, dans une phase liquide où $\psi_{\sigma_i}^{(j\to i)} = 1/q$, $\forall \sigma_i$, on obtient

$$s_{\text{liq}} = \ln q + \frac{\langle k\rangle}{2}\ln(1-1/q) \tag{9.22}$$

où $\langle k\rangle$ désigne la connectivité moyenne des graphes. Cette formule s'interprète simplement en récrivant

$$e^{Ns_{\text{liq}}} = q^N \left(1-\frac{1}{q}\right)^M, \tag{9.23}$$

avec $M = \langle k\rangle N/2$ qui désigne le nombre moyen de liens. Dans cette formule, q^N représente le nombre total des configurations et chacun des M liens en supprime une fraction $(1-1/q)$, qui est la probabilité que deux nœuds aient même couleur lorsque toutes les couleurs sont équiprobables ; ce résultat qui néglige toutes les corrélations correspond en fait à un calcul recuit, soit en termes mathématiques, à un calcul de premier moment.

Entropie interne des amas

En présence d'une phase vitreuse, le dénombrement des solutions requiert un calcul de l'entropie interne des amas. En général, les amas possèdent des tailles différentes, décrites par une *complexité entropique* $\Sigma(s)$, définie par

$$\#\{\alpha\in\mathcal{S} : s^{(\alpha)} = s\} \asymp e^{N\Sigma(s)}. \tag{9.24}$$

Le nombre total de solutions est alors donné par

$$\mathcal{N}_N \equiv \#\{\sigma\in\mathcal{C} : E[\sigma]=0\} = \sum_{\alpha\in\mathcal{S}} e^{Ns^{(\alpha)}} \asymp \int ds e^{N[\Sigma(s)+s]} \tag{9.25}$$

De ce point de vue, XOR-SAT forme un cas dégénéré, où, en raison de la symétrie de groupe sous-jacente, tous les amas ont exactement même entropie

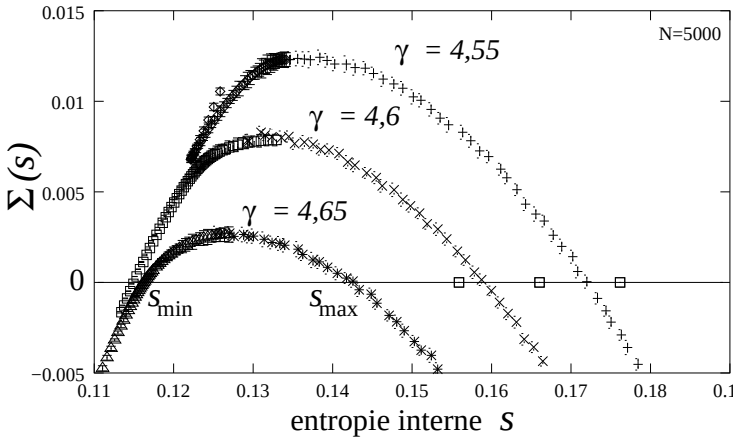

FIG. 9.1 – *Courbes de complexité entropique* $\Sigma(s)$ *pour le 3-coloriage sur graphes poissonniens*, tracées pour trois valeurs de γ comprises entre γ_d et γ_c (phase SAT-dure) sur des graphes de taille $N = 5000$. Le maximum des courbes pour $x = 0$ est associé aux amas typiques dont le nombre correspond à la valeur $\Sigma(y = \infty)$ donnée par (7.31) dont la dépendance en γ est représentée sur la figure 7.2. La pente en $s_{\max}$ est $-x^*$ avec $x^* < 1$ ce qui indique que la majorité des solutions appartient aux amas de plus grande taille $s_{\max}$.

interne s_{int}, donc $\Sigma(s) = \delta(s - s_{\text{int}})$. Plus généralement cependant, $\Sigma(s)$ est positive sur un domaine fini $[s_{\min}, s_{\max}]$. Le problème de la condensation sur une des bornes de ce domaine pouvant se poser, on considère ici aussi un potentiel $\phi(x)$ conjugué à $\Sigma(s)$, défini par

$$e^{-N\phi(x)} = \int ds e^{N[\Sigma(s)+xs]}. \tag{9.26}$$

Le nombre total de solutions $\mathcal{N}_N$ correspond en général à $x = 1$, mais si $x^* = \partial_s \Sigma(s = s_{\max}) < 1$, alors il y a condensation sur la borne $s = s_{\max}$ et comme discuté en 7.4 dans le cadre de la température finie, $\mathcal{N}_N \asymp \exp(N s_{\max})$, signifiant que l'entropie totale est dominée par l'entropie des amas de plus grande taille. Tel est notamment le cas pour le 3-coloriage dans sa phase SAT-difficile ($\gamma_d < \gamma < \gamma_c$), ainsi qu'illustré sur la figure 9.1.

Champs évanescents

Le formalisme précédent est intimement lié au formalisme à température finie qui, lui-aussi, incorpore des contributions entropiques. En effet, étendre le problème du calcul de l'entropie interne s au cas des amas d'énergie non nulle ϵ, conduit à étudier une complexité $\Sigma(\epsilon, s)$, et un potentiel conjugué

$\phi(x,y)$, dont le lien avec la complexité $\Sigma(\phi_0,\beta)$ et le potentiel $\phi_1(m,\beta)$ introduits en 7.4 est

$$e^{-N\phi(y,x)} = \int e^{N[\Sigma(\epsilon,s)-y\epsilon+xs]}d\epsilon ds = e^{-N\phi_1(x,\beta)} = \int e^{N[\Sigma(\phi_0,\beta)-x\phi_0]}d\phi_0, \tag{9.27}$$

avec les relations $\beta = y/x$ et $\phi_0 = \beta\epsilon - s$. Ainsi, $\phi(y,x) = \phi_1(m = x, \beta = y/x)$ et le nombre d'amas d'énergie ϵ et entropie interne s se déduit directement de l'étude du problème à température finie.

Le point à souligner est qu'il existe deux façons distinctes de prendre la limite $\beta \to \infty$. La première consiste à prendre $y \to \infty$ en gardant x fixé, et conduit aux champs $\psi = \lim_{\beta\to\infty}\psi(\beta)$ décrivant l'entropie interne des amas d'énergie nulle ; dans cette limite les relations (5.35) deviennent (9.17). La seconde consiste à prendre $x \to 0$ avec y fixé, et conduit aux champs entiers $\hbar_\sigma = -\lim_{\beta\to\infty}[\ln\psi_\sigma(\beta)]/\beta$ [liés aux h par (5.42)] et $u_\sigma = -\lim_{\beta\to\infty}[\ln(\nu_\sigma/\sum_\tau \nu_\tau)/\beta]$ décrivant les amas en fonction de leur énergie par le biais de y, en ignorant leur entropie interne.

Dans le second type de passage à la limite, qui correspond à la situation discutée dans les chapitres précédents, l'information sur l'entropie des amas, contenue dans le formalisme à température finie, se trouve perdue. Cette information est en effet contenue dans les *champs évanescents* [BMW00], dont une définition est $h' = \lim_{\beta\to\infty}[\ln\psi(\beta)/\beta + \beta\hbar]$. Ainsi que discuté ci-dessous, les champs évanescents ne contribuent pas à l'énergie et les ignorer est sans conséquence concernant la détermination du fondamental, ce qui permet de simplifier les calculs en ne retenant que les seuls champs $\hbar$, à valeurs entières. Les champs évanescents deviennent cependant indispensables lorsque des quantités autres que l'énergie sont considérées, comme l'entropie ici, ou les distances plus bas.

De ce point de vue, les équations de cavités dites « directement à température nulle », c'est-à-dire en terme des seuls $\hbar$ (équivalents aux h), réalisent une projection des équations plus générales portant sur ψ, qui incluent à la fois $\hbar$ et h'. Ainsi pour reprendre l'exemple du coloriage, la distribution $R^{(j\to i)}(\psi)$ des champs $\psi^{(j\to i)}$ sur chaque lien orienté $(j \to i)$ a la forme générale

$$R^{(j\to i)}(\psi) = \eta^{(j\to i)}\sum_{\tau=0}^{q-1}\delta(\psi - e^{(\tau)}) + (1-\eta^{(j\to i)})\tilde{R}^{(j\to i)}(\psi) \tag{9.28}$$

où $\tilde{R}^{(j\to i)}(\psi)$ représente une partie continue. Une valeur piquée $\psi^{(j\to i)} = e^{(\sigma)}$ s'interprète en disant que, dans un certain amas, le nœud j est contraint,

en l'absence de son voisin i, à prendre la couleur σ. Comme une couleur ne peut être imposée à un nœud sans que ses voisins n'aient eux-même des couleurs imposées, $\eta^{(i\to 0)}$ ne dépend pas des $\tilde{R}^{(j\to i)}(\psi)$. De même, l'énergie fondamentale, égale au nombre de liens dont les deux nœuds ont des couleurs imposées égales, n'est fonction que des $\eta^{(j\to i)}$. En conséquence, il suffit pour le calcul de l'énergie de se limiter aux $\eta^{(j\to i)}$, ce qui revient à considérer les champs $u^{(j\to i)}$ et leur distribution $Q^{(j\to i)}$ donnée par

$$Q^{(j\to i)}(u) = \eta^{(j\to i)} \sum_{\tau=0}^{q-1} \delta(u - e^{(\tau)}) + (1 - \eta^{(j\to i)})\delta(u). \tag{9.29}$$

A ce niveau, XOR-SAT se distingue à nouveau puisque pour ce modèle les variables non fixées ($u = 0$) sont nécessairement non biaisées ($\psi = 1/2$), de sorte qu'aucune information n'est perdue lors de la projection de R à Q ; ceci explique que l'entropie puisse se calculer sans référence à des champs évanescents dans ce modèle [MRTZ03]. De même, les champs évanescents sont triviaux dans le cas des systèmes à contraintes dures pour lesquels $\eta_0 \equiv 1 - \sum_a \eta_a = 0$, signifiant que tous les nœuds ont des valeurs imposées à l'intérieur de chaque amas.

Dans ce cadre, la mise en correspondance de tout système avec un système étendu [BZ04], dont la description liquide coïncide avec la description à un pas du système original, s'interprète simplement. Elle consiste en effet à introduire un $(q+1)$-ème « état joker » qui corresponde à $u = 0$ et d'ajouter les contraintes supplémentaires nécessaires pour reproduire exactement la récursion des $\eta^{(j\to i)}$. Par construction, le système étendu est ainsi à contraintes dures, et son potentiel $\phi_0(\beta)$ à température finie correspond exactement au potentiel à un pas « directement à température nulle », c'est-à-dire en ignorant les contributions entropiques, $\phi(y)$, du système initial.

9.4 Distances

Le scénario à un pas est associé à une géométrie de l'espace des solutions décrite par deux distances distinctes, l'une entre solutions d'un même amas, l'autre entre solutions d'amas différents. On envisage ici le calcul de ces distances typiques ainsi que celui des grandes déviations qui leur sont associées, qui permet une description détaillée de la structure de l'espace des phases vitreuses.

Recouvrements

La *distance* entre deux configurations σ et σ' est définie comme la fraction de nœuds dont les variables ont des valeurs différentes,

$$d(\sigma, \sigma') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (1 - \delta_{\sigma,\sigma'}). \tag{9.30}$$

Elle est directement reliée au *recouvrement* entre σ et σ', qui exprime la fraction de nœuds dont les variables ont des valeurs communes, $q(\sigma, \tau) = 1 - d(\sigma, \tau)$. On s'intéresse d'abord ici aux distances typiques, ou, de façon équivalente, aux recouvrements typiques. Dans ce contexte, il est commode de représenter la variable dynamique $\sigma_i \in \{0, 1 \ldots, q-1\}$ par un vecteur $\vec{\sigma}_i$ à q dimensions tel que $\sigma_i = \tau$ soit équivalent à $\vec{\sigma}_i = e^{(\tau)}$, avec par exemple pour $q = 2$, $\vec{\sigma}_i \in \{(1,0),(0,1)\}$. Cette notation permet ainsi d'écrire

$$q(\sigma, \sigma') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \vec{\sigma}_i . \vec{\sigma}'_i. \tag{9.31}$$

Au niveau liquide, toute l'information est contenue dans les probabilités $\Psi_{\sigma_i}^{(i)}$ qu'un nœud i adopte les différentes valeurs σ_i. En se limitant pour simplifier aux graphes simples, et en se plaçant à une température β fixée, ces probabilités s'expriment en fonction des champs de cavité donnés comme en (5.35) par

$$\psi_{\sigma_i}^{(i \to 0)} = e^{-\Delta\phi^{(i \to 0)}} \prod_{j \in i-0} \sum_{\sigma_j} \psi_{\sigma_j}^{(j \to i)}, \tag{9.32}$$

selon

$$\Psi_{\sigma_i}^{(i)} = e^{-\Delta\phi^{(i)}} \prod_{j \in i} \sum_{\sigma_j} \psi_{\sigma_j}^{(j \to i)}. \tag{9.33}$$

Si $\mathcal{P}(\Psi)$ désigne la distribution spatiale de nœud en nœud des $\Psi^{(i)}$, le recouvrement liquide vaut donc

$$q_{\text{liq}} = \int d\Psi \mathcal{P}(\Psi) \Psi^2. \tag{9.34}$$

À température infinie par exemple, où toutes les couleurs sont équiprobables, $\Psi_\tau^{(i)} = 1/q$ pour tous i et τ, d'où $q_{\text{liq}} = 1/q$.

Dans une phase vitreuse avec structure à un pas, la distribution spatiale $\mathcal{P}(\Psi)$ doit être remplacée par une distribution $\mathcal{P}[P(\Psi)]$, où $\mathcal{P}$ porte sur l'espace mais P sur les amas ; différentes moyennes sont alors accessibles :

- Moyenne thermique sur les configurations d'équilibre, au site i dans l'amas α, notée $\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha$, décrite par $\Psi^{(i)}$;
- Moyenne vitreuse sur les amas α, au site i, notée $\overline{\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha}^\alpha$, décrite par $P^{(i)}(\Psi)$;
- Moyenne spatiale sur i, notée $\mathbb{E}_i[\overline{\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha}^\alpha]$, décrite par $\mathcal{P}[P]$.

À partir de ces définitions, les recouvrements intra et inter-amas s'écrivent

$$\begin{aligned} q_{\text{intra}} &= \mathbb{E}_i\left[\overline{\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha}^\alpha\right] = \mathbb{E}_i\left[\left(\overline{\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha}^\alpha\right)^2\right], \\ q_{\text{inter}} &= \mathbb{E}_i\left[\overline{\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\alpha\langle\vec{\sigma}_i\rangle_\beta}^{\alpha\beta}\right] \end{aligned} \tag{9.35}$$

et s'expriment comme

$$\begin{aligned} q_{\text{intra}} &= \int \mathcal{D}P\mathcal{P}[P]\left(\int d\Psi P(\Psi)\Psi^2\right), \\ q_{\text{inter}} &= \int \mathcal{D}P\mathcal{P}[P]\left(\int d\Psi P(\Psi)\Psi\right)^2. \end{aligned} \tag{9.36}$$

En particulier, une phase vitreuse gelée est caractérisée par $q_{\text{intra}} = 1$, et q_{inter} donné par $q_{\text{liq}}(\beta = \beta_c)$, où β_c localise la crise entropique, ainsi qu'illustré avec les matching multi-partie [MMR04, MMR05].

Fonction de dénombrement

Une description plus précise de la géométrie de l'espace des solutions est donnée par la *fonction de dénombrement* définie, à partir d'une configuration de référence σ^*, et pour chaque distance d, comme le nombre de solutions situées à cette distance,

$$W(d) \equiv \{\sigma : E[\sigma] = 0, d[\sigma, \sigma^*] = d\}. \tag{9.37}$$

Si on ignore la contrainte $E[\sigma] = 0$, ce qui revient formellement à considérer le q-coloriage sur un graphe sans lien ($\gamma = 0$), $W(d)$ correspond à choisir dN nœuds auxquels est assignée une couleur différente de celle de σ^*, ce qui est faisable de $(q-1)$ façons, d'où

$$\begin{aligned} W_0(d) &= \binom{N}{Nd}(q-1)^{dN} \asymp e^{Ns_0(d)}, \\ s_0(d) &= \mathcal{H}_2(d) + d\ln(q-1), \end{aligned} \tag{9.38}$$

où $\mathcal{H}_2(d) = -d\ln d - (1-d)\ln(1-d)$ est comme dans la formule (2.3) l'entropie de Shannon. La courbe $s_0(d)$ est représentée sur la figure 9.2 ; elle est

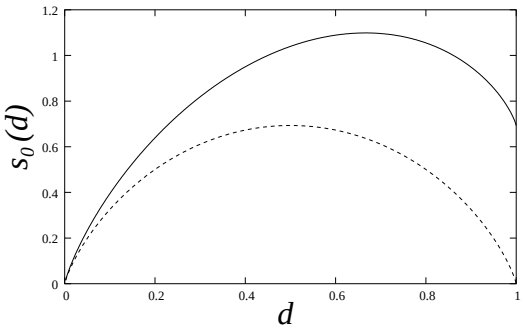

FIG. 9.2 – *Fonctions de dénombrement* $s_0(d)$ données par (9.38) pour $q = 2$ (en pointillés) et $q = 3$ (en trait plein). La fonction entropique $s_0(d)$ est conjuguée à la fonction de grandes déviations $L_0(d) = \ln q - s_0(d)$.

maximum pour $d = (q-1)/q$, qui s'interprète comme la distance typique entre deux configurations prises au hasard.

Plus généralement, en partant du principe entropique

$$W(d) \asymp e^{N s(d)}, \tag{9.39}$$

la méthode de cavité à température finie β_D permet d'obtenir $s(d)$ par l'intermédiaire de sa transformée de Legendre. Cela revient à considérer le système dont les configurations sont définies comme les $\sigma \in \mathcal{C}$ telles que $E[\sigma] = 0$, et dont la fonction coût est donnée par $E'[\sigma] = N d[\sigma^*, \sigma]$. Ce système est décrit par les équations

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \frac{e^{-\beta_D(1-\delta_{\sigma_i,\bar{\sigma}_i})} \prod_{b\in a-i} \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)}}{\sum_\tau e^{-\beta_D(1-\delta_{\tau,\bar{\sigma}_i})} \prod_{b\in i-a} \nu_\tau^{(b\to i)}}, \\ \nu_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \sum_{\sigma_{b-i}} \prod_{j\in b-i} \psi_{\sigma_j}^{(j\to b)}. \end{aligned} \tag{9.40}$$

auxquelles sont associés les déplacements

$$\begin{aligned} \Delta\phi^{(i\to a)} &= -\ln \sum_\tau e^{-\beta_D(1-\delta_{\tau,\bar{\sigma}_i})} \prod_{b\in i-a} \nu_\tau^{(b\to i)}, \\ \Delta\phi^{(i+a\in i)} &= -\ln \sum_\tau e^{-\beta_D(1-\delta_{\tau,\bar{\sigma}_i})} \prod_{a\in i} \nu_\tau^{(a\to i)}, \\ \Delta\phi^{(a)} &= -\ln \sum_{\sigma_a} \prod_{i\in a} \psi_{\sigma_i}^{(i\to a)}. \end{aligned} \tag{9.41}$$

Avant d'effectuer une moyenne sur les graphes dans le calcul des potentiels il est nécessaire de moyenner sur la référence σ^*. Un autre point de vue, adopté

dans [MPR05a], consiste à se placer sur un (grand) graphe donné, choisir une configuration de référence typique (c'est-à-dire au hasard) et calculer les champs par une procédure de passage de message.

Amas à distance donnée

En présence d'une phase vitreuse, l'approche liquide est cependant insuffisante pour obtenir $s(d)$ si les amas pertinents sont en nombre subexponentiel. Dans un tel cas, il devient nécessaire d'introduire une complexité $\Sigma(d)$ décrivant le nombre d'amas à distance donnée d. Le calcul de cette complexité peut s'effectuer en raisonnant directement à température nulle, c'est-à-dire avec des champs entiers, puisqu'aucune information sur la structure interne des amas n'est requise ; pour obtenir l'intégralité de la courbe $\Sigma(d)$, il est cependant nécessaire d'envisager à la fois le problème de minimisation associé ($\beta_D \to +\infty$) et celui de maximisation ($\beta_D \to -\infty$).

En préalable aux calculs de cavité, il est instructif de résoudre un modèle jouet élémentaire. Soit donc à considérer une caricature d'espace des solutions vitreux, constitué de q^M boules avec $M = RN$, toutes de rayon r, et dont les centres sont répartis aléatoirement dans l'hypercube de dimension q^N. Un point étant choisi au hasard, on peut d'abord évaluer le nombre $C(d)$ de centres à distance d. À partir du premier moment

$$\mathbb{E}C(d) = q^M \binom{N}{d} q^{-N} \asymp e^{N[R-1+\mathcal{H}_2(d)]}, \tag{9.42}$$

l'argument déjà invoqué pour le REM en 3.1 fournit pour la valeur typique $\bar{C}(d) \asymp e^{N\ell(d)}$ où $\ell(d)$ coïncide avec $R - 1 + \mathcal{H}_2(d)$ dans l'intervalle $[d_m, d_M]$ où cette fonction est positive, et vaut zéro en dehors. La fonction de dénombrement typique $W(d) \asymp e^{N\Sigma(d)}$ s'en déduit alors, avec

$$\Sigma(d) = \max_{x \in [d-r, d+r]} \ell(x). \tag{9.43}$$

La complexité $\Sigma(d)$, représentée figure 9.3, possède trois distances caractéristiques : les distances $d_m - r$ et $d_M + r$ aux amas les plus proches et les plus lointains, et la largeur $2r$ du plateau autour de la distance typique des centres. Ce calcul simple met ainsi en évidence une caractéristique essentielle de $\Sigma(d)$, à savoir la présence d'un plateau dont la largeur reflète le diamètre typique des amas.

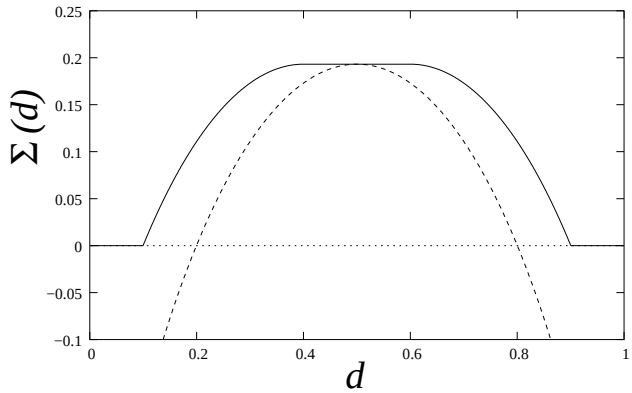

FIG. 9.3 – *Complexité $\Sigma(d)$ pour le modèle jouet de boules aléatoirement réparties dans l'hypercube.* En trait plein $\Sigma(d)$ donnée par (9.43) et en pointillé $R-1+\mathcal{H}(d)$ (avec ici $R=1/2$ et $r=1/10$).

Dans le formalisme de cavité, le calcul de $\Sigma(d)$ s'opère par le truchement du potentiel $\phi(\lambda)$ donné par

$$e^{-N\phi(\lambda)} = \int dd e^{N[\Sigma(d)-\lambda d]}. \tag{9.44}$$

S'agissant fondamentalement d'un problème d'optimisation, les équations des champs découlent du formalisme général exposé en 5.2,

$$\begin{aligned} g_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \sum_{b\in i-a} v_{\sigma_i}^{(b\to i)} + 1 - \delta_{\sigma_i,\bar{\sigma}_i}, \\ v_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \min_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \mathcal{E}_b[\sigma_b]=0}} \left(\sum_{j\in b-i} g_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) - \sum_{j\in b-i} \min_{\sigma_j} \left(g_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right), \end{aligned} \tag{9.45}$$

où $\mathcal{E}_b$ fait référence aux coûts du problème initial. Les notations g et v sont destinées à souligner leur différence avec les champs des h et u du problème initial (cette distinction n'étaient toutefois pas faite à propos du calcul liquide).

$$\Delta D^{(i\to a)} = \min_{\sigma_i} g_{\sigma_i}^{(i\to a)} = \min_{\sigma_i} \left(\sum_{b\in i-a} v_{\sigma_i}^{(b\to i)} + 1 - \delta_{\sigma_i,\bar{\sigma}_i} \right) \tag{9.46}$$

$$\begin{aligned} \Delta D^{(i+a\in i)} &= \min_{\sigma_i} \left(\sum_{a\in i} v_{\sigma_i}^{(a\to i)} + 1 - \delta_{\sigma_i,\bar{\sigma}_i} \right) \\ \Delta D^{(a)} &= \min_{\substack{\sigma_a,\\ \mathcal{E}_a[\sigma_a]=0}} \left(\sum_{i\in a} g_{\sigma_i}^{(i\to a)} \right) - \sum_{i\in a} \min_{\sigma_i} g_{\sigma_i}^{(i\to a)}. \end{aligned} \tag{9.47}$$

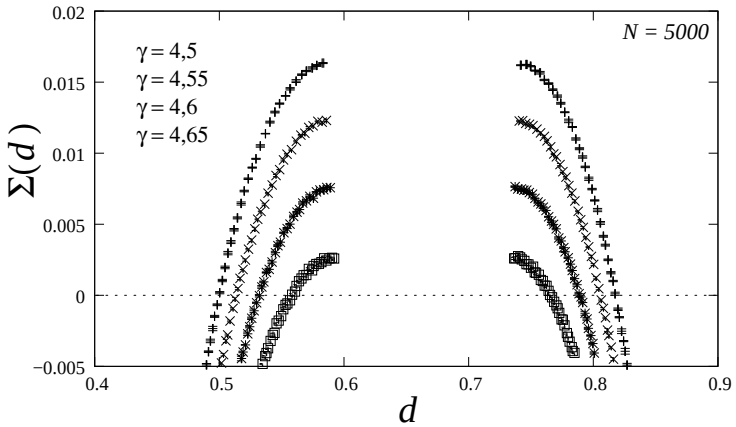

FIG. 9.4 – *Fonctions $\Sigma(d)$ pour le 3-coloriage sur graphes poissonniens*, tracées pour 4 graphes de taille $N = 5000$ appartenant à la phase SAT-dure. Ces courbes font apparaître un plateau analogue à celui présenté sur la figure 9.3 ; ce plateau est centré sur la distance typique $d = 2/3$ et possède une largeur dont la valeur est en accord avec un calcul du recouvrement interne des amas.

Le problème de maximisation s'obtient en remplaçant formellement les « min » par des « max ». Appliquées au 3-coloriage, ces formules permettent le calcul de la fonction $\Sigma(d)$ représentée sur la figure 9.4 ; comme pour le modèle jouet, $\Sigma(d)$ présente un plateau dont la largeur s'interprète comme le diamètre des amas.

Amas et solutions d'énergie non nulle

Pour finir, on peut envisager différentes généralisations du calcul précédent. Une première généralisation consiste à compter non plus les amas mais les solutions : comme dans le cas entropique, ceci se fait par le biais de champs évanescents, en passant par un formalisme à température finie. Une seconde généralisation, moins immédiate, consiste à compter des amas d'énergie non nulle, et est esquissée ici.

Pour compter les amas d'énergie ϵ donnée à distance d elle aussi fixée, on reprend l'idée de définir un problème d'optimisation auxiliaire à partir du problème initial. Pour cela, deux jeux de champs de cavité sont désormais nécessaires. Le premier jeu, noté (h, u), décrit le problème initial et satisfait des équations de cavité faisant intervenir un paramètre y destiné à fixer l'énergie des amas. Le second jeu, noté (g, v), concerne le problème de distance défini sur le premier problème, et dépend explicitement des (h, u). Étant donné l'interprétation des champs (h, u) comme déplacements d'énergie, la récursion

pour les déplacement de distance $D_{\sigma_i}^{(i\to a)}$ associé au second problème s'écrit

$$D_{\sigma_i}^{(i\to a)} = \sum_{b\in i-a} \left[\min_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \sigma_j\in\arg\min_\tau h_\tau^{(j\to b)}}} \left(\sum_{j\in b-i} D_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) \right] + 1 - \delta_{\sigma_i,\sigma_i^*}, \tag{9.48}$$

relation à partir desquelles toutes les autres formules découlent,

$$\begin{aligned} g_{\sigma_i}^{(i\to a)} &= \sum_{b\in i-a} v_{\sigma_i}^{(b\to i)} + 1 - \delta_{\sigma_i,\sigma_i^*}, \\ v_{\sigma_i}^{(b\to i)} &= \min_{\substack{\sigma_{b-i},\\ \sigma_j\in\arg\min_\tau h_\tau^{(j\to b)}}} \left(\sum_{j\in b-i} g_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right) - \sum_{j\in b-i} \min_{\sigma_j} \left(g_{\sigma_j}^{(j\to b)} \right). \end{aligned} \tag{9.49}$$

$$\begin{aligned} \Delta D^{(i+a\in i)} &= \min_{\sigma_i} \left(\sum_{a\in i} v_{\sigma_i}^{(a\to i)} + 1 - \delta_{\sigma_i,\bar{\sigma}_i} \right) \\ \Delta D^{(a)} &= \min_{\substack{\sigma_a,\\ \mathcal{E}_a[\sigma_a]=\Delta E^{(a)}}} \left(\sum_{i\in a} g_{\sigma_i}^{(i\to a)} \right) - \sum_{i\in a} \min_{\sigma_i} g_{\sigma_i}^{(i\to a)}. \end{aligned} \tag{9.50}$$

Ce calcul, puisqu'il ne concerne que les amas, s'effectue au moyen des seuls champs entiers. Lorsque $y \to \infty$, l'effet des champs de cavité (h, u) est d'imposer $\Delta E^{(a)} = 0$, $\forall a$, ce qui ramène au dénombrement des amas d'énergie nulle discuté dans la section précédente. Finalement, il est également possible de compter des solutions d'énergie donnée à distance fixée en introduisant comme précédemment une température finie et des champs évanescents.

Notes et références

Le contenu des deux premières sections de ce chapitre a été développé en relation avec l'étude des matchings multi-partie [MMR04, MMR05] et celle des deux suivantes en relation avec l'étude de la géométrie des phases vitreuses dans les problèmes de satisfaction de contraintes [MPR05a].

Le modèle jouet de boules aléatoirement distribuées dans l'hypercube généralise le modèle de codes aléatoires de Shannon au cas des boules de rayon r non nul [BJ02].

Les expressions de $q_{\text{intra}} \equiv q_{\alpha\alpha}$ et $q_{\text{inter}} \equiv q_{\alpha\beta}$ données par (9.36) s'étendent aux multi-recouvrements du type

$$q_{\alpha_1\ldots\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{r-1}\alpha_r\ldots\alpha_r} = \int \mathcal{D}P\mathcal{P}[P] \prod_{i=1}^{r} \int d\Psi P(\Psi)\Psi^{n_i}, \tag{9.51}$$

où n_i indique le nombre de « répliques » α_i identiques. À la différence des systèmes complètement connectés où $P(\Psi)$ est gaussien, il n'est pas possible d'exprimer en général ces multi-recouvrements en terme des seuls recouvrements à deux amas, q_{intra} et q_{inter}. C'est cette différence qui complique techniquement l'utilisation de la méthode des répliques pour les systèmes à connectivité finie.

Conclusion

Au delà des graphes aléatoires

Si l'exposé s'est concentré sur l'étude des grandes déviations dans les modèles sur graphes aléatoires, qui regroupent notamment une large classe de problèmes d'optimisation, les méthodes présentées admettent également des applications au delà du cadre des graphes (ou hypergraphes) aléatoires. Elles s'accommodent notamment de la présence de boucles locales, pourvu que la taille de celles-ci soit bornée et que la structure globale reste diluée ; un exemple d'arbre associé à un tel graphe (appelé *cactus*) est dessiné sur la figure 9.5. Un autre exemple est associé aux modèles de verre sur réseau [BM02, RBMM04] : les particules occupent les nœuds d'un graphe simple, mais leurs interactions étant à plusieurs corps, l'hypergraphe qui leur est associé possède des boucles locales, comme représenté sur la figure 9.6. Du point de vue technique, le traitement de ces boucles nécessite d'introduire des champs de cavité supplémentaires : le seul état σ_i de la racine devient en effet insuffisant à spécifier le surcoût énergétique généré par son branchement à un nouveau nœud. Ainsi pour les verres sur réseau, deux champs sont requis bien que, comme dans le modèle de sphères dures, les variables dynamiques soient les nombres d'occupation, qui ne prennent que deux valeurs $n_i \in \{0, 1\}$.

Les méthodes développées pour les graphes aléatoires sont également utiles pour étudier certains modèles sur graphes complètement connectés, c'est-à -dire dont chaque nœud est relié à tous les autres. Ces graphes sont *a priori* les plus à même de mettre en défaut l'approximation des arbres, mais dans des modèles tels que les matchings [MMR04, MMR05], les différents liens représentent des interactions d'intensités très variables, ce qui confère au système, lorsque les liens d'intensité les plus faibles sont ignorés, une structure effective diluée. La solution sur graphe complet se formule alors comme une limite de solutions de modèles sur graphes aléatoires : cette procédure de passage à la limite, qui s'opère par l'intermédiaire d'un relâchement des contraintes, est présentée pour les matchings dans [MMR05] ; elle inter-

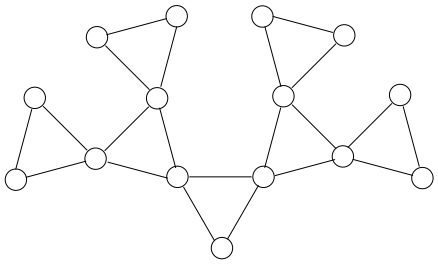

FIG. 9.5 – *Cactus.* Ce graphe est un exemple d'arbre associé à un graphe aléatoire contenant des boucles de taille bornée (ici de longueur 3), et pour lequel une généralisation de l'approximation des arbres s'applique. Une étude du modèle de sphères dures sur de tels graphes par la méthode de cavité a ainsi été menée dans [WH03].

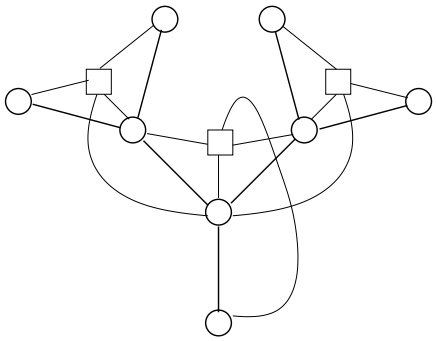

FIG. 9.6 – *Hypergraphe associé aux modèles de verre sur réseau.* Les particules sont contraintes à admettre au plus ℓ voisines. Excepté pour le cas $\ell = 0$ qui définit le modèle de sphères dures, ces interactions nécessitent d'inclure chaque nœud et tous ses voisins dans une clause commune.

vient également sous une forme différente dans la solution mathématique au matching bipartie proposée par Aldous [Ald01]. Enfin, la méthode de cavité s'applique aussi aux modèles sur graphes complètement connectés dont les liens portent des interactions d'intensité de même ordre, tel le modèle de verre de spins SK ; dans ce cas toutefois l'approximation des arbres est remplacée par une prise en compte en moyenne de l'effet collectif des différents nœuds [MPV87].

De l'optimisation aux systèmes vitreux

Du point de vue physique, les graphes les mieux à même de modéliser les phénomènes réels sont les réseaux euclidiens de dimension finie d, et plus particulièrement ceux de dimension $d = 3$. Ces graphes se distinguent des structures en arbre par la présence de boucles à toutes les échelles avec un nombre de nœuds à distance r variant comme $\mathcal{N}(r) \sim r^d$, au lieu de $\mathcal{N}(r) \sim (\langle k \rangle - 1)^r$ pour un arbre (auquel est donc formellement associé une dimension infinie, $d = \infty$) ; la seule exception concerne les réseaux unidimensionnels ($d = 1$) qui s'identifient à des arbres de connectivité $k = 2$. Les modèles sur réseaux euclidiens de dimension $d \geq 2$ sont en général difficilement accessibles aux approches analytiques, et une stratégie communément suivie consiste à les résoudre dans des *approximations de champ moyen.* Celles-ci traitent exactement les corrélations à courte distance, $r \leq r_{\mathrm{cm}}$, mais ne prennent en compte

qu'en moyenne, de façon autocohérente, les corrélations à plus grande portée, $r > r_{\mathrm{cm}}$. D'un point de vue géométrique, les approximations de champ moyen peuvent être associées avec les graphes sur lesquels elles sont exactes. Ainsi, l'approximation de Curie-Weiss pour laquelle $r_{\mathrm{cm}} = 0$ est associée aux graphes complètement connectés. Les graphes aléatoires réguliers correspondent eux à l'approximation de Bethe-Peierls [Bet35], avec $r_{\mathrm{cm}} = 1$. Les approximations suivantes avec $r_{\mathrm{cm}} \geq 2$, dont une formulation est donnée par la *méthode variationnelle des clusters* initiée par Kikuchi [Kik51], sont également associées à des structures globalement en arbre, mais incluant des boucles locales de taille croissante. À l'instar des matchings, les modèles sur réseaux euclidiens s'expriment ainsi également comme limite de modèles sur graphes aléatoires [Sch83] ; le traitement par la cavité des approximations successives se fait toutefois au détriment d'une augmentation exponentielle du nombre de champs de cavité, ce qui proscrit une prise de limite explicite.

Comme toute approximation, le champ moyen possède des limites ; l'appréciation de celles-ci pour les systèmes désordonnés s'avère cependant tout aussi cruciale que délicate. Ainsi, la physique des verres de spins [MPV87] dont est issue la méthode de cavité est-elle un domaine où la question de la pertinence des prédictions du champ moyen pour les systèmes physiques n'est pas tranchée, et cela malgré plus d'un quart de siècle de recherches intensives. Certains artefacts du champ moyen sont toutefois clairement identifiés ; ainsi, il ne fait pas de doute qu'aucun modèle euclidien ne possède une complexité non triviale, puisque des états métastables dont l'énergie libre diffère extensivement ne peuvent exister au sens thermodynamique en dimension finie. Une phase d'énergie libre extensivement plus haute est en effet instable par nucléation, qui entre en jeu dès que les effets de surfaces peuvent devenir négligeables devant ceux de volume. Ainsi, le scénario de transition de phase aléatoire du premier ordre réalisé dans le cadre du champ moyen et qui entretient de nombreuses analogies avec la physique des verres structuraux [KW87a, KW87b, KT87a, KT87b, KTW89, Méz02, BB04] ne s'applique certainement pas tel quel aux systèmes réels. En particulier, la transition dite dynamique qui marque l'entrée dans un « liquide » constitué d'un nombre exponentiel d'amas métastables est thermodynamiquement exclue. Il reste cependant envisageable qu'une transition analogue existe vers une phase constituée de vallées, c'est-à-dire d'ensembles de configurations séparées par des barrières énergétiques divergentes dans la limite thermodynamique, mais non extensives ; une telle situation a ainsi été évoquée en 8.3 à propos des modèles de polymères dirigés en deux dimensions ou de matchings euclidiens. Physiquement, sur une échelle de temps suffisamment courte, un tel système se comporte du point de vue dynamique comme en

présence d'amas, donc en conformité avec les prédictions de champ moyen. À des temps plus grands néanmoins, les processus d'activation doivent être pris en compte, qui restaurent l'ergodicité en permettant au système d'explorer différentes vallées.

Enfin, si une transition dynamique est exclue en dimension finie au sens thermodynamique, une transition statique de type liquide-verre reste elle possible, et elle est notamment établie pour les systèmes de type verres de spin. La question se pose différemment pour les systèmes de type verres structuraux, qui sont, par définition, dépourvus de désordre gelé. Tous les systèmes (non quantiques) sans désordre étudiés jusqu'à présent ont en effet un fondamental cristallin, c'est-à -dire périodique, même si rien *a priori* n'exclut la possibilité d'un fondamental non cristallin (et donc nécessairement fortement dégénéré). Pour les systèmes possédant une phase cristalline, une transition de type liquide-verre ne peut se produire qu'au niveau du liquide surfondu qui, par définition, n'est qu'une phase métastable. Pour les verres structuraux cependant, le temps de relaxation vers le cristal excède les temps expérimentaux, suggérant que le cristal puisse être ignoré. De ce point de vue, un des intérêts des modèles sur graphes aléatoires réguliers est d'offrir la possibilité d'éliminer la phase cristalline, et de permettre ainsi d'étudier le liquide surfondu au moyen de la thermodynamique d'équilibre : en effet, les graphes aléatoires réguliers combinent une structure localement homogène qui s'apparente à celle des graphes euclidiens et une structure de boucles à grande échelle qui frustre les phases ordonnées. Le champ moyen suggère qu'une transition liquide-verre puisse se produire à partir du liquide surfondu ; celle-ci n'est cependant pas accessible directement aux expériences, et fait face à des théories concurrentes qui attribuent la divergence des temps de relaxation du liquide à des phénomènes purement cinétiques, indépendants de toute singularité thermodynamique.

Il convient finalement de souligner que les applications physiques de la méthode de cavité ne sont pas limitées aux verres de spins et verres structuraux. Il a ainsi été mentionné en 6.1 que le problème de la transition de rigidité admet une formulation en terme de transition de satisfaisabilité [BBLS05a] ; plus spécifiquement, le problème de l'adaptation aux contraintes mécaniques des réseaux aléatoirement connectés offrent une réalisation physique de grandes déviations sur la structure externe [Riv05a].

Perspectives

Les méthodes présentées, bien qu'issues de la physique, possèdent cependant un champ d'application qui dépasse largement la seule physique. Le sujet qui a servi de motivation au début de ce texte est ainsi celui de la complexité algorithmique des problèmes d'optimisation. Beaucoup de ces problèmes ont l'intérêt de se formuler explicitement en termes de graphes aléatoires : l'approximation des arbres possède alors toute sa pertinence et les subtilités associées aux approximations de champ moyen ne se posent pas. En conséquence, les prédictions de la cavité sont susceptibles d'être exactes, ainsi que cela a pu être démontré dans quelques cas particuliers [Tal03, Ald01, BG01, MRTZ03, GNS03]. En regard des questions soulevées au premier chapitre, l'approche de la physique statistique a l'intérêt de proposer un point de vue alternatif à la théorie de la NP-complétude, qui se fonde sur la structure de l'espace des phases d'une instance particulière, plutôt que sur le temps mis par un algorithme pour résoudre l'instance la plus difficile d'un ensemble donné. La pertinence de ce point de vue est renforcée par les progrès récents auquel il a conduit concernant la conception d'algorithmes performants [MZ02a]. Il reste toutefois, en vue des objectifs initiaux, que les méthodes utilisées, par nature statistiques, ne permettent pas la prise en compte des structures non aléatoires propres aux problèmes de la « vie réelle ».

Sur un plan plus large, un intérêt incontestable des avancées menées par la physique statistique est d'offrir un cadre conceptuel et méthodologique commun pour aborder de façon unifiée une variété de problèmes d'origines diverses. Cette thèse, en traitant sous l'angle des grandes déviations de questions à l'intersection de la théorie des systèmes vitreux et de la complexité algorithmique, s'inscrit ainsi dans le mouvement de rapprochement de la physique statistique, de l'informatique et de la théorie des probabilités, qui s'est particulièrement accentué ces dernières années autour des transitions de phase dans les systèmes complexes. L'application récente de ce même cadre théorique à des problèmes issus de la théorie de l'information (analyse de codes correcteurs d'erreur [KS04], schémas de compression de données [BBCZ04, CMZ05]) ou de la biologie (modèles d'ARN [MMM04a, MMM04b], modélisation de réseaux de gènes [CLP$^+$04]) suggère que cette convergence des disciplines n'en est qu'à son début.

Reproductions d'articles

Annexe A

Glass models on Bethe lattices

O. Rivoire, G. Biroli, O. C. Martin, M. Mézard

Eur. Phys. J. B 37 (2004) 55-78

Annexe B

Properties of atypical graphs from negative complexities

O. Rivoire

J. Stat. Phys. 117 (2004) 453-476

Annexe C

Frozen glass phase in the multi-index matching problem

O. C. Martin, M. Mézard, O. Rivoire

Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 217205

Annexe D

Random multi-index matching problems

O. C. Martin, M. Mézard, O. Rivoire

prépublication (2005)

Annexe E

The cavity method for large deviations

O. Rivoire

J. Stat. Mech. (2005) P07004

Annexe F

Landscape of solutions in constraint satisfaction problems

M. Mézard, M. Palassini, O. Rivoire

prépublication (2005)

Bibliographie

[AB05] D. J. Aldous and A. Bandyopadhyay. A survey of max-type recursive distributional equations. *Annals of Applied Probability*, 15 :1047–1110, 2005.

[AF99] D. Achlioptas and E. Friedgut. A sharp threshold for k-colorability. *Rand. Struct. and Algorithms*, 14 :63–70, 1999.

[Ald01] D. J. Aldous. The $\zeta(2)$ limit in the random assignment problem. *Rand. Struct. Algo.*, 18 :381–418, 2001.

[AN72] K. B. Athreya and P. E. Ney. *Branching processes.* Springer, New York, 1972.

[AP03] D. J. Aldous and A. G. Percus. Scaling and universality in continuous length combinatorial optimization. *PNAS*, 100 :11211–11215, 2003.

[Ban04] A. Bandyopadhyay. Bivariate uniqueness in the logistic recursive distributional equation. 2004. math.PR/0401389.

[Bax82] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics.* Academic Press, 1982.

[BB04] J. P. Bouchaud and G. Biroli. On the Adam-Gibbs-Kirkpatrick-Thirumalai-Wolynes scenario for the viscosity increase of classes. *J. Chem. Phys.*, 121 :7347–7354, 2004.

[BBCZ04] D. Battaglia, A. Braunstein, J. Chavas, and R. Zecchina. Source coding by efficient selection of ground states clusters. 2004. cond-mat/0412652.

[BBLS05a] J. Barré, A. R. Bishop, T. Lookman, and A. Saxena. The cavity method for the rigidity transition. *J. Stat. Phys.*, 118 :1057, 2005.

[BBLS05b] J. Barré, A. R. Bishop, T. Lookman, and A. Saxena. On adaptability and intermediate phase in randomly connected networks. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :208701, 2005.

[Bet35] H. A. Bethe. Statistical physics of superlattices. *Proc. Roy. Soc. London A*, 150 :552–575, 1935.

[BG01] M. Bauer and O. Golinelli. Core percolation in random graphs : a critical phenomena analysis. *Eur. Phys. J. B*, 24 :339–352, 2001.

[Big77] J. D. Biggins. Chernoff theorem in the branching random walk. *J. Appl. Probab.*, 14 :630–636, 1977.

[BJ02] A. Barg and G. D. Forney Jr. Random codes : minimum distances and error exponents. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 48 :2568–2573, 2002.

[BM02] G. Biroli and M. Mézard. Lattice glass models. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :025501, 2002.

[BMP+03] A. Braunstein, R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt, and R. Zecchina. Polynomial iterative algorithms for coloring and analyzing random graphs. *Phys. Rev. E*, 68 :036702, 2003.

[BMW00] G. Biroli, R. Monasson, and M. Weigt. A variational description of the ground state structure in random satisfiability problems. *Eur. Phys. J. B*, 14 :551, 2000.

[Bol01] B. Bollobás. *Random graphs.* Cambridge University Press, second edition, 2001.

[BT86] B. Bollobás and A. Thomason. Threshold functions. *Combinatorica*, 7 :35–38, 1986.

[BZ04] A. Braunstein and R. Zecchina. Survey propagation as local equilibrium equations. *J. Stat. Mech.*, page P06007, 2004.

[CDMM03] S. Cocco, O. Dubois, J. Mandler, and R. Monasson. Rigorous decimation-based construction of ground pure states for spin glass models on random lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :047205, 2003.

[CGP05] A. Cavagna, I. Giardina, and G. Parisi. Cavity method for supersymmetry breaking spin glasses. *Phys. Rev. B*, 71 :024422, 2005.

[CKT91] P. Cheeseman, B. Kanefsky, and W. M. Taylor. Where the really hard problems are. *Proceedings IJCAI-91*, pages 163–169, 1991.

[CLP+04] L. Correale, M. Leone, A. Pagnani, M. Weigt, and R. Zecchina. Complex regulatory control in boolean networks. 2004. cond-mat/0412443.

[CLR05] A. Crisanti, L. Leuzzi, and T. Rizzo. Complexity in mean-field spin-glass models : Ising p-spin. *Phys. Rev. B*, 71 :0942024, 2005.

[CMMS04] S. Cocco, R. Monasson, A. Montanari, and G. Semerjian. Approximate analysis of search algorithms with "physical" methods. In A. Percus G. Istrate, C. Moore, editor, *Phase transitions and Algorithmic complexity*. 2004.

[CMZ05] S. Ciliberti, M. Mézard, and R. Zecchina. Lossy data compression with random gates. 2005. cond-mat/0504509.

[CT91] T. M. Cover and J. A. Thomas. *Elements of information theory*. Wiley, New-York, 1991.

[Der80] B. Derrida. Random-energy model : Limit of a family of disordered models. *Phys. Rev. Lett*, 45 :79–82, 1980.

[Der81] B. Derrida. Random-energy model : An exactly solvable model of disordered systems. *Phys. Rev. B*, 24 :2613–2626, 1981.

[Der90] B. Derrida. Directed polymers in a random medium. *Physica A*, 163 :71–84, 1990.

[DJTM99] P.M. Duxbury, D.J. Jacobs, M.F. Thorpe, and C. Moukarzel. Floppy modes and the free energy : Rigidity and connectivity percolation on Bethe lattices. *Phys. Rev. E*, 59 :2084–2092, 1999.

[DS88] B. Derrida and H. Spohn. Polymers on disordered trees, spin glasses, and traveling waves. *J. Stat. Phys.*, 51 :817–840, 1988.

[Dux03] P.M. Duxbury. Percolation of frozen order in glassy combinatorial problems. 2003. cond-mat/0308211.

[DZ93] A. Dembo and O. Zeitouni. *Large Deviations Techniques and Applications*. Jones and Bartlett, Boston, 1993.

[Ell85] R. S. Ellis. *Entropy, Large Deviations, and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, New-York, 1985.

[Ell95] R. S. Ellis. An overview of the theory of large deviations and applications to statistical physics. *Scand. Acturial J.*, 1 :97–142, 1995.

[EMH04] A. Engel, R. Monasson, and A. K. Hartmann. On large deviation properties of Erdős-Rényi random graphs. *J. Stat. Phys.*, 117 :387, 2004.

[ER60] P. Erdős and A. Rényi. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci.*, 5 :17–61, 1960.

[FA86] Y. Fu and P. W. Anderson. Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimization. *J. Phys. A*, 19 :1605–1620, 1986.

[FL03] S. Franz and M. Leone. Replica bounds for optimization problems and diluted spin systems. *J. Stat. Phys.*, 3-4 :535–564, 2003.

[Gar88] E. Gardner. The space of interactions in neural network models. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 21 :257–270, 1988.

[GJ79] M.R. Garey and D.S. Johnson. *Computers and intractability : a guide to the theory of NP-completeness.* Freeman, San Francisco, 1979.

[GM84] D.J. Gross and M. Mézard. The simplest spin glass. *Nucl. Phys. B*, 240 :431, 1984.

[GNS03] D. Gamarnik, T. Nowicki, and G. Swirscsz. Maximum weight independent sets and matchings in sparse random graphs. exact results using the local weak convergence method. 2003. math.PR/0309441.

[HM98] J. Houdayer and O. C. Martin. Droplet phenomenology and mean field in a frustrated disordered system. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :2554–2557, 1998.

[Hop82] J. J. Hopfield. Neural networks and physical systems with emergent collective computational properties. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 79 :2554–2558, 1982.

[JLR00] S. Janson, T. Luczak, and A. Rucinski. *Random graphs.* Wiley, New-York, 2000.

[KFL01] F. R. Kschischang, B. Frey, and H.-A. Loeliger. Factor graphs and the sum-product algorithm. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 47(2) :498–519, 2001.

[Kik51] R. Kikuchi. A theory of cooperative phenomena. *Phys. Rev.*, 81 :988–1003, 1951.

[KM89] W. Krauth and M. Mézard. Storage capacity of memory networks with binary couplings. *J. Phys. France*, 50 :3057–3066, 1989.

[KPW04] F. Krzakala, A. Pagnani, and M. Weigt. Threshold values, stability analysis and high-q asymptotics for the coloring problem on random graphs. *Phys. Rev. E*, 70 :046705, 2004.

[KS04] Y. Kabashima and D. Saad. Statistical mechanics of low density parity check codes. *J. Phys. A*, 37 :R1–R43, 2004.

[KT87a] T.R. Kirkpatrick and D. Thirumalai. Dynamics of the structural glass transition and the p-spin-interaction spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :2091, 1987.

[KT87b] T.R. Kirkpatrick and D. Thirumalai. p-spin-interaction spin-glass models : Connections with the structural glass problem. *Phys. Rev. B*, 36 :5388, 1987.

[KTW89] T.R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, and P.G. Wolynes. Scaling concepts for the dynamics of viscous liquids near an ideal glassy state. *Phys. Rev. A*, 40 :1045, 1989.

[KW87a] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. Connections between some kinetic and equilibrium theories of the glass transition. *Phys. Rev. A*, 35 :3072, 1987.

[KW87b] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. Stable and metastable states in mean-field Potts and structural glasses. *Phys. Rev. B*, 36 :8852–8564, 1987.

[Mer02] S. Mertens. Computational complexity for physicists. *Computing in science and engineering*, 4 :31–47, 2002.

[Méz90] M. Mézard. On the glassy nature of random directed polymers in two dimensions. *J. Physique*, 51 :1831, 1990.

[Méz02] M. Mézard. First steps in glass theory. In Ong and Bhatt, editors, *More is different*. Princeton University Press, 2002.

[MK00] S. N. Majumdar and P. L. Krapivsky. Extremal paths on a random Cayley tree. *Phys. Rev. E*, 62 :7735–7742, 2000.

[MMM04a] A. Montanari, M. Müller, and M. Mézard. The phase diagram of random heteropolymers. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :185509, 2004.

[MMM04b] M. Müller, M. Mézard, and A. Montanari. Glassy phases in random heteropolymers with correlated sequences. *J. Chem. Phys.*, 120 :11233, 2004.

[MMR04] O. C. Martin, M. Mézard, and O. Rivoire. Frozen glass phase in the multi-index matching problem. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :217205, 2004. (Annexe C).

[MMR05] O. C. Martin, M. Mézard, and O. Rivoire. Random multi-index matching problems. 2005. Prépublication (Annexe D).

[MMZ03] S. Mertens, M. Mézard, and R. Zecchina. Threshold values of random k-SAT from the cavity method. 2003. cs.CC/0309020.

[Mon95] R. Monasson. Structural glass transition and the entropy of the metastable states. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :2847, 1995.

[Mon01] A. Montanari. The glassy phase of Gallager codes. *Eur. Phys. J. B.*, 23 :121–136, 2001.

[Mon02] A. Montanari. 2002. Notes non publiées.

[Mos04] E. Mossel. Survey : Information flow on trees. In J. Nestril and P. Winkler, editors, *Graphs, Morphisms and Statistical Physics*, DIMACS series in discrete mathematics and theoretical computer science, pages 155–170, 2004.

[Mou03] C. F. Moukarzel. Rigidity percolation in a field. *Phys. Rev. E*, 68 :056104, 2003.

[MP85] M. Mézard and G. Parisi. Replicas and optimization. *J. Physique*, 46 :L771–L778, 1985.

[MP00] M. Mézard and G. Parisi. Statistical physics of structural glasses. *J. Phys. : Condens. Matter*, 12 :6655–6673, 2000.

[MP01] M. Mézard and G. Parisi. The Bethe lattice spin glass revisited. *Eur. Phys. J. B*, 20 :217, 2001.

[MP03] M. Mézard and G. Parisi. The cavity method at zero temperature. *J. Stat. Phys.*, 111 :1–34, 2003.

[MPR05a] M. Mézard, M. Palassini, and O. Rivoire. Landscape of solutions in constraint satisfaction problems. 2005. Prépublication (Annexe F).

[MPR05b] M. Mézard, M. Palassini, and O. Rivoire. On the geometry of glassy phases in constraint satisfaction problems. 2005. En préparation.

[MPRT04] A. Montanari, G. Parisi, and F. Ricci-Tersenghi. Instability of one-step replica-symmetry-broken phase in satisfiability problems. *J. Phys. A*, 37 :2073, 2004.

[MPV86] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro. SK model : The replica solution without replicas. *Europhys. Lett.*, 1 :77–82, 1986.

[MPV87] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro. *Spin-Glass Theory and Beyond*, volume 9 of *Lecture Notes in Physics*. World Scientific, Singapore, 1987.

[MPWZ02] R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt, and R. Zecchina. Coloring random graphs. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :268701, 2002.

[MRT03] A. Montanari and F. Ricci-Tersenghi. On the nature of the low-temperature phase in discontinuous mean-field spin glasses. *Eur. Phys. J. B*, 33 :339, 2003.

[MRTZ03] M. Mézard, F. Ricci-Tersenghi, and R. Zecchina. Alternative solutions to diluted p-spin models and XORSAT problems. *J. Stat. Phys.*, 111 :505, 2003.

[MZ02a] M. Mézard and R. Zecchina. Random k-satisfiability problem : From an analytic solution to an efficient algorithm. *Phys. Rev. E*, 66 :056126, 2002.

[MZ02b] A. Montanari and R. Zecchina. Optimizing searches via rare events. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :178701, 2002.

[MZK+99] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, and L. Troyansky. Determining computational complexity from characteristic phase transitions. *Nature*, 400 :133–137, 1999.

[Pap94] C. H. Papadimitriou. *Computational complexity.* Addison-Wesley, 1994.

[Pie68] W. P. Pierskalla. The multidimensional assignment problem. *Operations Research*, 16 :422–431, 1968.

[PPR03] A. Pagnani, G. Parisi, and M. Ratiéville. Near optimal configurations in mean field disordered systems. *Phys. Rev. E*, 68 :046706, 2003.

[PS82] C. H. Papadimitriou and K. Steiglitz. *Combinatorial Optimization : Algorithms and Complexity.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1982.

[PSW96] B. Pittel, J. Spencer, and N.C. Wormald. Sudden emergence of a giant k-core in a random graph. *J. Comb. Theory Ser. B*, 67 :111–151, 1996.

[RBMM04] O. Rivoire, G. Biroli, O. C. Martin, and M. Mézard. Glass models on bethe lattices. *Eur. Phys. J. B*, 37 :55–78, 2004. (Annexe A).

[Riv04] O. Rivoire. Properties of atypical graphs from negative complexities. *J. Stat. Phys.*, 117 :453, 2004. (Annexe B).

[Riv05a] O. Rivoire. Adaptability in constraint satisfaction problems. 2005. En préparation.

[Riv05b] O. Rivoire. The cavity method for large deviations. *J. Stat. Mech.*, page P07004, 2005. (Annexe E).

[Riz] T. Rizzo. On the complexity of the Bethe spin glass. cond-mat/0404729.

[RTWZ01] F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt, and R. Zecchina. Simplest random k-satifiablitity problem. *Phys. Rev. E*, 63 :026702, 2001.

[SA92] D. Staufler and A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory.* Taylor and Francis, London, 1992.

[SBT05] M. Sellitto, G. Biroli, and C. Toninelli. Facilitated spin models on Bethe lattice : bootstrap percolation, mode-coupling transition and glassy dynamics. *Eurphys. Lett.*, 69 :496, 2005.

[Sch83] A. G. Schlijper. Convergence of the cluster-variation method in the thermodynamic limit. *Phys. Rev. B*, 27 :6841–6848, 1983.

[Tal03] M. Talagrand. *Spin glasses : A challenge for mathematicians.* Springer, 2003.

[TBF04] C. Toninelli, G. Biroli, and D. S. Fisher. Spatial structures and dynamics of kinetically constrained models of glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :185504, 2004.

[TJCP00] M. F. Thorpe, D. J. Jacobs, M. V. Chubinsky, and J. C. Phillips. Self organization in network glasses. *J. Non-Cryst. Solids*, 859 :266–269, 2000.

[TRL+01] M. F. Thorpe, A. Rader, M. Lei, D. J. Jacobs, and L. A. Kuhn. Predicting flexibility in proteins using constraint theory. *Journal of Molecular Graphics and Modeling*, 19 :60–69, 2001.

[VM84] J. Vannimenus and M. Mézard. On the statistical mechanics of optimization problems of the travelling salesman type. *J. Physique Lett.*, 45 :L1145–L1153, 1984.

[vMS02] J. van Mourik and D. Saad. Random graph coloring : Statistical physics approach. *Phys. Rev. E*, 66 :056120, 2002.

[VQM+04] Y. Vaills, T. Qu, M. Micoulaut, F. Chaimbault, and P. Boolchand. Direct evidence of rigidity loss and self-organisation in silicate glasses. 2004. cond-mat/0406509.

[Wei00] Y. Weiss. Correctness of local probability propagation in graphical models with loops. *Neural Comp.*, 12 :1–41, 2000.

[WH00] M. Weigt and A. K. Hartmann. The number of guards needed by a museum : A phase transition in vertex covering of random graphs. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :6118, 2000.

[WH01] M. Weigt and A. K. Hartmann. Minimal vertex covers on finite-connectivity random graphs : A hard-sphere lattice-gas picture. *Phys. Rev. E*, 63 :056127, 2001.

[WH03] M. Weigt and A. K. Hartmann. Glassy behavior induced by geometrical frustration in a hard-core lattice gas model. *Europhys. Lett.*, 62 :533–539, 2003.

[Wu82] F. Y. Wu. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, 54 :235–268, 1982.

[YFW02] J. S. Yedidia, W. F. Freeman, and Y. Weiss. Constructing free energy approximations and generalized belief propagation algorithms. *technical report TR-2002-35, Mitsubishi Electrical Research Laboratories*, 2002. available at http ://www.merl.com.

[Zho03] H. Zhou. Vertex cover problem studied by cavity method : Analytics and population dynamics. *Eur. Phys. J. B*, 32 :265–270, 2003.

Abstract :

Combinatorial optimization problems lie at the core of the theory of algorithmic complexity. They are also tightly related to a mean-field formulation of lattice models of spin glasses and structural glasses, known as the Bethe approximation. This thesis relies on this parallel to apply to optimization problems an approach originating from the statistical physics of disordered systems, the cavity method. Given an ensemble of instances of an optimization problem, this method allows one to determine the properties of solutions of typical instances, as well as those of atypical instances whose probabilities are exponentially small (large deviations on the external structure). For a given instance, the cavity method also gives access to the thermodynamics of the different admissible solutions (large deviations on the internal structure). From a physical perspective, many algorithmically hard optimization problems are thus found to display a glassy-like phase.

This thesis is composed of three parts intended to present the principles, applications and limitations of the cavity method. The first part recalls, from the point of view of large deviations, the links between statistical physics and combinatorial optimization. The second part treats models defined on random graphs and, for different ensembles of graphs, analyzes the typical and atypical properties of these models. The third part is devoted to large deviations on the "internal disorder", constituted by the solutions and quasi-solutions of a given instance. The emphasis is put on glassy phases, where the set of solutions is broken into an exponentially large number of disjoint clusters (the so-called one-step replica symmetry breaking structure) ; it is shown how the cavity method yields in such cases a detailed characterization of the geometrical properties of the space of solutions.

Résumé :

Les problèmes d'optimisation combinatoires définis sur graphes aléatoires sont au cœur de la théorie de la complexité algorithmique. Ils sont également étroitement liés à une formulation champ moyen, dite approximation de Bethe, de modèles sur réseau de verres de spins et verres structuraux. Cette thèse s'appuie sur ce parallèle pour appliquer à des problèmes d'optimisation une approche issue de la physique statistique des systèmes désordonnés, la méthode de la cavité. Étant donné un ensemble d'entrées (instances) d'un problème d'optimisation, cette méthode permet de déterminer les propriétés des solutions des instances typiques, ainsi que celles des instances atypiques, dont les probabilités sont exponentiellement petites (grandes déviations sur la structure externe). Pour une instance donnée, la méthode de la cavité donne également accès à la thermodynamique des différentes solutions admissibles (grandes déviations sur la structure interne). D'un point de vue physique, de nombreux problèmes algorithmiquement difficiles se révèlent ainsi posséder une phase de type verre.

Cette thèse est composée de trois parties destinées à exposer les principes, applications et limitations de la méthode de la cavité. La première partie rappelle, dans la perspective des grandes déviations, les liens entre physique statistique et optimisation combinatoire. La deuxième partie aborde les modèles définis sur graphes aléatoires et, pour différents ensembles de graphes, analyse les propriétés typiques et atypiques de ces modèles. La troisième partie est consacrée aux grandes déviations sur le « désordre interne », constitué par les solutions et quasi-solutions d'une instance donnée. Une attention particulière est dévolue au traitement des phases vitreuses où l'ensemble des solutions est fragmenté en un nombre exponentiel d'amas disjoints (structure dite à un pas de brisure de symétrie des répliques) ; il est montré comment la méthode de la cavité fournit dans de tels cas une description fine des propriétés géométriques de l'espace des solutions.