
PHYSIQUE STATISTIQUE ET OPTIMISATION COMBINATOIRE

Stéphane CHRETIEN
Irem de Besançon

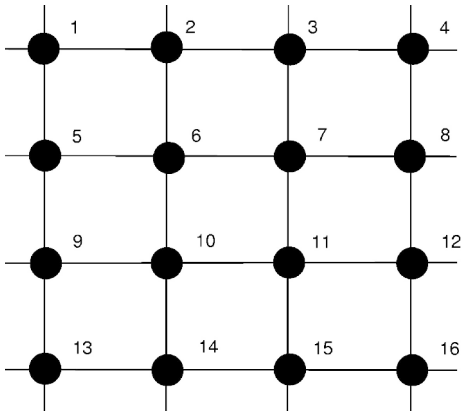
La physique a très souvent inspiré des nouvelles questions en mathématiques. L'objet de cet article est de montrer quelques liens étroits entre mathématiques et physique dans l'étude des problèmes d'optimisation combinatoire. On commence notre parcours en découvrant le modèle d'Ising de la physique statistique, puis on le poursuit en le mettant en parallèle avec le problème de la coloration des graphes. Les analogies que l'on découvre permettent de mieux comprendre pourquoi on peut utiliser des algorithmes très similaires dans ces deux situations et de mieux saisir les raisons pour lesquels il est possible que la solution de certains problèmes soit inaccessible !

1. Le modèle d'Ising.

La physique statistique est l'étude des systèmes comportant un très grand nombre de particules en interaction les unes avec les autres et dont l'état est considéré comme aléatoire. Un bon exemple est le modèle d'Ising. Des particules sont positionnées sur une grille régulière, comme les atomes d'un cristal. On affecte à chaque particule un spin, correspondant à son orientation. Mathématiquement, cela revient à affecter une valeur égale à 1 ou -1 . Seulement voilà, il paraît naturel de considérer que si l'on observe deux tels cristaux, ils auront très peu de chance de se trouver avec la même configuration de spin, même s'ils possèdent la même énergie. La question se pose alors de savoir comment

modéliser l'état d'un objet tout en sachant qu'on a très peu de chance en général de l'observer dans un état particulier quelconque.

Une des solutions est le recours aux probabilités. Numérotons les particules de 1 à n comme sur la figure ci-dessous.



Le modèle d'Ising propose d'affecter à chaque particule i de la grille une variable aléatoire notée X_i prenant ses valeurs dans $\{-1, 1\}$. L'ensemble des configurations possibles est donc $\{-1, 1\}^n$, qui est un ensemble à 2^n éléments, ce qui est une quantité qui devient vite énorme lorsque n devient grand. Par exemple, $2^{64} = 1,8 \cdot 10^{19}$! Pour tenir compte des interactions entre les spins des particules, on introduit une loi de probabilité sur l'ensemble des configurations possibles définie comme suit :

$$(P(X_1 = \sigma_1, \dots, X_n = \sigma_n) =)$$

$$p_\beta(\sigma) = \frac{1}{Z_\beta} \exp \beta \left(\sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j \right)$$

où la somme dans l'exponentielle inclut le terme $\sigma_i \sigma_j$ si et seulement si i et j sont voisins,

ce qui est noté $i \sim j$. Reste à choisir la notion de voisinage pour laquelle on a toute liberté. Le plus souvent on prendra pour définition que deux particules sont voisines si elles sont adjacentes sur la grille. La signification espérée de la notion de voisinage est la suivante : n'interagissent entre elles que des particules voisines.

Comment cette loi de probabilité sur l'ensemble des configurations prend-elle en compte les interactions ? La réponse est simple : si deux voisins ont même spin, leur produit est positif et augmentent la probabilité de la configuration. Si les deux spins sont différents, leur produit diminue la probabilité de la configuration. Ainsi, la loi du modèle d'Ising favorise la similarité entre voisins.

Le modèle d'Ising a été imaginé dans l'espoir de comprendre les phénomènes magnétiques : pour la loi ci-dessus, on dit que l'on a un matériau ferromagnétique. Il est aussi facile de donner un modèle qui favorise la dissemblance des spins de particules voisines ; il suffit pour cela de remplacer β par $-\beta$. Dans ce cas, on dit que l'on obtient un matériau anti-ferromagnétique.

Reste à expliquer la signification de β et Z_β : dans le modèle d'Ising, β est proportionnel à l'inverse de la température. Le terme Z_β est alors le terme de normalisation à 1 qui fait que l'on a bien à faire à une loi de probabilité :

$$Z_\beta = \sum_{\sigma \in \{-1, 1\}^n} p_\beta(\sigma)$$

Après cette courte préparation à la modélisation des matériaux ferromagnétiques, ouvrons maintenant la porte d'un monde un peu différent : celui de l'optimisation combinatoire ...

2. Coloration des graphes et un problème de téléphones portables.

Les personnes intéressées par notre nouveau problème évoluent dans un milieu un peu différent : celui des télécommunications. Imaginons que nous travaillions pour une compagnie de téléphones mobiles. Avant même de penser à vendre le premier téléphone, il faut penser à placer des bornes qui permettront de transmettre les messages des portables. Or ces bornes utilisent des fréquences bien spécifiques dont la location représente un budget conséquent pour les entreprises consternées. Il faut donc utiliser le moins de fréquences possibles sur l'ensemble des bornes implantées ! Mais qu'est-ce qui nous empêche de n'utiliser qu'une seule fréquence : la même pour toutes les bornes ? Le problème est que certaines bornes étant trop proches les unes des autres ou par un jeu de réflexions sur les murs des habitations, elles peuvent interférer les unes avec les autres et voir les messages qu'elles portent se trouver complètement corrompus.

Voyons maintenant comment transformer ce problème du monde industriel en problème de mathématiques. On se place dans la situation où une étude préliminaire du milieu a été faite. On sait donc quels sont les couples à éviter : on a donc à notre disposition une liste de couples de bornes qui ne doivent en aucun cas utiliser la même fréquence. On transpose la situation sur une ville prise au hasard (figure 1, ci-contre). Puis on dispose les bornes aux emplacements choisis en les marquant à l'aide d'un gros point blanc un peu disproportionné (figure 2).

Il est maintenant facile de disqualifier les couples incompatibles en fréquence : pour s'en souvenir, il suffit de les joindre par un trait noir (figure 3)...

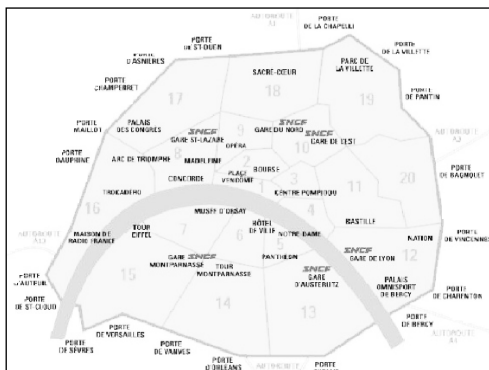


Figure 1

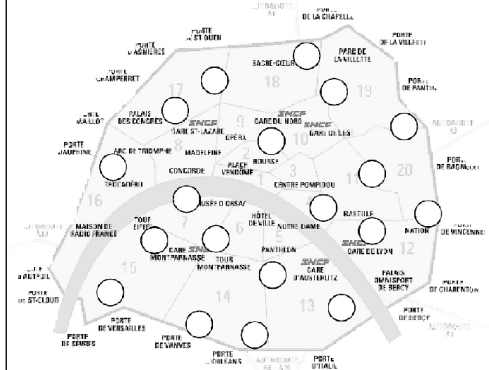


Figure 2

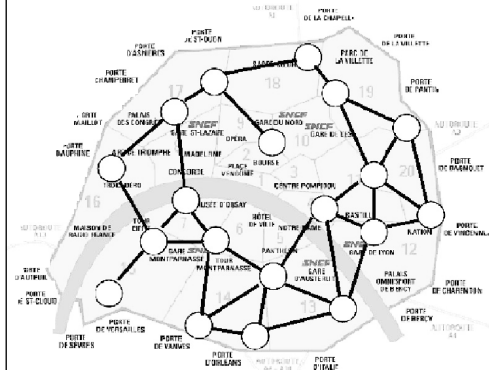
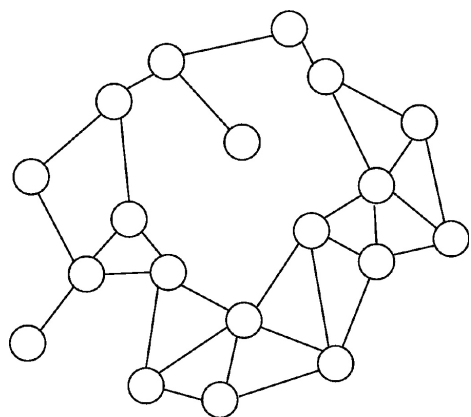


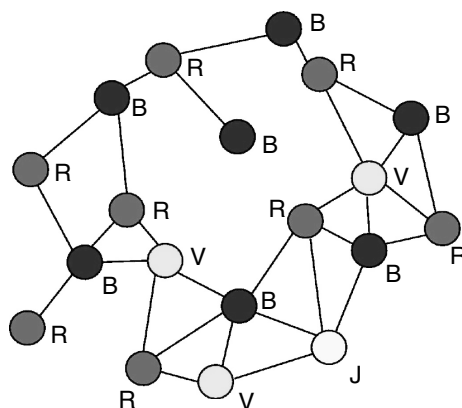
Figure 3

Nous avons maintenant toutes les données du problème ou presque... Commençons par le simplifier un peu en enlevant la ville, et on obtient ce qu'on appelle un *graphe*. Un graphe est quelque chose de très simple: un graphe est défini par la liste de ses sommets (les points) et de ses arêtes (les lignes existant entre certains couples de points). Il y a aussi un peu de terminologie à connaître car elle s'avère utile pour exprimer les choses sans trop de périphrases. Elle sera introduite au court du texte au moment où elle sera utile. Pour commencer, on dira que deux sommets joints par une arête sont adjacents.



Il y a par contre une information dont nous n'avons pas tenu compte : il s'agit de la valeur numérique des fréquences que l'on peut allouer. Après une minute de réflexion, il s'avère que le problème étant d'en allouer le nombre minimum, la valeur elle-même des fréquences est sans importance. Ce que les théoriciens des graphes ont pris l'habitude de faire est tout simplement de remplacer la valeur numérique d'une fréquence par une couleur. Il suffit alors d'affecter à chaque sommet du graphe une couleur en faisant bien attention à ce

que deux sommets adjacents, c'est-à-dire joints par un arc, ne possède pas la même couleur. On appelle ça une coloration du graphe. Le problème d'allocation de fréquences se résume donc à un problème de coloration de graphe utilisant le nombre minimum de couleurs possibles. Voici une coloration possible:



On se sait pas si cette coloration est la meilleure. L'objectif de trouver la meilleure coloration est un problème d'un domaine commun aux mathématiques et à l'informatique qui s'appelle l'optimisation combinatoire.

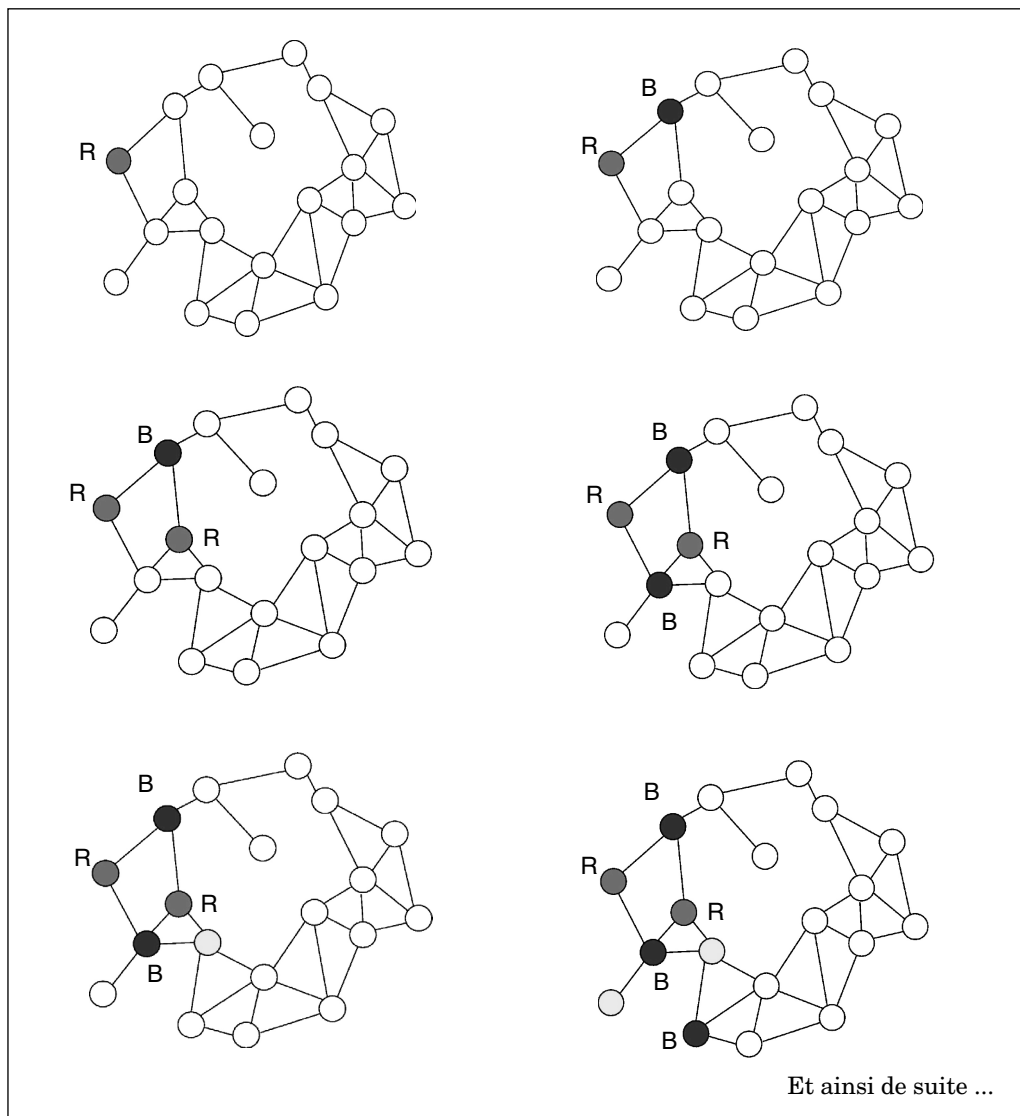
3. Un peu de théorie de la complexité.

3.1 Algorithmes gloutons pour la coloration.

Comment peut-on résoudre effectivement le problème de coloration ? Une méthode très simple consiste en l'opération de choisir un sommet au hasard puis une couleur au hasard que l'on affecte à ce sommet. Puis on recommence l'opération en choisissant les couleurs, pour chaque sommet choisi, dans une liste de couleurs admissibles, c'est-à-dire excluant toutes les couleurs prises par les voisins et de telle

manière que notre choix minimise le nombre de couleurs utilisées jusqu'à présent. On appelle une telle méthode un algorithme glouton car il prend des décisions qui ne

sont optimales qu'à l'instant où on les prend, sans se préoccuper de leur impact ultérieur dans la coloration. Un exemple est donné ci-dessous.



Le problème est que cet algorithme ne donne pas forcément la bonne solution comme le prouve l'exemple suivant, comme le prouvent les deux stratégies possibles données ci-dessous.

3.2 *L'optimum à quel prix ?*

L'algorithme glouton employé sans précaution peut échouer lamentablement sur les problèmes les plus simples. La première réaction peut être de se dire qu'il doit être facile d'éviter les erreurs stupides que peut commettre un ordinateur aveugle utilisant cette procédure. Mais que se passe-t-il lorsque nous avons affaire à un graphe énorme comptant plusieurs milliers de sommets ? Saurons-nous déjouer tous les pièges vers lesquelles l'algorithme glouton nous conduit ? Cela paraît peu probable mais il nous faut un argument plus convaincant.

Pour étudier l'effort calculatoire nécessaire à la résolution de problèmes de décision ou d'optimisation comme le problème de la coloration de graphe, une théorie existe nommée théorie de la complexité. Développée d'abord par des informaticiens théoriciens, sur la base des découvertes de Alan Turing entre autres, cette théorie cherche à classer les problèmes en diverses familles de complexité.

3.3 *La famille $\mathcal{P}$.*

La première famille est nommée famille $\mathcal{P}$. Elle contient tous les problèmes pour lesquels on connaît un algorithme qui donnera la solution après un nombre d'opérations polynomial en la quantité d'information nécessaire pour coder les données du problème qu'il doit résoudre. Cette famille contient de nombreux problèmes tels que celui de trouver le plus court chemin pour aller d'un som-

met à un autre dans un graphe. Il contient aussi le problème de la programmation linéaire, qui consiste à minimiser une forme linéaire sur un polytope dans $\mathbf{R}^n$. Curieusement ce problème, mis en avant par Dantzig, l'inventeur de la méthode du simplexe dans les années 50, et omniprésent dans toutes les facettes de l'optimisation de problèmes industriels, n'a pu être inclus dans la classe $\mathcal{P}$ qu'après de longues recherches et c'est par un détour improbable que Leonid Kachyan en a donné la preuve définitive. En effet, la méthode de Kachyan est en fait une méthode initialement créée sur mesure pour les problèmes convexes où la fonction de coût est non-différentiable... On est donc bien loin du problème linéaire le plus simple !

3.4 *La famille $\mathcal{NP}$.*

La famille $\mathcal{NP}$ est un peu plus curieuse. Concrètement, on aimerait créer la famille complémentaire de $\mathcal{P}$, c'est-à-dire celle des problèmes pour lesquels il n'existe aucun d'algorithme polynomial en la taille du problème. Malheureusement, prouver qu'il existe un algorithme qui marche bien est assez concevable : il « suffit » d'en construire un ! Mais prouver qu'il n'existe pas de tels algorithmes devient un tâche d'une autre ampleur.

La classe $\mathcal{NP}$ a été définie pour éviter ce genre de problème : c'est la classe des problèmes pour lesquels il existe un algorithme qui s'arrête après un nombre polynomial d'opérations, auquel on laisse le droit de prendre des décisions aléatoires, si on veut de jeter un dé pour choisir entre différentes options, et qui donne la bonne solution avec une probabilité non nulle. Un exemple d'un tel problème est celui du voyageur de commerce, un problème sur les graphes bien connu qui consis-

te à trouver le circuit de « longueur » minimale partant d'un sommet et passant par tous les autres. Un tel circuit peut être identifié à un sous-ensemble du groupe des permutations des n villes. Il suffit alors de donner un algorithme qui tire une permutation uniformément au hasard pour prouver que le problème du voyageur de commerce est bien un élément de la classe $\mathcal{NP}$. Notre problème de coloration est aussi un élément de la classe $\mathcal{NP}$. Il suffit de tirer des couleurs au hasard uniformément sur un ensemble de couleurs dont le cardinal est égal au nombre de sommets du graphe. Bien sûr, la plupart des solutions fournies ne seront même pas des colorations ! Mais la meilleure coloration est une proposition possible pour cet algorithme et la probabilité qu'elle soit choisie est non nulle et cela nous suffit.

Comme on le voit, la définition de la classe $\mathcal{NP}$ conduit à exhiber des algorithmes un peu stupides ! On aurait même tendance à croire que tous les problèmes sont dans cette classe. Tout d'abord, tous les problèmes de la classe $\mathcal{P}$ en font partie. Néanmoins, de nombreux problèmes pris par exemple parmi les problèmes de décision, n'en font pas partie.

3.5 La famille $\mathcal{NP}$ complète.

Il y a une sous-famille de $\mathcal{NP}$ qui se trouve être particulièrement importante, la famille des problèmes $\mathcal{NP}$ complets. On a en effet l'impression que la famille $\mathcal{NP}$ manque un peu de structure et qu'il s'y trouve un peu n'importe quoi. Le plus surprenant pour contredire cette intuition est le théorème de Cook. Ce théorème nous dit qu'il existe des problèmes particuliers dans $\mathcal{NP}$ qui sont des boîtes à outils universelles : on peut les adapter pour que tout

problème de $\mathcal{NP}$ puisse se mettre sous la forme de ce problème par une procédure de préparation et de récupération des résultats qui ne prenne qu'un temps polynomial de calcul.

Ce théorème est important car il implique que si l'on trouve un algorithme déterministe qui donne la solution d'un problème $\mathcal{NP}$ complet en temps polynomial, alors tous les problèmes de la classe $\mathcal{NP}$ se retrouvent du même coup eux aussi solvables en temps polynomial !

On aurait bien sûr envie de penser qu'il existe des problèmes tellement durs qu'ils n'appartiendront jamais à $\mathcal{P}$. Mais le plus incroyable est que pour l'instant, personne n'a encore réussi à le prouver ! La preuve de la conjecture « $\mathcal{P}$ différent de $\mathcal{NP}$ » a même été mise à prix un millions de dollars par un institut américain, le Clay Institute. Malheureusement, cet institut si généreux ne propose pas de prix pour l'évaluation de la probabilité qu'une telle incitation permette vraiment de trouver une preuve, sans parler du fait que c'est le système d'éducation qui effectue d'une manière beaucoup plus discrète tout le travail de fond...

3.6 Questions d'approximation

Le théorème de Cook permet d'exhiber une sous classe de $\mathcal{NP}$ très particulière, dont on peut dire qu'elle contient tous les problèmes les plus difficiles de cette classe. Une autre approche, plus pragmatique permet aussi de classer les problèmes de NP en sous familles, celle de l'approximation.

On peut en effet se poser la question naturelle de savoir s'il n'existe pas pour un pro-

blème donné, un algorithme déterministe qui donne un résultat dont la valeur du coût est dans une proportion fixe de la valeur optimale. Il existe en effet de tels problèmes pour lesquels cela marche : le problème du voyageur de commerce dans lequel les coûts de franchissement de chaque arête représentent effectivement des distances euclidiennes entre des villes par exemple, bien que $\mathcal{NP}$ complet, admet un algorithme d'approximation qui fournit un cycle dont la longueur est inférieure à $3/2$ fois la longueur du cycle optimal.

La théorie de la complexité a beaucoup évolué dans la dernière décennie et il arrive qu'on puisse démontrer maintenant de jolis résultats d'impossibilité. Un exemple frappant de ce type est l'existence de problèmes pour lesquels on peut démontrer qu'il sont inapproximable à moins que $P = \mathcal{NP}$...

On a donc parmi les problèmes $\mathcal{NP}$ des problèmes assez gentils et d'autres qui ne se laissent a priori même pas approcher, même de loin !

3.7 Et notre problème de coloration ?

Notre problème de coloration est un des problèmes les plus étudiés de toute l'optimisation combinatoire, tant pour son applicabilité que pour ses propriétés théoriques. Une de ses particularités les plus irritantes est qu'il fait partie de la sous classe des problèmes $\mathcal{NP}$ qui sont non-approximables !

J'espère que cette description rapide des problèmes de complexité aura permis d'avertir que la recherche d'un algorithme à toute épreuve pour notre problème de téléphonie n'est pas une tâche aussi aisée qu'elle le paraît. Heureusement,

le domaine est encore jeune et est loin d'être figé : il y a beaucoup de méthodes et de propriétés à découvrir sur ces questions nouvelles !

4. Simulation des matériaux ferromagnétiques.

Laissons de côté notre problème de portable pour le moment et retournons à la physique ! Une des motivations premières pour la création du modèle d'Ising était la suivante : il était bien connu des expérimentateurs que les matériaux ferromagnétiques subissaient des transitions étonnantes et discontinues dans leur comportement. Prenons un matériau aimanté par exemple. Eh bien il suffit de le chauffer suffisamment pour qu'il perde subitement ses propriétés magnétiques. Tout se passe de façon abrupte à une certaine température appelée température de (Pierre !) Curie. On appelle souvent de tels changements de structures des transitions de phases, suivant la même terminologie que pour le passage du gazeux au liquide ou du liquide au solide, etc., correspondant, eux aussi, à des températures spécifiques propres à la matière considérée.

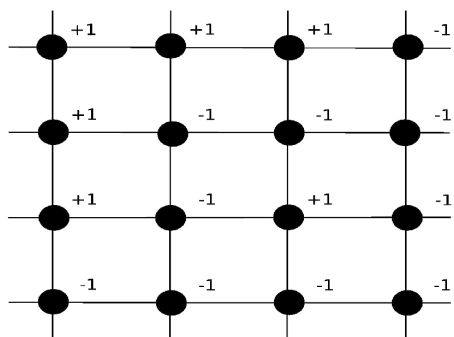
Les physiciens Lenz et Ising, son thésard, se sont donc mis au travail pour proposer un modèle mathématique simple qui puisse expliquer le curieux phénomène observé, voire permette de retrouver théoriquement la température de Curie. Très méthodiques, ils ont commencé par étudier le modèle en dimension un, où les atomes sont alignés sur une droite. Malheureusement, ce qu'ils ne pouvaient pas prévoir est que le modèle en dimension un ne possède aucune propriété de transition de phase, ce qui n'est pas le cas en dimension supérieure ! Ayant constaté l'incapacité de leur modèle à confirmer le phénomène en dimension un, ils l'abandonnèrent... Ising, émigré aux Etats-Unis après la

seconde guerre mondiale n'apprit que neuf ans plus tard le succès du modèle portant son nom en dimension supérieure à deux.

4.1 L'algorithme de Metropolis et Hastings.

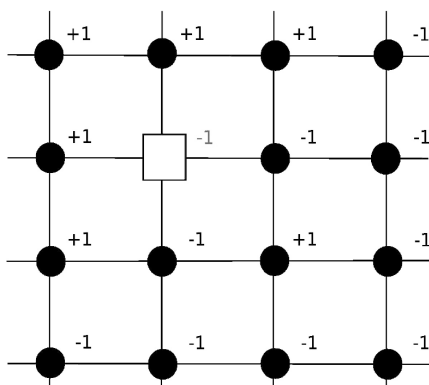
Revenons donc au modèle. De nombreux travaux ont été consacrés à l'étude mathématique des propriétés de transition de phase. Malheureusement, ces phénomènes étant très compliqués, la plupart des résultats obtenus sont surtout qualitatifs. C'est pourquoi la simulation numérique a permis de ne pas s'arrêter là et de comprendre un peu mieux les modèles simples, ainsi que d'estimer les constantes importantes du modèle.

La méthode de simulation la plus employée est celle de Metropolis et Hastings, deux chercheurs, l'un américain et l'autre canadien. C'est elle que l'on décrit maintenant. Le but est donc de simuler des configurations de -1 et de $+1$ suivant la fameuse loi d'Ising de la première partie. Malheureusement, les variables aléatoires spin X_i attachées à chaque particule ne sont pas indépendantes, ce qui est toute une affaire !

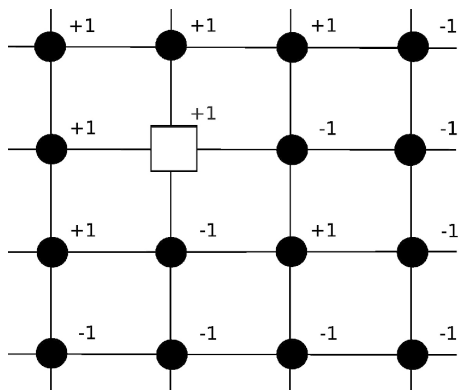


Pour faire marcher l'algorithme de Metropolis et Hastings, on part d'une configuration quelconque.

Puis on choisit une particule au hasard :



on change son spin ...



on arrive alors à une alternative :

- soit la nouvelle configuration a une énergie plus grande et dans ce cas, on accepte cette configuration,
- soit l'énergie obtenue est plus faible et on pourrait la refuser, prétextant que le système doit maximiser son énergie à la température donnée.

Mais la deuxième option n'est pourtant pas la bonne ; l'idée de Metropolis et Hastings est la suivante : acceptons une configuration moins bonne avec une probabilité p proportionnelle au rapport des lois d'Ising entre la configuration avant et après le changement de spin :

$$p = \exp \beta (H(y) - H(x)) ,$$

où H est le Hamiltonien $H(x) = \sum_{i,j} x_i x_j$.

On lance alors une pièce de monnaie truquée qui tombe sur face avec la probabilité p . Si la pièce tombe sur face, on accepte la nouvelle configuration et si elle tombe sur pile, on revient d'un pas en arrière et on repart de la configuration précédente.

Puis on recommence cette opération indéfiniment ...

4.2 Ou cela nous mène-t-il ?

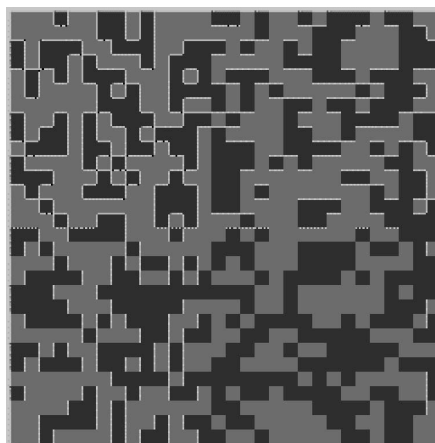
La procédure de Metropolis et Hastings que nous venons de décrire est une procédure dont les résultats sont asymptotiques. Il nous faut donc un théorème qui nous assure que si on attend infiniment longtemps, on obtient bien... mais que peut on espérer obtenir au fait ?

Si on arrête la procédure au bout d'un temps assez long, disons un million d'itérations. L'ordinateur nous présente une configuration. Si on recommence, il nous présente une autre configuration, et ainsi de suite... On peut donc comprendre cet algorithme comme un générateur aléatoire de configuration, ayant la particularité essentielle que nous puissions arrêter ses réflexions exactement quand on veut.

Supposons donc qu'on le considère comme un générateur aléatoire en l'arrêtant toujours après un million d'étapes. On peut se poser la question de savoir suivant quelle loi les configurations apparaissent. Cette étude rentre directement dans le cadre des chaînes de Markov que l'on appelle réversible, une autre allusion à un phénomène physique que nous n'étudierons pas ici... Le type de résultat que l'on peut obtenir est le suivant.

Théorème. Si on attend assez longtemps, le générateur aléatoire obtenu suit presque la loi du modèle d'Ising !!! (*incroyable ?!*)

Voici un exemple de ce que l'on peut voir au bout de beaucoup d'itérations.



Ainsi, nous avons à notre disposition une méthode pour simuler les configurations de spins non indépendants sur notre grille et nous pouvons tester les propriétés du modèle à loisir. Enfin... presque, comme on va le voir dans la dernière étape de notre parcours des rapports entre combinatoire et physique statistique !

5. Optimisation et physique statistique, même combat !

L'algorithme de Metropolis et Hastings va nous permettre d'élaborer une méthode pour la résolution de notre problème de coloration. L'idée clé est celle de recuit simulé.

5.1 Recuit simulé et optimisation.

Que se passe-t-il si l'on utilise l'algorithme de Metropolis-Hastings avec une valeur de β extrêmement grande ? Dans ce cas, une probabilité immense est donnée aux configurations qui ont une énergie maximisant le Hamiltonien H et la probabilité décroît exponentiellement vite pour les configurations dont le Hamiltonien s'éloigne de la valeur maximale. Asymptotiquement, lorsqu'on fait tendre β vers l'infini, la loi n'est non nulle qu'en les configurations qui maximisent exactement le Hamiltonien.

On peut donc utiliser ce comportement pour maximiser ou minimiser des fonctions, ce qui revient au même, sur des structures combinatoires quelconques. Dans ce cas, la probabilité p_β s'appelle fonction de Boltzmann de paramètre β . Donnons-nous immédiatement comme exemple nos colorations possibles, pour mieux comprendre comment tout cela peut fonctionner.

La fonction à minimiser est le nombre de couleurs utilisées. Donc pour une coloration x donnée, qui peut signifier par exemple un vecteur dont les coordonnées sont les numéros des couleurs utilisées, on définit la valeur de la fonction très non linéaire H par : $H(x) =$ « moins le nombre de couleurs utilisées par x ». Ce H va jouer le rôle du Hamiltonien du modèle d'Ising des étapes précédentes.

Une méthode possible est la suivante : utiliser l'algorithme de Metropolis et Hastings sur les colorations possibles. Il faut pour cela définir des transitions pour passer d'une coloration à une autre. C'est assez simple : on choisit un sommet au hasard et on tire une couleur parmi celles admissibles, c'est-à-dire que ne partage pas un de ses sommets voisins. L'itération de Métropolis Hastings suit alors la même philosophie : si la nouvelle coloration diminue le nombre de couleur, on l'accepte sans sourciller, et si elle demande plus de couleur, on l'accepte avec la probabilité p égale au rapport des fonctions de Boltzmann avant/après.

Ce qui doit changer par rapport à Metropolis et Hastings c'est la gestion du paramètre β . En effet, il ne s'agit pas ici de simuler à une température donnée mais d'optimiser H . Comme on sait maintenant la probabilité d'obtenir des configurations (ici des colorations) augmente lorsque β tend vers l'infini, il paraît raisonnable d'augmenter β à chaque étape de l'algorithme. Si on se souvient que dans le modèle d'Ising, β est proportionnel à l'inverse de la température, on peut comprendre que le choix de la suite des valeurs de β correspond à un refroidissement du matériau, ce qui explique, par similarité au traitement effectué sur les métaux, que l'on appelle cette méthode, méthode du recuit simulé !

5.2 Où est l'arnaque ?

L'aventure ne s'arrête pas là ! Car on sait maintenant que le problème de coloration est un problème extrêmement difficile grâce aux nouveaux points de vue donnés par la théorie de la complexité. On peut donc se douter que la méthode du recuit simulé est loin d'être une méthode miraculeuse. En d'autres termes, méfiez-vous des arnaqueurs ! En effet, on voit bien vite que le recuit simulé peut être

appliqué à tout et à n'importe quoi et il va s'agir d'éclaircir un peu les choses.

Tout le problème peut être simplement résumé dans la question suivante : à quelle vitesse la loi du générateur après n pas converge-t-elle vers la loi asymptotique dans l'algorithme de Metropolis-Hastings ?

Cette question est en fait très difficile. Elle a été un des problèmes phares attaqués par de nombreux statisticiens et probabilistes. Prouver que la vitesse est polynomiale pour un problème particulier est suffisant pour considérer que l'approche de Metropolis – Hastings est un succès. Bien que le problème suivant ne soit pas un problème d'optimisation, il est pourtant très significatif du bon potentiel de la méthode : pour l'instant le problème de calculer le volume d'un corps convexe est un problème pour lequel on ne connaît pas d'algorithme déterministe polynomial alors qu'une méthode proche de celle de Metropolis et Hastings marche en n^5 aux dernières nouvelles.

5.3 *Qu'en est-il du problème de la coloration ?*

Pour l'instant il existe des théorèmes qui assurent la convergence en temps polynomial lorsque $\beta = 0$ et le nombre de couleurs utilisables est assez grand. Beaucoup de travail reste à faire !!

6. Perspectives de recherche : le problème des transitions de phase.

Nous arrivons enfin à l'endroit où la physique statistique a peut-être le plus à apporter à l'optimisation combinatoire. Pour cela, il faut revenir au modèle d'Ising a nouveau.

L'algorithme de Metropolis et Hastings est, comme on l'a dit précédemment, d'une très grande utilité pour simuler le comportement des modèles. Il y a par contre une énorme précaution à respecter lors de son utilisation : il faut s'assurer que sa loi converge vite vers la loi stationnaire et comme nous en avons maintenant pris l'habitude, on estimera hâtivement que « vite » signifie « polynomial ».

Or c'est là que les transitions de phases refont leur apparition : les physiciens ont depuis quelque temps mis au point un algorithme plus efficace que Metropolis Hastings pour ces modèles, nommé algorithme de Swendsen Wang. Et plus encore, ils ont pu démontrer que sa vitesse de convergence était polynomiale loin des températures correspondant à la coexistence de phases multiples. Par contre, de récents travaux de mathématiciens et informaticiens ont permis de confirmer que cet algorithme convergeait avec une vitesse beaucoup plus faible près des points de transition.

La question est donc maintenant de savoir si cet exemple est paradigmatique ! Dans les classes de problèmes d'optimisation, existe-t-il des paramètres, qui suivant leur valeur pour un type donné de problème, laisse l'optimum facilement accessible et qui autour de valeurs où la structure générale des problèmes semble changer brutalement, exigent un effort de calcul exponentiel ?

Cette question est certainement une des questions les plus intéressantes de la recherche à venir. Comme nous l'avons maintenant compris, il faudra de plus en plus connaître la structure intime des problèmes de la classe $\mathcal{NP}$ et l'étude de la paramétrisation des problèmes peut s'avérer une approche extrêmement puissante.

Reste à savoir quels paramètres choisir. Cela dépend bien sûr du problème... Une idée générale pour les problèmes sur les graphes est de considérer des

graphes aléatoires où les arêtes existent avec une certaine probabilité. Cette probabilité semble être un des paramètres les plus attirants pour le moment ...

Bibliographie

Sur les graphes et les algorithmes,

C. Robert et O. Cogis, « La théorie des graphes » Vuibert 2003.

Sur la physique statistique et l'algorithme de Metropolis- Hastings,

Olle Häggström, « Finite Markov chains and algorithmic applications », Cambridge : Cambridge University Press, 2002.

Sur le problème des transitions de phase en combinatoire (un exemple important étant le problème appelé 2-SAT) les résultats sont encore dispersés dans des articles de recherche. On pourra peut-être commencer avec la publication suivante.

Fernandez de la Vega, W. Random 2-SAT : results and problems. Phase transitions in combinatorial problems (Trieste, 1999). Theoret. Comput. Sci. 265 (2001), no. 1-2, 131—146.