

Optimisation combinatoire, analyse d'algorithmes et physique statistique.

Rémi Monasson

*Lab. Physique Théorique
de l'ENS*

Collaborateurs :

Giulio Biroli

Simona Cocco

Scott Kirkpatrick

Bart Selman

Martin Weigt

Riccardo Zecchina

Rutgers + Saclay

Strasbourg

IBM + Jerusalem

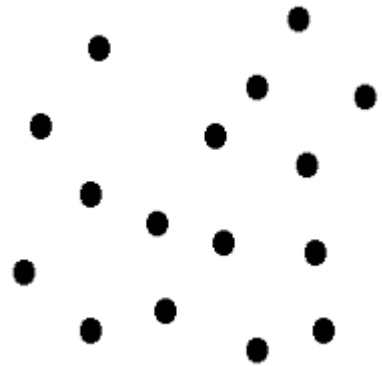
Cornell

Göttingen

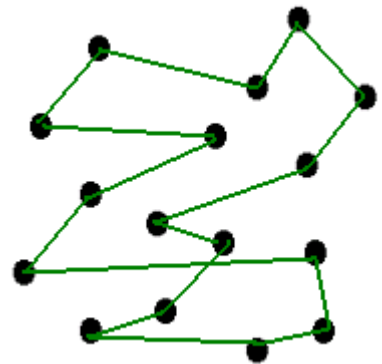
ICTP, Trieste

Un exemple de problème d'optimisation : **Le voyageur de commerce**

N villes
distances entre les villes



Tournée =
visite de toutes les villes
une et une seule fois



Tournée la plus courte ?

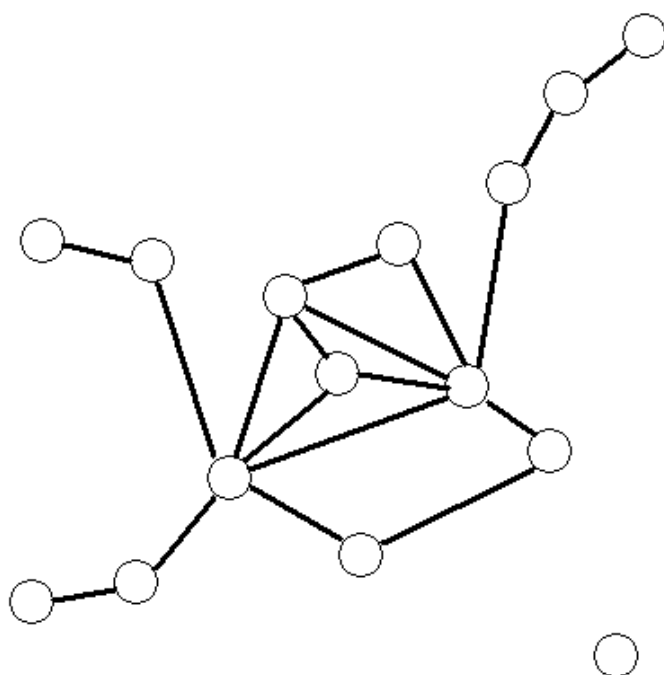


Coloriage de cartes ...

Union
Européenne



...et de graphes.



Graphes
non planaires?

La satisfaisabilité (de contraintes logiques)

CAN'T GET NO SATISFACTION

American Scientist, Volume 85, Pages 108-112, Mars-Avril 1997.

<http://www.amsci.org>

Brian Hayes

You are chief of protocol for the embassy ball. The crown prince instructs you either to invite Peru or to exclude Qatar. The queen asks you to invite either Qatar or Romania or both. The king, in a spiteful mood, wants to snub either Romania or Peru or both. Is there a guest list that will satisfy the whims of the entire royal family?

This contrived little puzzle is an instance of a problem that lies near the root of theoretical computer science. It is called the satisfiability problem, or SAT, and it was the first member of the notorious class known as NP-complete problems. These are computational tasks that seem intrinsically hard, but after 25 years of effort no one has yet proved that they are necessarily difficult. It remains possible (though unlikely) that we are simply attacking them by clumsy methods, and if we could dream up a clever algorithm they would all turn out to be easy. Settling this question is the most conspicuous

one phase almost all the propositions can be satisfied, but in another phase almost none can. The cases that are hardest to resolve lie near the transition between these regimes.

The connection between SAT and the physics of phase transitions strikes me as a surprising one—a classic who'd-have-thunk-it result. We are accustomed to using mathematics as a tool for interpreting the physical world, but not the other way around. And yet the phase-transition model of SAT works so well that it cannot be a mere metaphor, much less a coincidence.

P and NP

The problem of the embassy ball is small enough to be solved by even the most plodding of methods. The problem is represented by the formula:

$$(p \text{ OR } \sim q) \text{ AND } (q \text{ OR } r) \text{ AND } (\sim r \text{ OR } \sim p)$$

Here p , q and r are Boolean variables, whose only

p = vrai si l'ambassadeur du Pérou est invité, faux sinon
(p ou non q) et (q ou r) et (non r ou non q)

La K-Satisfaisabilité

- ❑ **variables** booléennes (Vraie ou Fausse);
- ❑ **contraintes logiques (clauses)** qui sont le OU logique entre les variables ou leurs négations;
- ❑ les **clauses** sont reliées par des ET logiques.

(w ou NON x ou y)

et

(NON w ou x ou z)

et

(x ou y ou NON z)

Peut-on satisfaire toutes les clauses ensemble?

2-Sat

*Ex: problème du bal
de l'ambassadeur*



3-Sat (et >3)

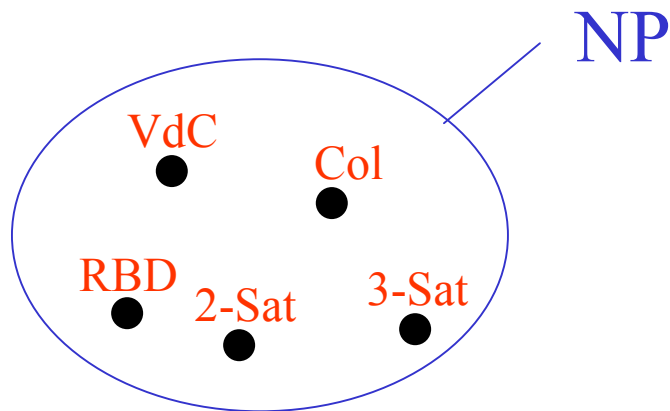
*(Voyageur de commerce,
Coloriage de graphes, ...)*

Complexité calculatoire (I)

- instance d'un problème = cas particulier à résoudre
taille de l'instance = nb. de données pour la définir

$$\text{complexité} < \text{fonction}(\text{taille}) = (\text{taille})^K, K^{\text{taille}}$$

- classe **NP** des problèmes de décision :
ceux dont les solutions sont vérifiables en temps polynomial



- il y a des problèmes faciles (poly.) dans **NP** :

Recherche dans une Base de Données, 2-Sat, ...

- Y a-t-il des problèmes très difficiles?

$$\text{réduction} \left\{ \begin{array}{l} \text{instance de A} \xrightarrow[\text{poly.}]{\text{temps}} \text{instance de B} \\ \text{complexité(A)} < \text{complexité(B)} \end{array} \right.$$

Complexité calculatoire (II)

Théorème : Cook, 1971

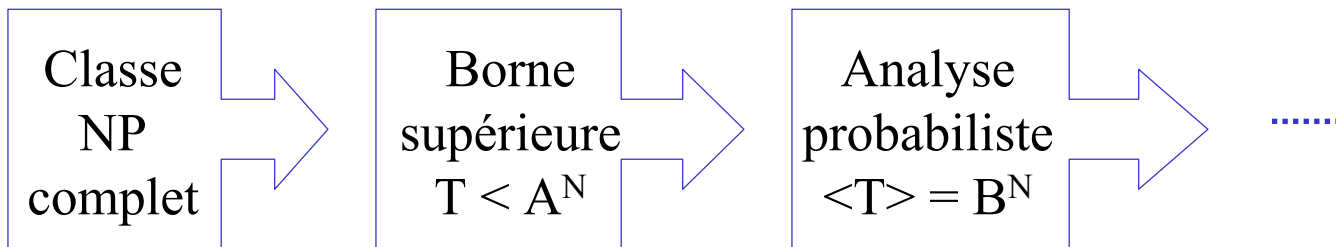
Tous les problèmes NP sont réductibles à 3-Sat

Questions :

1. 3-Sat peut-il être résolu en temps polynômial?

Une des 6 questions fondamentales ouvertes en mathématique
(Congrès Clay, mai '00; <http://www.claymath.org/prizeproblems>)

2. Que se passe-t-il en pratique?



- distribution d'instances
- étude des propriétés moyennes, déviations
- cas typique vs. cas le pire

Liens avec la physique statistique

I. Equilibre

- ❑ minimum d'une fonction de coût =
état fondamental d'un hamiltonien classique
(*quasi-solutions* = *états excités* ...)
- ❑ limite de grande taille
- ❑ distribution des **instances** =
désordre gelé dans les interactions

Fu, Anderson; Kirkpatrick;
Mézard, Parisi; Orland; Vannimenus;
(à partir de 1984)

- ❑ distribution extrême de variables corrélées?

Exemple : modèle Edwards-Anderson sur réseau carré
 N spins S_i ; $2 N$ couplages J_{ij} aléatoires

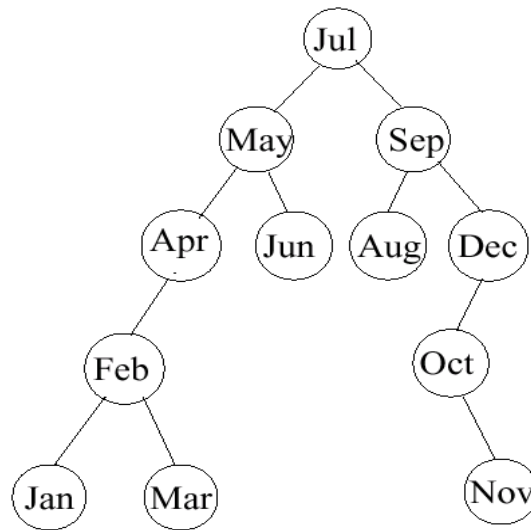
$$H[J, S] = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j$$

2^N niveaux d'énergie corrélés !

*basse température : distribution du minimum,
des quasi-minima ...*

Base de données et arbre binaire

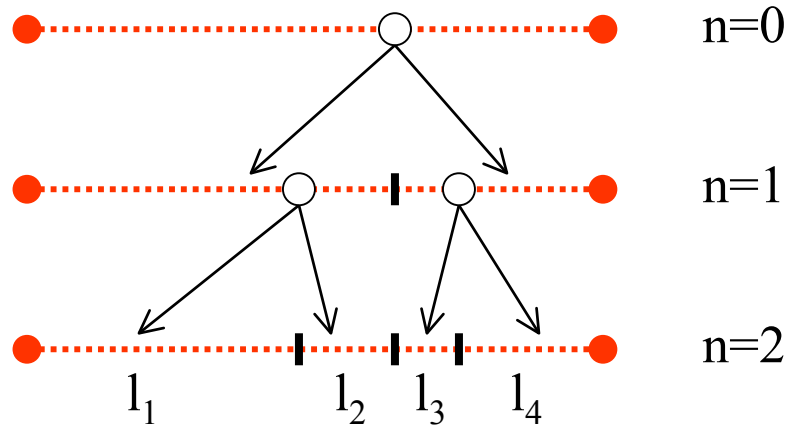
Juillet
Septembre
Décembre
Mai
Avril
Février
Janvier
Octobre
Novembre
Mars
Juin
Août



H_N

problème de la
fragmentation
d'intervalles

Devroye '87



$$H_N < n \quad \tilde{n} \quad l_1 < 1, l_2 < 1, \dots, l_2^n < 1$$

$$\tilde{n} \quad \min(l_i) < 1$$

$$H_N = 4.31107... \log(N) - 1.95303... \log(\log(N)) + \dots$$

Majumdar, Krapivsky '01

Liens avec la physique statistique

II. Dynamique

- Algorithme = ensemble de règles de calcul
 - évolution dynamique de l'instance

Exemple :
tri

$L = 6, 1, 18, 7, 10, 2, 3, 15$
 $1; 6, 18, 7, 10, 2, 3, 15$
 $1, 2; 6, 18, 7, 10, 3, 15$

- Analyse = calcul du temps d'exécution

Nb. de comparaisons pour le min de k nombres = k-1

Nb. total de comparaisons = $(N-1)+(N-2)+\dots+1 = N(N-1)/2$

Knuth '60

- Différentes classes d'algorithmes d'optimisation :

- recherche **locale**

incomplets (ne peuvent prouver l'absence de solutions)

similarité avec les dynamiques physiques

(Monte Carlo, recuit simulé, ... cf. transition vitreuse)

- recherche **globale** (complète)

non Markoviens (effets de mémoire)

non locaux (sauts dans l'espace des phases)

sans origine physique (issus de l'informatique)

Sat, un modèle de spins à interactions aléatoires (*et température nulle*)

K-SAT

variable booléenne $x = \text{vraie, fausse}$

clauses


nombre de clauses violées par une
configuration logique

par exemple :

2 SAT $x \text{ ou } \bar{y}$
 $(x \text{ ou } \bar{y}) \text{ et } (\bar{x} \text{ ou } z)$

3 SAT $x \text{ ou } \bar{y} \text{ ou } z$

nombre minimal de clauses violées

le problème est  satisfaisable
non satisfaisable

physique statistique

spin d'Ising $s_x = +1, -1$

couplages et champs agissant sur les spins

énergie E de la configuration des spins

$$E = \frac{1}{4} (1-s_x)(1+s_y)$$

$$E = \frac{1}{4} (1-s_x)(1+s_y) + \frac{1}{4} (1+s_x)(1-s_y)$$

$$E = \frac{1}{8} (1-s_x)(1+s_y)(1-s_z)$$

énergie de l'état fondamental

énergie de l'état fondamental = 0

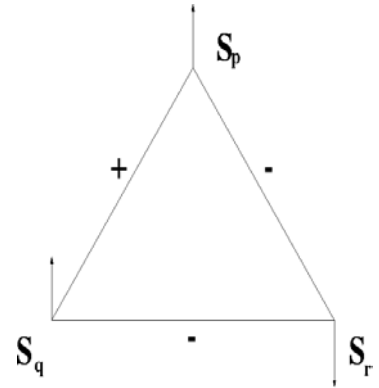
énergie de l'état fondamental > 0

Gardner, Derrida (1989)
R.M., Zecchina (1995)

Verres de spins sur réseaux aléatoires

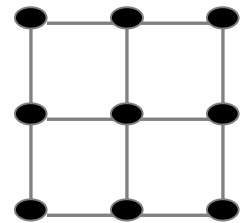
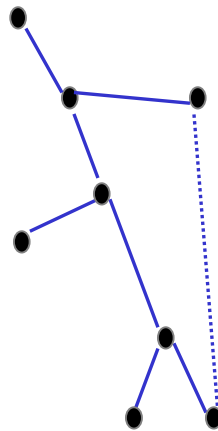
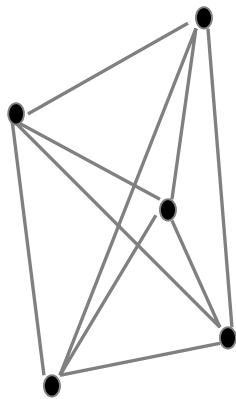
* problème du bal

$$E = \frac{1}{4} (-S_p S_q + S_q S_r + S_r S_p + 3)$$



En général : **frustration** ...

*



$|J| = N^{-1/2}$
pas de
géométrie

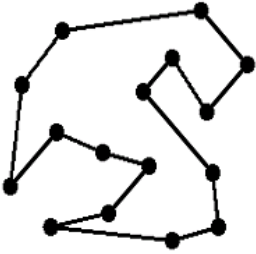
$|J| = 1$
géométrie de
dimension
infinie

$|J| = 1$
géométrie
de dimension
finie

* Interactions multi-spins (K-Sat = K corps)

Aperçu des travaux et résultats

- Voyageur de commerce non euclidien



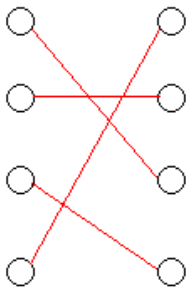
- non euclidien
- théorie des champs $O(n^{\frac{1}{2}})$ (polymère)

Mézard, Parisi '85-86

Orland '86

Krauth, Mézard '89

- Assignment optimale



- $p(d)$ quelconque
N infini : $p^2/6$
corrections $1/N$
- $p(d)=\exp(-d)$
N quelconque

Mézard, Parisi '85-86

Fu, Anderson '86

- Couverture de sommets de graphes aléatoires

Weigt, Hartmann '00

- Partition de nombres

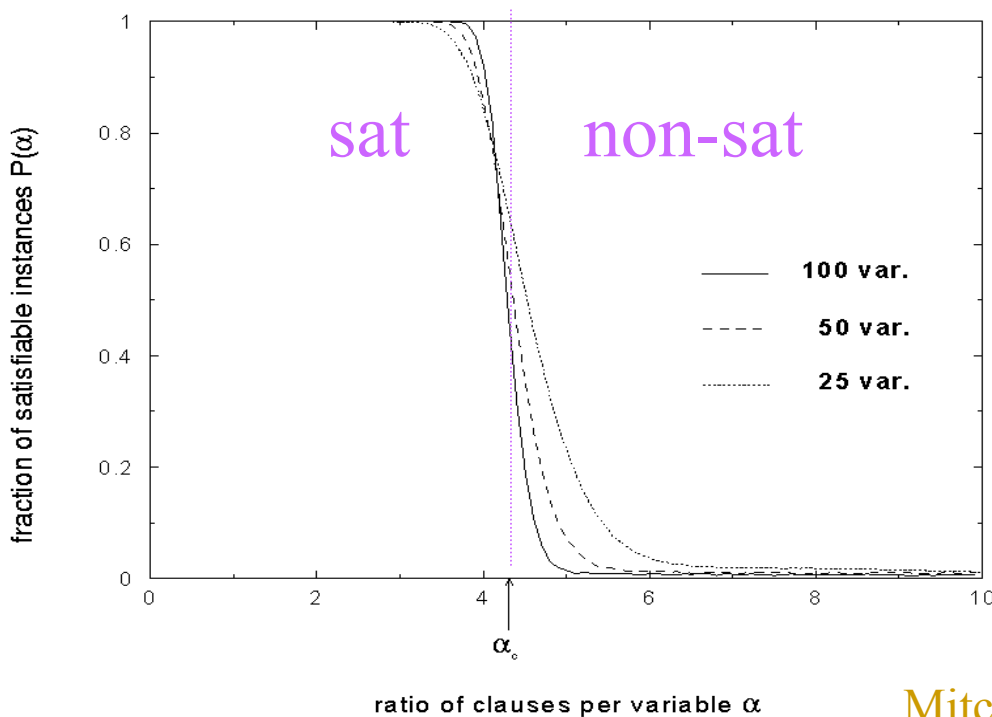
statistique des niveaux d'énergie

Mertens '98, Pittel et al. '00

Transition de phase de 3-Sat

(I. Simulations et résultats rigoureux)

$$a = \frac{\text{nb. de clauses}}{\text{nb. de variables}}$$



transition de phase!

$$a_c = 4.3$$

Mitchell et al. '92
Crawford, Auton '93
Gent, Walsh '94

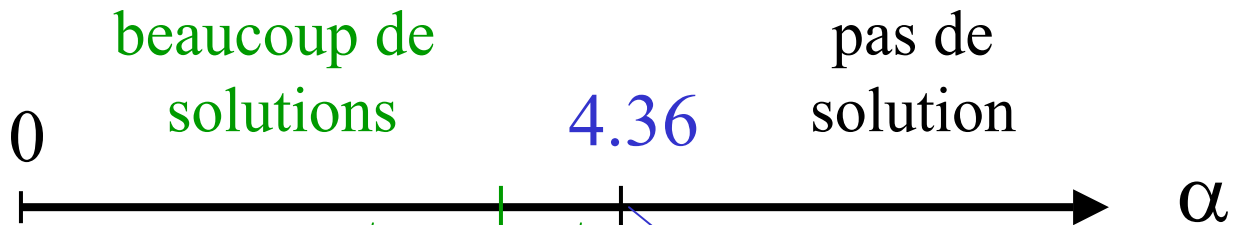
Résultats rigoureux :

- borne inférieure $a_c > 3.26$
- borne supérieure $a_c < 4.51$
- largeur de la région de transition $> N^{-1/2}$

Achlioptas '00
Dubois '99
Wilson '99

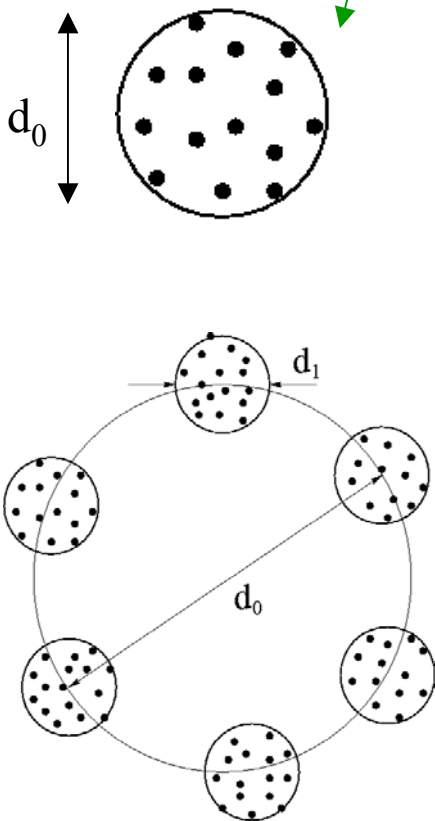
Transition de phase de 3-Sat

(II. Approche "physique")



3.96

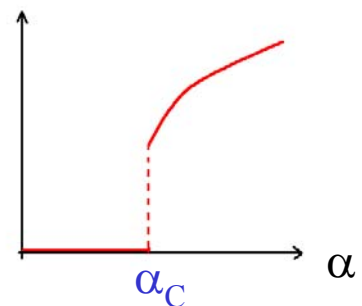
R.M., Zecchina '96
Biroli, R.M., Weigt, '99
Semerjian, Cugliandolo '00



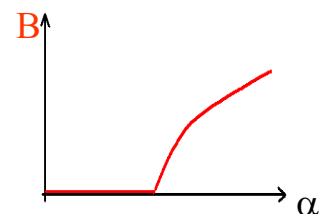
(hypercube de dimension N)

3-Sat :
transition discontinue






B = fraction de variables
surcontraintes



2-Sat :
transition continue

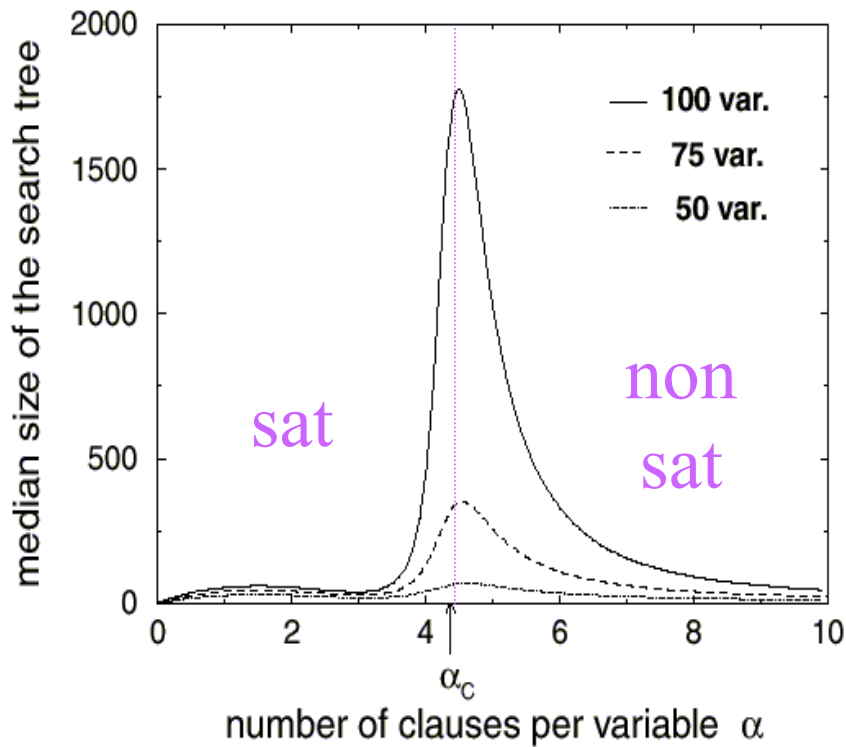


Algorithme de résolution par “branch and bound”

étape	clauses	arbre de recherche
0	w ou \bar{x} ou y \bar{w} ou x ou z \bar{w} ou \bar{x} ou \bar{y} \bar{w} ou \bar{x} ou y x ou y ou \bar{z}	
1	choix : $w = V$	
2	x ou z \bar{x} ou \bar{y} \bar{x} ou y x ou y ou \bar{z}	
3	choix : $x = V$	
4	\bar{y} y	
5	propagation : $y = F, y = V$ contradiction	
6	retour à l'étape 3 : $x = F$	
7	z y ou \bar{z}	
8	propagation : $z = V, y = V$ solution : $w = V, x = F, y = V, z = V$	

Davis,
Putnam
(1960)

Complexité typique de 3-Sat



Mitchell, Selman, Levesque '92
Crawford, Auton '93
Gent, Walsh '94

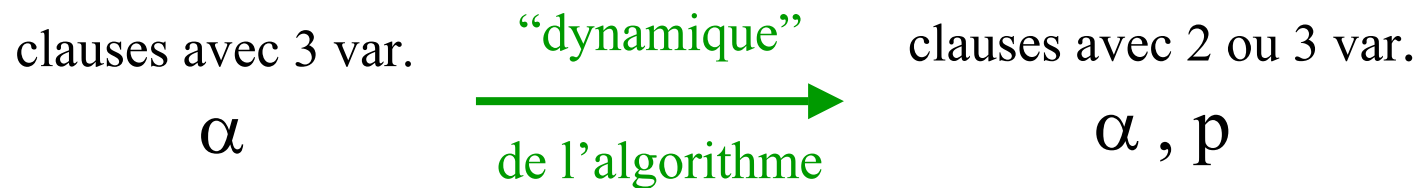
Trois régimes : facile, difficile, moins difficile

Résultats rigoureux :

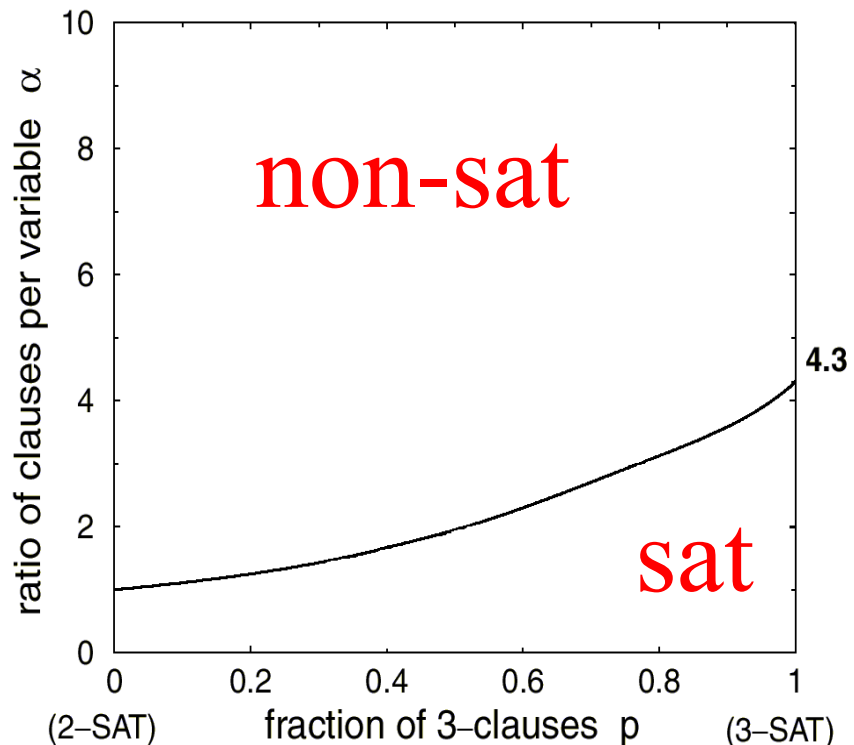
- croissance linéaire si $a \leq a_c$
- croissance exponentielle si $a > a_c$
- borne supérieure : complexité $< 1.51^N$
(en pratique, à la transition : 1.06^N)

Chao, Franco '86, '90
Chvatal, Szmeredi '88
Kullmann '99

Trajectoires de résolution et problème 2+p-Sat

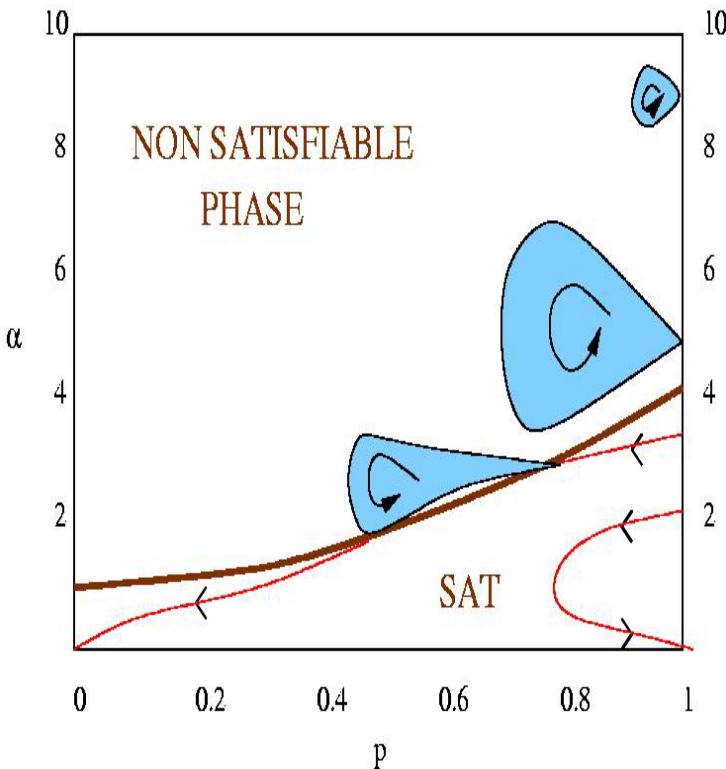


*Diagramme
de phase
2+p-Sat*

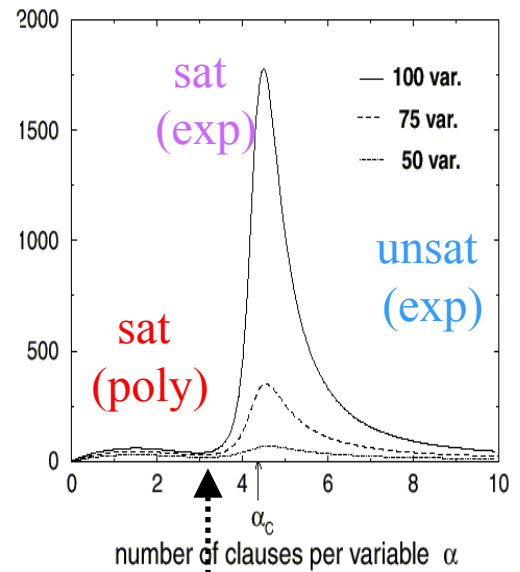


R.M. , Zecchina, Kirpatrick, Selman, Troyansky '99
 Achlioptas, Kirovski, Kranakis, Krizanc '01

Transition dynamique polynômiale/exponentielle



Cocco, R.M. '01



transition dynamique
(dépend de l'heuristique)

Clause Unit. Généralisée : 3.003
 Clause Unitaire : 2.66
 Règle de majorité : 3.

mais $p_T = \frac{2}{5}, \alpha_T = \frac{5}{3}$

T semble indépendant de l'heuristique ...
 et proche du point tricritique !

Conclusions

Idées et concepts de la physique statistique sont utiles pour comprendre le comportement typique des problèmes d'optimisation (*propriétés des solutions; dynamique de résolution*)

méthode des répliques, transition et diagramme de phase, dynamique non-linéaire, processus de croissance, dynamique vitreuse....

Thèmes voisins: codes correcteurs d'erreurs, bioinformatique
Sourlas '89, Hwa, Marinari, Peliti, Derrida, Fink, .

Perspectives :

- *robustesse à des perturbations de l'instance*
(brisure de symétrie des répliques vs. gouttelettes)
- *étude des algorithmes d'approximation*
- *problèmes liés à l'analyse probabiliste (physique?)*
 - * *distributions plus réalistes*
 - * *analyse d'algorithme à échantillon fixé*
(désordre thermique vs. désordre gelé)

Application

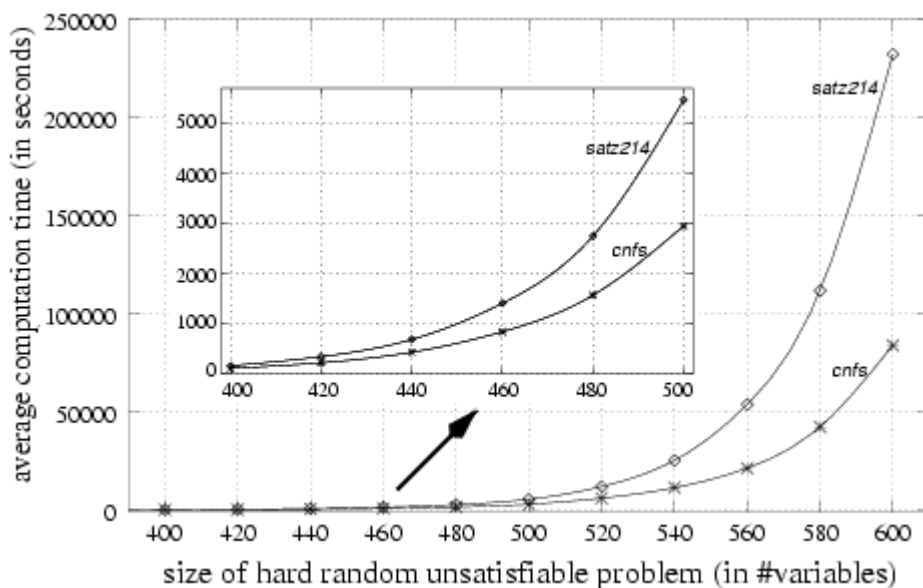
I. Heuristique de recherche et squelette de solutions

Heuristiques de choix des variables :

Choisir la variable qui permet d'éliminer le plus grand nombre de clauses possible.

Dubois, Dequen '00

Choisir la variable avec la plus grande probabilité d'appartenir au squelette instantané.



Application

II. Fluctuations de complexité et redémarrages successifs

- fluctuations de complexité

$\alpha=3.5$

$N=300$

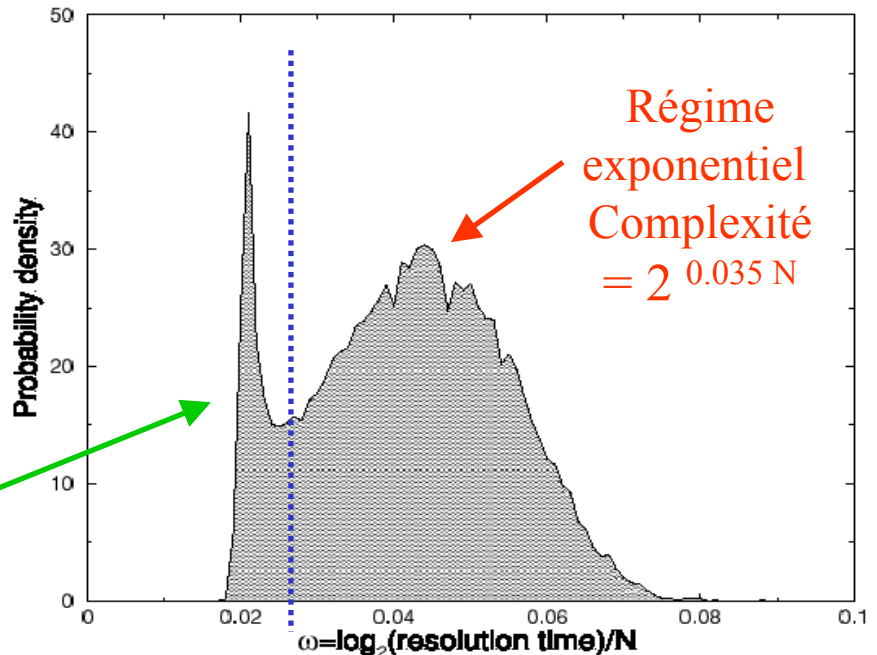
20000 échantillons

Régime linéaire

très rare !

fréquence

$$= 2^{-0.011 N}$$



- résolution par redémarrage successifs :
 - arrêter l'algorithme après un temps N ;
 - relancer jusqu'à ce qu'une solution soit trouvée.

Temps de résolution : $2^{0.035 N}$ $2^{0.011 N}$

Cocco, R.M.
Montanari, Zecchina '01

Calcul analytique

* Grandes tailles $N \rightarrow \infty$:

concentration de l'énergie libre

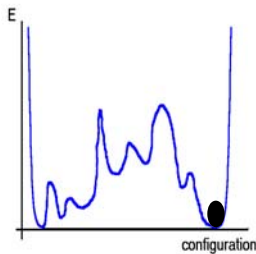
* Energie (libre) moyenne :

$$\overline{f[J]} = -T \overline{\ln Z[J]}$$

$$= -T \lim_{n \rightarrow 0} \overline{(Z[J]^n - 1) / n}$$

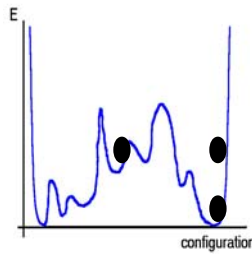
* Méthode des répliques :

$Z[J]$



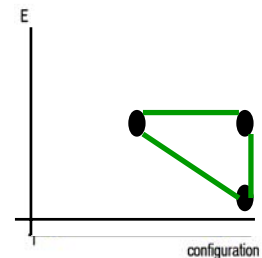
1 système
avec désordre

$Z[J]^n$



n systèmes
sans interaction
avec désordre

$\overline{Z[J]^n}$

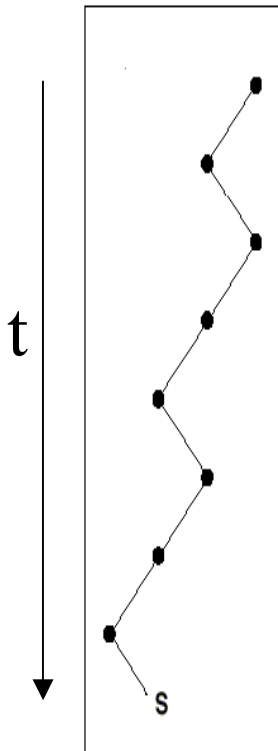


n systèmes
en interaction

Absence de géométrie euclidienne \Rightarrow champ moyen exact

Allures des arbres de recherche

Régime sat facile

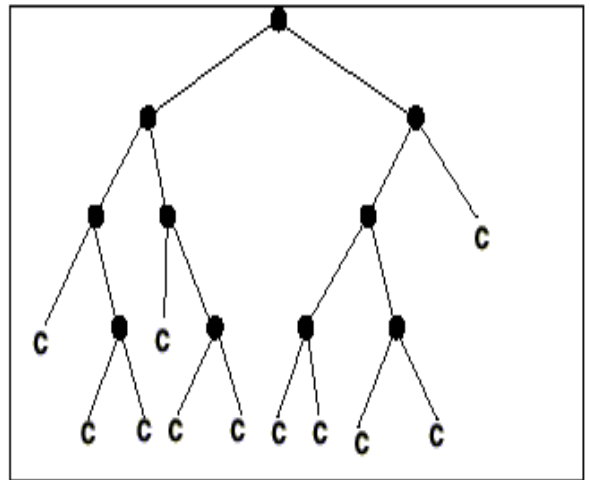


une branche :

$p(t)$, $\alpha(t)$

*Régime sat
et difficile*

*Régime non-sat
et difficile*



beaucoup de branches:

$\omega(p, \alpha, t)$

