Brisure d'ergodicite en mécanique statistique

Autor(en): **Toulouse, G.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **59 (1986)**

Heft 5

PDF erstellt am: **13.09.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-115771

Helvetica Physica Acta
Vol, 59, 1986 885-895

0018-0238/86/050885-11$1.50+0.20/0

BRISURE D'ERGODICITE EN MECANIQUE STATISTIQUE

G. Toulouse, E.S.P.C.I. 10, rue Vauquelin
75231 - PARIS Cedex 05 - France

Résumé : Une mise au point sur la notion d'ultramétricité, des mathématiques à la biologie. L'ultramétricité est préservée dans la brisure d'ergodicité associée à certaines transitions de phase dans les milieux désordonnés.

1. Perspective générale

La mécanique statistique décrit des propriétés collectives et, en particulier, l'émergence de nouveaux comportements lorsque le nombre de particules augmente. Très remarquable, à cet égard, est l'existence des transitions de phase d'équilibre, dans la limite thermodynamique. Un siècle d'études a porté sur les transitions de phase dans les milieux homogènes, et sur le phénomène de brisure spontanée de symétrie, qui implique brisure d'ergodicité dans la phase ordonnée. L'espace de configuration est alors divisé en vallées, reliées par symétrie, d'où le système ne peut échapper.

Les verres de spin sont des systèmes désordonnés frustrés et ils ont servi comme archétypes des milieux hétérogènes. La transition verre de spin est d'une espèce nouvelle et la brisure d'ergodicité associée est bien plus sévère que la précédente, car il apparaît ici une prolifération de vallées, qui ne sont pas reliées par symétrie. Les nombreux états métastables sont cause d'effets de rémanence spectaculaires.

La méthode du recuit simulé fut conçue pour éviter le blocage dans des états métastables. Elle s'est révélée être un algorithme d'optimisation efficace pour de nombreux problèmes combinatoires, dont un archétype est le problème du voyageur de commerce, et pour bien d'autres problèmes complexes en ingénierie et biologie. Ces problèmes d'optimisation ont souvent plusieurs traits communs avec les verres de spin : la frustration entraîne une transition de gel et un paysage d'énergie avec une distribution hiérarchique (ultramétrique) de vallées. L'ultramétricité est peut-être la propriété émergente la plus remarquable associée à la brisure d'ergodicité dans les milieux hétérogènes.

Un paysage d'énergie peut être utilisé comme une mémoire adressable par le contenu. C'est ce que propose une théorie récente des réseaux neuronaux. Les vallées sont les mémoires enregistrées et le rappel s'effectue par une dynamique de gradient. Des règles d'apprentissage rendent les paysages d'énergie adaptables. Les capacités de mémoire et les performances du rappel présentent de l'intérêt pour l'intelligence artificielle et pour la théorie du cerveau. Dans ce dernier cas, il y a un stimulant débat entre une approche instructive, partant d'un paysage d'énergie plat (tabula rasa), et une approche sélective, partant d'un paysage d'énergie de type verre de spin.

Il y a deux ans, dans ce journal, j'ai donné une revue de la théorie de champ moyen des verres de spin, avec un certain acccent mis sur la notion récente d'ultramétricité. Ici, en l'honneur de Charles Enz, un physicien que la curiosité et l'enthousiasme ont toujours porté vers les idées nouvelles, je tenterai une mise au point sur cette nouvelle frontière de la physique statistique.

2. Verres de spin et ultramétricité

C'est en 1984, tout récemment donc, que le terme d'ultramétricité fait son entrée dans la physique(1). Au cours d'une étude sur la théorie de champ moyen des verres de spin (il s'agit d'un problème qui relève de la physique de la matière condensée et de la physique statistique, et ces mots sont précisés ci-dessous), il est découvert que la distribution des vallées dans l'espace de configuration possède une structure ultramétrique. C'est une surprise. Aucun des auteurs ne connaissait le mot ni la chose, en dépit de sa simplicité et de leur longue maturation en mathématiques.

"(Il) s'est produit à plusieurs reprises un phénomène qui ne cesse d'intriguer physiciens et philosophes. Lorsque sont nées les conceptions révolutionnaires de la Physique moderne, relativité et mécanique quantique, on a constaté avec surprise que les outils mathématiques nécessaires à leur développement avaient **déjà** été conçus et étudiés par les mathématiciens, en vue de problème internes des mathématiques, et sans soupçonner le moins du monde qu'ils pourraient un jour avoir d'autres applications.

Il ne faudrait cependant pas croire que ces exemples spectaculaires représentent ce qui se passe dans la majorité des cas. Ils sont au contraire assez exceptionnels..."(2)

En voici donc un nouvel exemple, relativement mineur peut-être comparé à d'autres, mais qui fait une histoire amusante à raconter, à cause de sa simplicité et de sa généralité (physique statistique, théorie de l'optimisation, biologie)(3,4).

3. Histoire de l'ultramétricité

Pour nos besoins, je soulignerai cinq dates : 1897, 1910, 1944, 1967, 1984.

En 1897, Kurt Hensel introduisit la notion de nombres p-adiques (5). Et lorsque la notion d'espace métrique eut été dégagée (M. Fréchet, 1906), il fit usage de ces concepts topologiques, contribuant ainsi à la géométrisation de la théorie des nombres.

Le mot ultramétrique apparut cependant bien plus tard et il est dû, semble-t-il, à Marc Krasner (1912-1985). Dans une note présentée à l'Académie des Sciences, le 23 octobre 1944, intitulée "Nombres semi-réels et espaces ultramétriques", il élucida la généralité topologique des espaces ultramétriques, au-delà de leur berceau algébrique (6).

Autour de 1967, la notion d'ultramétricité sort, pour la première fois, des mathématiques pures, et fait son entrée dans la taxonomie (7,8), science des classifications en général, et en particulier des êtres vivants. Grâce à la phylogénie moléculaire , qui présente plusieurs avantages par rapport à la traditionnelle phylogénie morphologique, le caractère ultramétrique de l'évolution biologique apparaît de plus en plus clairement (9).

A partir de 1984, de manière indépendante, l'ultramétricité gagne la physique (théorie des transitions de phase dans les systèmes désordonnés, théorie de la diffusion) et puis s'étend au-delà vers les sciences pour l'ingénieur (analyse des paysages d'énergie pour des problèmes d'optimisation, algorithme de recuit simulé) et vers de nouveaux horizons de la biologie (réseaux de neurones, mémoires adressables par le contenu).

4. Rappel et discussion préliminaire

Un espace métrique est un espace doté d'une distance. Une distance satisfait l'inégalité triangulaire :

$$d(A,C) \leq d(A,B) + d(B,C) \qquad 1)$$

L'inégalité ultramétrique est une inégalité plus forte :

$$d(A,C) \leq \mathrm{Max}\,\{d(A,B)\,,\,d(B,C)\} \qquad 2)$$

On parle alors de distance ultramétrique et d'espace ultramétrique.

Comme l'avait énoncé Krasner dès 1944(6), dans un espace ultramétrique tout point à l'intérieur d'une boule est lui-même centre de la boule, et le diamètre d'une boule est égal à son rayon. Si deux boules ne sont pas disjointes, alors l'une est contenue dans l'autre.

En bref, l'inégalité ultramétrique implique que les triangles sont soit équilatéraux, soit isocèles à base étroite.

En termes physiques, l'ultramétricité signifie absence d'intermédiaire. Dans un ensemble ultramétrique, il n'y a pas de point intermédiaire entre deux points donnés. Si un ensemble ultramétrique est plongé dans un espace euclidien, il y est très éparpillé.

Cette remarque va nous permettre de remonter aux sources des structures ultramétriques dans les sciences naturelles. Tous les exemples que nous allons discuter concernent des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. Un processus d'échantillonnage aléatoire sur un hypercube de dimension infinie produit, à travers la loi des grands nombres, un ensemble ultramétrique. Un processus de marche aléatoire avec branchements, semblable au processus d"évolution neutre"(9) en phylogenèse, engendre un ensemble ultramétrique (non trivial).

Depuis un siècle, la physique statistique s'intéresse aux transitions de phase qui apparaissent dans la limite thermodynamique, $N \rightarrow \infty$, d'un grand nombre N de particules. L'apparition d'un ordre à grande distance, d'une rigidité associée, sont des propriétés émergentes bien connues des transitions de phase dans les milieux homogènes(10). L'ultramétricité est une propriété émergente remarquable qui caractérise certaines transitions spécifiques de milieux hétérogènes. C'est ainsi que dans la transition verre de spin, l'ultramétricité triviale de la phase paramagnétique (phase de haute température) se transforme en une ultramétricité non triviale dans la phase verre de spin (phase de basse température).

5. Les verres de spin : des matériaux au modèle

Le terme verre de spin (spin glass) est d'origine récente (vers 1970). Il fut créé pour désigner des matériaux magnétiques désordonnés. Un archétype est $\underset{\sim}{Cu}$ Mn ; typiquement quelques pour cent d'atomes de manganèse, porteurs de moment magnétique, dilués dans un cristal régulier de cuivre, matériau métallique non magnétique. Les moments magnétiques (spins) interagissent par des couplages de signes oscillants, si bien que pour certains couples de spins l'énergie est minimisée lorsqu'ils sont parallèles (couplages ferromagnétiques), alors que pour d'autres c'est le contraire (couplages antiferromagnétiques).

L'histoire de la physique des verres de spin est passionnante mais elle est trop fertile en rebondissements, pour être racontée ici (11). Les deux questions centrales furent : la transition observée expérimentalement, en fonction de la température, est-elle d'un type nouveau ? Cette transition est-elle franche (température de transition précise) ou graduelle ? Le terme "verre de spin" reflète l'opinion d'une époque où la transition était considérée comme vitreuse, graduelle.

Ces considérations sont instructives, mais pas vraiment nécessaires. En effet, depuis dix ans, il existe un modèle bien précis, qui est intéressant en lui-même, quels que soient les motifs historiques qui ont présidé à sa naissance. Il s'agit du modèle à portée infinie, dit aussi théorie de champ moyen des verres de spin, dit encore modèle Sherrington-Kirkpatrick (S.K). En voici la définition.

On se donne un hamiltonien (énergie)

$$\mathcal{H} = -\sum_{(ij)} J_{ij}\, S_i\, S_j \qquad 3)$$

où S_i est un spin d'Ising ($S_i \pm 1$) placé au site i. Les couplages d'échange J_{ij} sont des paramètres aléatoires indépendants. La somme porte sur tous les couples (ij). Pour assurer une limite thermodynamique convenable lorsque le nombre de spins N tend vers l'infini, la distribution $P(J_{ij})$ est normalisée de manière que son premier moment soit égal à J_o/N et son second cumulant égal à J^2/N. Nous supposerons ici $J_0 = 0$.

Le programme consiste à faire d'abord la moyenne thermodynamique sur les spins (à distribution $\{Jij\}$ donnée) puis à effectuer la moyenne sur le désordre des interactions. En bref, il faut calculer $\overline{\mathrm{Log}\, Z}$, où

$Z\{J_{ij}\} = \mathrm{Tr}_{\{S_i\}}\, e^{-\beta\mathcal{H}}$ est la fonction de partition, et où la barre signifie une moyenne sur la distribution des J_{ij} ($\beta = \frac{1}{T}$, T est la température).

6. Résultats et interprétation physique

Pour T > Tg = J, le système est dans la phase paramagnétique qui est ergodique. A T = Tg, il y a brisure d'ergodicité. Pour T < Tg, il existe dans l'espace de configuration (hypercube des $\{S_i\}$) un ensemble de vallées, séparées par des barrières infinies. Si bien que lorsque le système se trouve dans une vallée, il y reste et n'a aucune chance d'explorer les états de même énergie situés dans les autres vallées (ce qui est notre définition de l'ergodicité brisée).

Noter que les transitions de phases usuelles (ferromagnétique par exemple), qui sont caractérisées par des brisures spontanées de symétrie, sont aussi accompagnées de brisure d'ergodicité (par exemple, pour des ferromagnétiques d'Ising, il y a deux vallées). Les vallées se déduisent alors précisément par les opérations de la symétrie spontanément brisée.

La nouveauté dans le cas de la transition verre de spin est qu'il y a une prolifération de vallées qui ne sont pas reliées par des opérations de symétrie. En particulier, leurs énergies libres diffèrent. Il y a des vallées hautes et des vallées basses.

Pour caractériser la distribution des vallées dans l'espace de configuration, on définit la fonction P(q), qui est la probabilité pour que deux vallées prises au hasard aient un recouvrement égal à q (12) :

$$P(q) = \sum_{s,s'} W_s W_{s'}\ \delta(q - q_{ss'}) \qquad , \qquad 4)$$

où W_s est le poids de Boltzmann associé à la vallée s, et où le recouvrement des vallées s et s' est défini par :

$$q_{ss'} = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle_s \langle S_i \rangle_{s'} \qquad , \qquad 5)$$

qui n'est rien d'autre que le produit scalaire dans l'espace de configuration, et qui est donc un indice de proximité.

Dans le formalisme des répliques, P(q) est donné par

$$\int_0^1 \overline{P(q)}\, e^{yq}\, dq = \lim_{n\to 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{(\alpha\beta)} e^{y q_{\alpha\beta}} \qquad 6)$$

Pour $T < T_g$, la fonction $P(q)$, calculée dans le schéma de brisure de la symétrie des répliques, possède une composante continue, à la différence des phases ordonnées habituelles, où la fonction se réduit à une ou plusieurs fonctions de Dirac.

De plus, on peut montrer que $P(q)$ n'a pas une limite unique, bien définie, lorsque $N \to \infty$. Ce phénomène d'absence d'automoyennage sur le désordre (lack of self-averaging) signifie qu'il y a fluctuation d'échantillon à échantillon.

Mais la plus grosse suprise vint lorsqu'on s'intéressa à la statistique des triangles (1) :

$$P(q_1,q_2,q_3) = \sum_{s,s',s''} W_s W_{s'} W_{s''}\, \delta(q_1-q_{ss'})\,\delta(q_2-q_{s's''})\,\delta(q_3-q_{ss''}) \qquad 7)$$

on trouve en effet, pour $T < T_g$,

$$\overline{P(q_1,q_2,q_3)} = \frac{1}{2}\left\{ \overline{P(q_1)}\,\overline{P(q_2)}\,\theta(q_1-q_2)\,\delta(q_2-q_3) + \text{perm. circ.}\right\}$$
$$+ \frac{1}{2}\,\overline{P(q_1)}\,x(q_1)\,\delta(q_1-q_2)\,\delta(q_2-q_3) \qquad , \qquad 8)$$

où $x(q_1) = \int_0^{q_1} \overline{P(q)}\,dq$. La première ligne de 8) correspond à des triangles isocèles à base étroite, et la deuxième ligne à des triangles équilatéraux. (Noter que le poids total de chacun des quatre termes dans 8) est égal à $1/4$.) Ainsi donc, il y a ultramétricité à toute température. Pour $T > T_g$, dans la phase paramagnétique, $P(q) = \delta(q)$, les triangles sont tous équilatéraux et l'ultramétricité est triviale.

En bref, au cours de la transition verre de spin, l'ultramétricité est préservée mais son contenu change, à cause de la brisure d'ergodicité. Dans la phase verre de spin, la distribution des vallées dans l'espace de configuration possède une répartition hiérarchique en amas emboîtés.

Il existe un point, que j'ai passé sous silence ci-dessus, et que je voudrais maintenant rétablir. La transition verre de spin à T_g, en l'absence d'un champ magnétique, s'accompagne aussi d'une brisure de symétrie globale ordinaire. La symétrie dont il s'agit est la symétrie par renversement du temps, qui revient à changer tous les signes des spins. Evidemment, l'énergie 3) est invariante dans une telle opération. Le groupe de symétrie est Z_2 (comme dans une transition ferromagnétique ordinaire). Il s'ensuit qu'en dessous de T_g l'ensemble des vallées est divisé en deux sous-ensembles, reliés par cette symétrie. Et l'ultramétricité ne tient qu'à l'intérieur de chaque sous-ensemble séparément. Cette circonstance est particulière au cas du champ nul. En présence d'un champ magnétique fini, la symétrie par renversement du temps disparaît et seule subsiste la transition proprement verre de spin.

7. Recuit simulé et problèmes d'optimisation

La méthode de Monte-Carlo standard se heurte à des difficultés, dans divers problèmes d'optimisation, à cause de l'allure de leurs paysages d'énergie, qui entraîne des temps de relaxation très longs. La méthode de recuit simulé, inspirée par les techniques de fabrication des cristaux, est une méthode de Monte-Carlo augmentée d'un programme de variation de la température. Cette méthode numérique fut d'abord mise en oeuvre sur des problèmes de verre de spin. Puis elle fut appliquée à des problèmes d'optimisation combinatoire difficiles, tel le problème du voyageur de commerce, qui est un archétype des problèmes NP-Complets, et à d'autres problèmes complexes, en ingénierie et en biologie (13).

Ces problèmes d'optimisation sont souvent caractérisés par des contraintes antagonistes, qui les rapprochent des systèmes frustrés désordonnés tels que les verres de spin. La frustration des verres de spin est liée à l'existence de nombreuses boucles fermées sur lesquelles le produit des interactions est de signe négatif ; ce fait est à l'origine de l'existence d'un grand nombre d'états métastables, ou vallées. Dans le problème du voyageur de commerce (trouver le chemin fermé le plus court passant par des points donnés), il y a conflit entre des contraintes locales et globales.

L'analogie avec les verres de spin a conduit à se demander s'il existait aussi, pour ces problèmes, une structure ultramétrique des minima locaux dans l'espace de configuration (14). Là encore, l'ultramétricité serait obtenue dans la limite des grandes tailles. Toute une activité s'est développée pour définir des indices ou critères d'ultramétricité et suivre leur variation, lorsque la taille des échantillons augmente.

Ces analyses de paysages d'énergie, et l'utilisation du formalisme des répliques(15), fournissent une nouvelle approche, toute récente mais prometteuse, de la théorie de la complexité algorithmique.

8. Réseaux de neurones et mémoires

L'intérêt pour les réseaux de neurones a pour origine la modélisation du cerveau, mais aussi la conception de dispositifs artificiels. On peut associer un paysage d'énergie à un tel réseau, avec la dynamique neuronale standard, pourvu que les connexions (synapses) soient symétriques. C'est à J.J. Hopfield(16) que revient le mérite d'avoir souligné qu'un paysage d'énergie fournit le modèle le plus simple pour une mémoire adressable par le contenu. Les minima locaux sont les mémoires enregistrées et leur rappel se fait par une dynamique de gradient. Des règles d'apprentissage permettent l'adaptation des paysages d'énergie. Utilisant l'analogie spin-neurone, la règle formellement la plus simple, conduit à considérer l'hamiltonien 3) avec :

$$J_{ij} = \sum_{s=1}^{M} \mu_i^s \mu_j^s$$

après mémorisation de M configurations $\{S_i = \mu_i^s\}$. Supposez que les configurations mémorisées soient choisies aléatoirement. Bien évidemment, si M devient très grand, M N, les interactions Jij (efficacités synaptiques) deviennent des variables effectivement indépendantes, et on retombe sur le cas verres de spin. Une théorie détaillée récente(17) a permis d'interpoler entre le cas ferromagnétique (M=1) et la limite verre de spin. Des transitions apparaissent pour $M \sim 0.05\, N$ et pour $M \sim 0.14 N$, $N \to \infty$. Cette théorie constitue un pas en avant important en mécanique statistique car elle montre la possiblité de décrire analytiquement un comportement très complexe des états métastables (avec usage de la théorie de Morse), et d'autre part, elle établit une passerelle entre les transitions de phase habituelles à symétrie brisée et les transitions verres de spin, avec brisure de symétrie des répliques. Elle soulève des problèmes nouveaux en théorie des probabilités. Cependant, dans son cadre actuel, ce modèle ne pourvoit pas la mémoire d'une structure hiérarchique, ce qui serait clairement désirable pour des motifs de catégorisation.

Deux suggestions récentes, complémentaires, ont été avancées de manière à obtenir une mémoire "ultramétrique". L'une part d'un paysage d'énergie de type verre de spin et introduit des contraintes d'apprentissage fortes, de manière que l'arbre des configurations soit élagué par un apprentissage sélectif, tout en préservant l'ultramétricité initiale(18). L'autre introduit une catégorisation hiérarchique au niveau de l'encodage, grâce à une architecture perceptuelle en couches successives(19).

9. Remarques finales

L'ultramétricité non triviale est invisible sur les statistiques d'ordre 2 (loi de distribution des distances entre deux points) mais détectable par les statistiques d'ordre 3 (triangles). Il convient maintenant de se demander si des structures plus subtiles, cachées sur les statistiques d'ordre 3 mais apparentes à un ordre supérieur, ne pourraient pas présenter aussi un intérêt pour les sciences naturelles.

Un article de revue, intitulé "Ultrametricity for Physicists" présente de manière plus complète l'ensemble des sujets évoqués ci-dessus (20).

Remerciements : Je remercie mes collègues R. Rammal et M. Virasoro pour de nombreuses discussions sur la signification physique de l'ultramétricité.

Références

(1) M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse, M. Virasoro, Phys. Rev. Lett. 52, 1156 (1984) ; J. Physique 45, 843 (1984)

(2) J. Dieudonné, **Abrégé d'histoire des mathématiques** (Hermann, 1978)

(3) G. Toulouse, Helv. Phys. Acta 57, 459 (1984) ; M. Mézard, M. Virasoro, J. Physique 46, 1293 (1985)

(4) M. Mézard, in Images de la Physique, Supp. au n° 59 (Courrier du CNRS, 1985)

(5) Y. Amice, **Les nombres p-adiques** (P.U.F, 1975)

(6) M. Krasner, C.R.A.S. 219, Tome II, 433 (1944)

(7) J.P. Benzecri, Cours de 1965 reproduits dans **L'analyse des données 1, La Taxinomie** (Dunod, 1984)

(8) C.J. Jardine, N. Jardine, R. Sibson, Math. Biosciences 1, 173 (1967) ; S.C. Johnson, Psychometrika 32, 241 (1967) ;

J.A. Hartigan, J. Am. Stat. Ass. 62, 1140 (1967)

(9) M. Kimura, **The Neutral Theory of Molecular Evolution** (Cambridge U. Press, 1983)

(10) P.W. Anderson, **Basic Notions of Condensed Matter Physics** (Benjamin, 1984)

(11) G. Toulouse, in Congrès 1981 de la Société Française de Physique (Les éditions de Physique, 1982) ; in Lecture Notes in Physics Vol.192 (Springer 1983)

(12) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 50, 1946 (1983)

(13) S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr, M.P. Vecchi, Science 220, 671 (1983)

(14) S. Kirkpatrick, G. Toulouse, J. Physique 46, 1277 (1985)

(15) M. Mezard, G. Parisi, J. Phys. Lett. 46, L.771 (1985)

(16) J.J. Hopfield, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) 79, 2254 (1982)

(17) D. Amit, H. Gutfreund, H. Sompolinsky, Phys. Rev. Lett. 55, 1530 (1985)

(18) J.P. Changeux, S. Dehaene, G. Toulouse, à paraître au P.N.A.S.

(19) M. Virasoro, in **Disordered Systems and Biological Organization**, eds. E. Bienenstock, F. Fogelman, G. Weisbuch (Springer 1985)

(20) R. Rammal, G. Toulouse, M. Virasoro, à paraître dans Reviews of Modern Physics.