Sur les transitions de phase dans la nature, l'informatique et au-delà

Leticia F. Cugliandolo

Sorbonne Université

leticia@lpthe.jussieu.fr
www.lpthe.jussieu.fr/~leticia

Chaos, order and beyond, Bruxelles, 2024

Sur les transitions de phase dans la nature, les réseaux de neurones et au-delà

Leticia F. Cugliandolo

Sorbonne Université

leticia@lpthe.jussieu.fr
www.lpthe.jussieu.fr/~leticia

Chaos, order and beyond, Bruxelles, 2024

Les états de la matière

Par example, H_2O et ses transitions de phase

La glace $\xrightarrow{0°C}$ l'eau $\xrightarrow{100°C}$ la vapeur

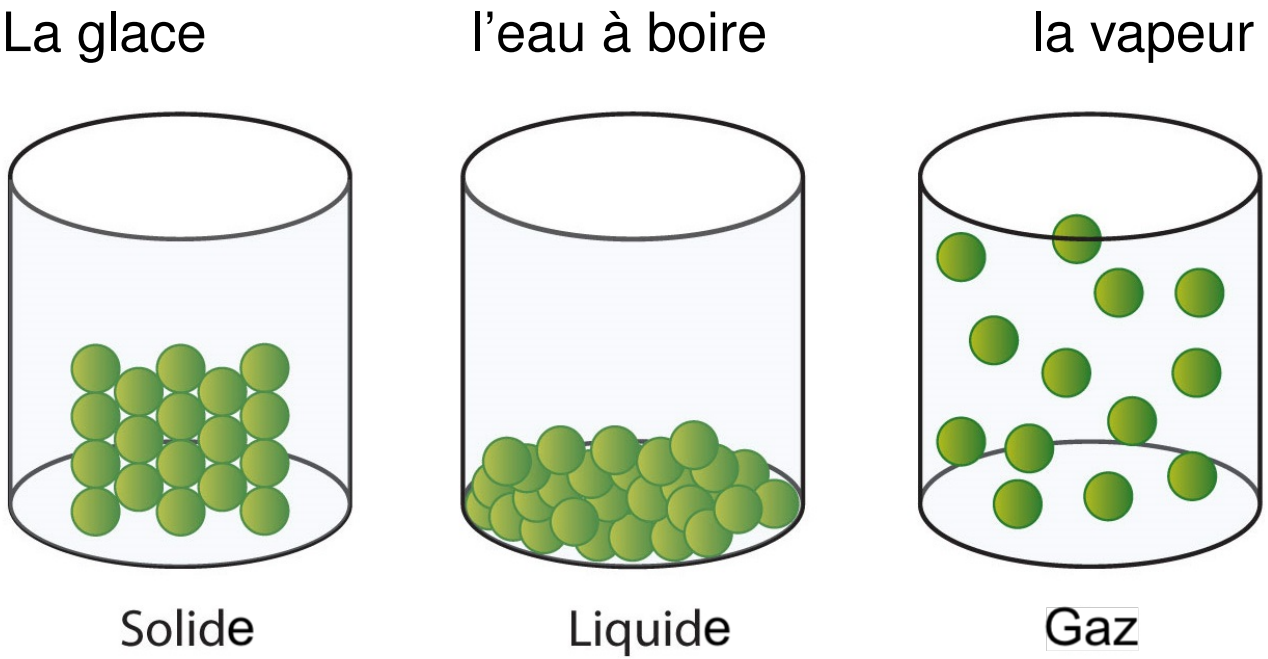
Les molecules sont toujours les mêmes H_2O

Un changement physique s'opère, mais pas chimique

Image V. K. Singh

Les états de la matière

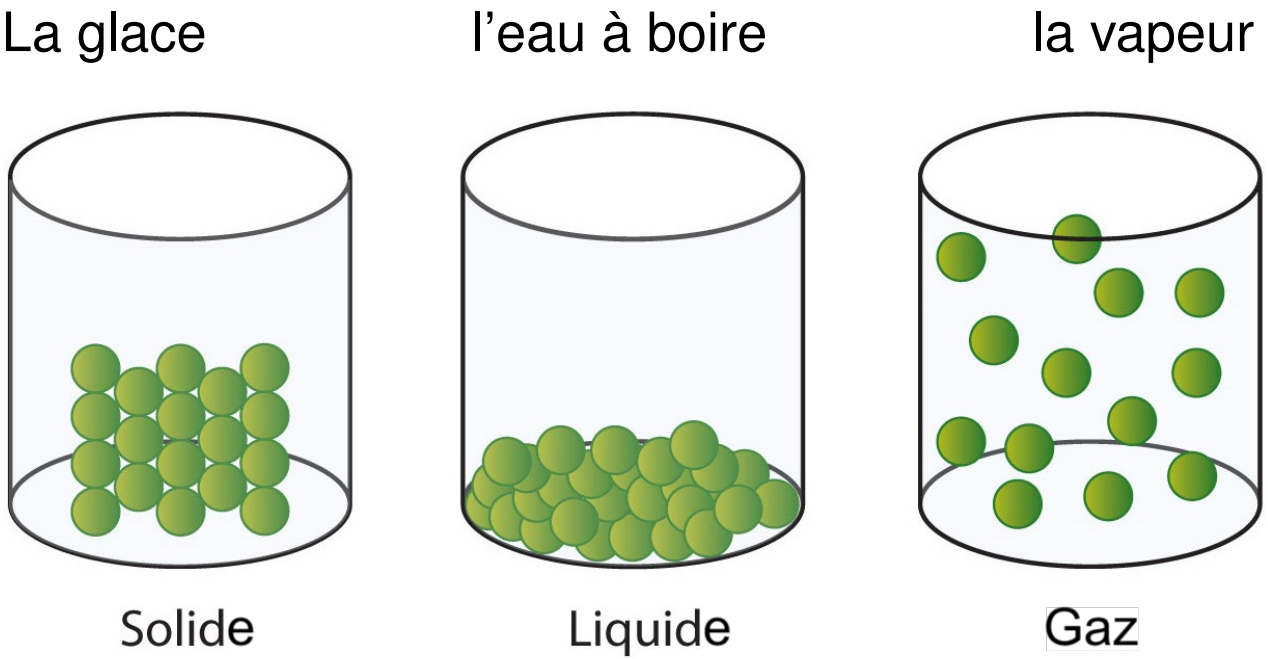
Par exemple, H_2O et ses propriétés macroscopiques



	Solide	Liquide	Gaz	
rigidité	oui	non	non	Macroscopique
forme	fixe	non	non	
compressible	non	non	oui	
coule	**non**	**oui**	**oui**	
structure microscopique	ordonné	désordonné	désordonné	

Les états de la matière

Par exemple, H_2O et ses propriétés macroscopiques



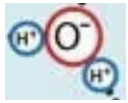
rigidité	oui	non	non	**Macroscopique**
forme	fixe	non	non	
compressible	non	non	oui	
coule	non	oui	oui	
structure microscopique	**ordonné**	**désordonné**	**désordonné**	

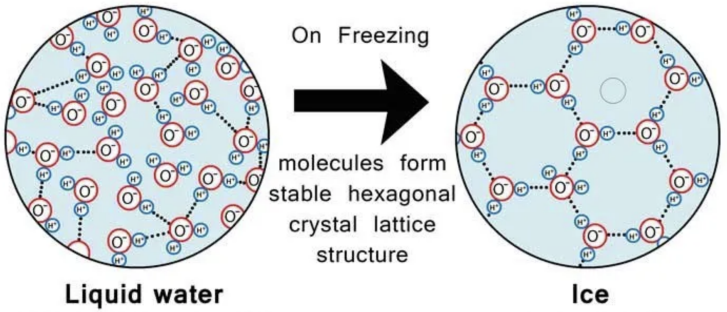
La physique statistique

Du microscopique au macroscopique

Elle développe des modèles simples et des méthodes mathématiques pour

microscopique $\mapsto$ macroscopique





Elle décrit le macroscopique et les transitions de phase (de façon très precise)

La théorie des probabilités et la statistique sont centrales $1 \mapsto N \gg 1$

Pendant longtemps l'interêt principale a porté sur les matériaux

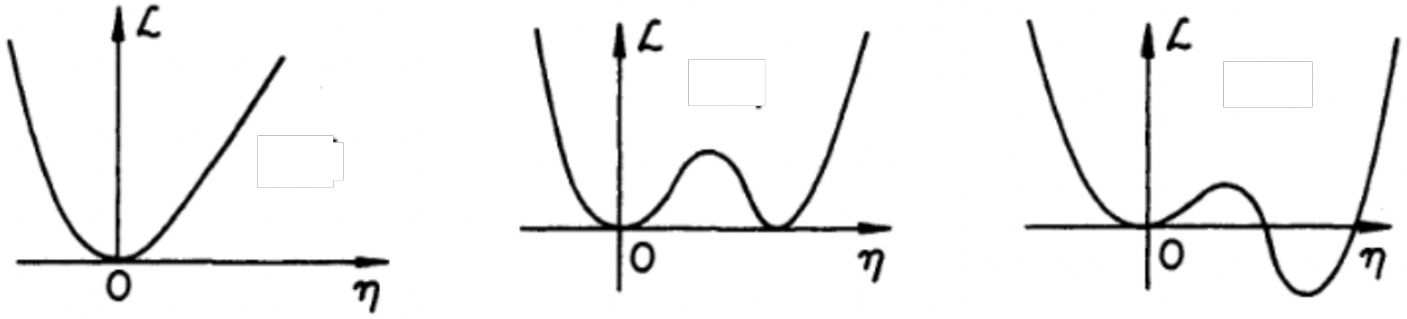
F. D. Haldane (Princeton), J. M. Kosterlitz (Brown) & D. J. Thouless (Seattle) - UK

Nobel 2016 "*for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter*"

Les paysages

une representation utile - dérivée mathématiquement

$T = 30°\text{C}$ $T = 0°\text{C}$ $T = -0.1°\text{C}$



liquide **co-existence liquide-glace** **glace**

la transition

Les états de la matière sont les vallées les plus profondes

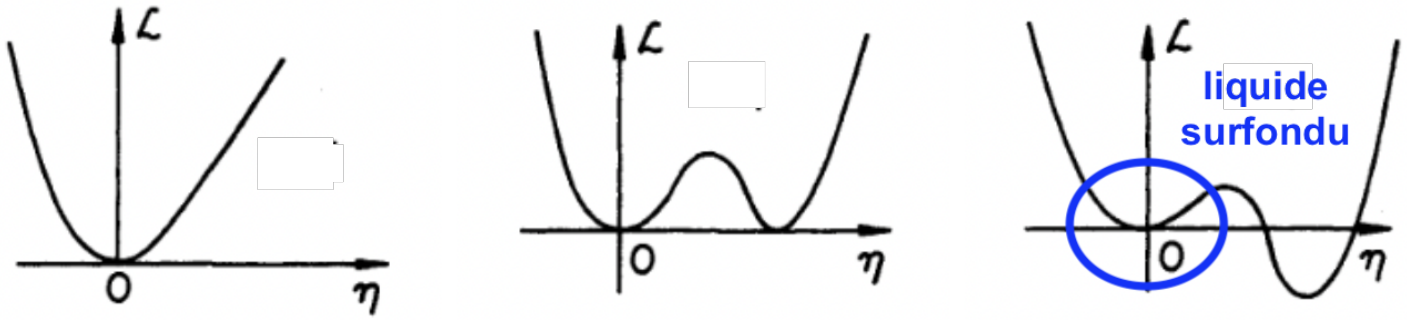
L. D. Landau *On the theory of phase transitions*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 7, 19 (1937)

(Kharkov/Moscou) Nobel 1962

Les paysages

une representation utile - dérivée mathématiquement

$T = 30°\text{C}$ $T = 0°\text{C}$ $T = -0.1°\text{C}$



liquide **co-existence liquide-glace** **glace**

la transition

La glace (vallée la plus profonde) est stable en dessous de $T = 0°$C

mais on peut surfondre l'eau liquide (metastable)

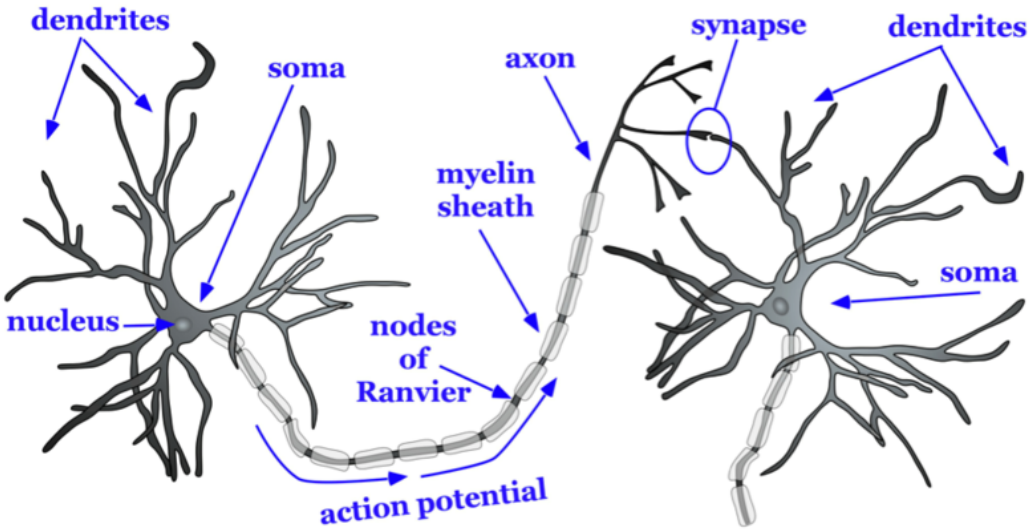
L. D. Landau *On the theory of phase transitions*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 7, 19 (1937)

(Kharkov/Moscou) Nobel 1962

Neurosciences et informatique

Les neurones

et leurs connections



neurone pré-synaptique – synapse – neurone post-synaptic

directional connection

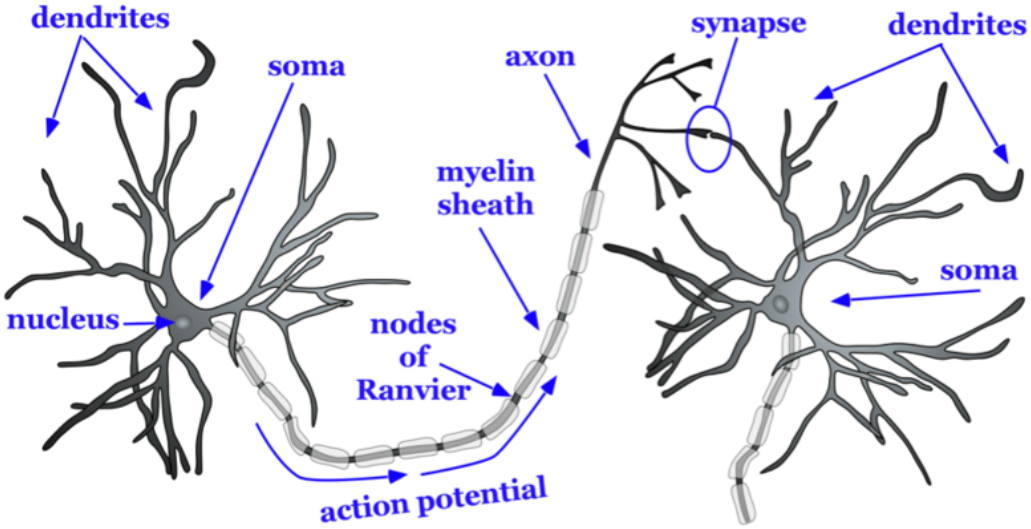
une “molecule” une autre “molecule”

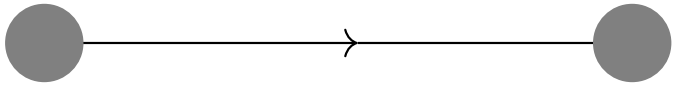
S. Ramón y Cajal, ca. 1890 (Madrid) **Nobel 1906** Physiologie et Medecine

Image **M. J. Hove & S. A. Martínez**, *Brain & Behaviour* 2024

Les neurones

On les modelise de façon aussi simple que possible





W. S. McCulloch & W. Pitts Bull. Math. Biophys. 5, 115 (1943)

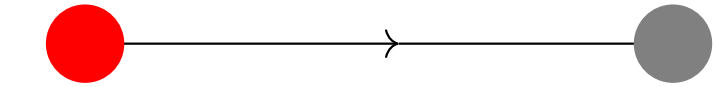
(neurophysiologist & logician at Chicago)

Les neurones

ainsi que leurs connections et leur activité

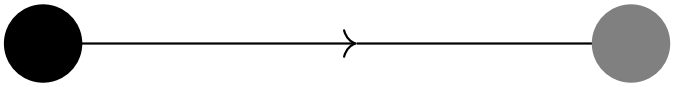
- le neurone pré-synaptique est actif et envoie de l'information ("fire")

  au neurone post-synaptique



$a = 1$

- le neurone pré-synaptique est quiescent



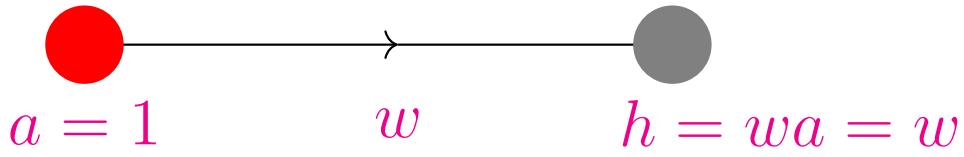
$a = 0$

Les neurones

et le signal reçu

- le neurone récepteur reçoit l'information envoyée par le neurone emetteur

  ponderé par le poids w synaptique

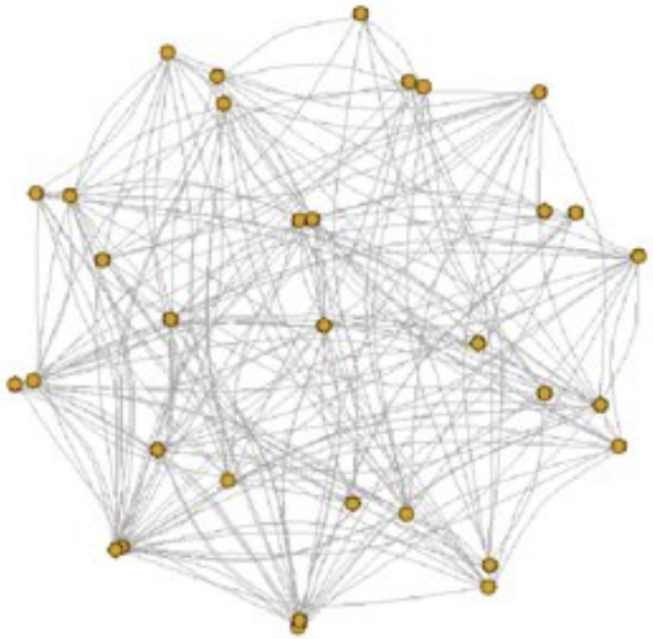


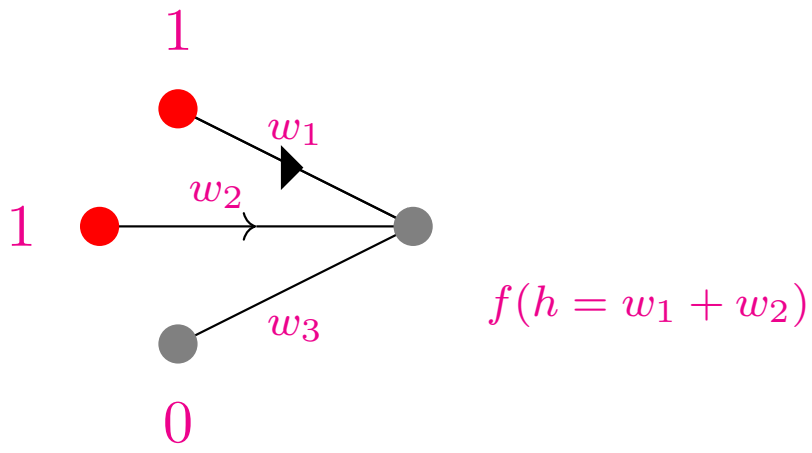
- si le neurone pré-synaptique est quiescent aucun signal arrive au deuxième neurone

- Le synapses peuvent être inhibitrices ($w = -1$) ou excitatrices ($w = 1$)

Les réseaux des neurones

des graphes avec de nombreux sommets et encore plus d'arêtes





À tout instant, chaque neurone calcule la somme des entrées envoyées par ses voisines, pondérées par les poids des synapses, h, et elle applique une fonction, f.

Si le résultat dépasse une limite, $f(h) > \theta$, le neurone recepteur émet à son tour, $a = 1$

Et ainsi de suite, sur tout le réseau.

Détails à préciser : dynamique en parallèle ou séquence aléatoire

Les réseaux de neurones

Fonctionnement

Où est la mémoire ? Dans les synapses, les w

D. O. Hebb, *The Organization of Behavior: A Neuropsychological Theory* (1949)
(psychologist, McGill, Montreal)

Peut-on construire un réseau de neurones qui reconnait un objet précédemment appris ?

Astuce de physicien théoricien : placer les neurones sur un graphe complet ($w \neq 0$), utiliser des spins $s = \pm 1$ et utiliser des synapses symétriques

= Système magnétique

J. J. Hopfield, *Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities.*, Proc. Nat. Acad. Sc. USA, 79, 2554 (1982) **(Princeton)** **Nobel 2024**

Le modèle de Hopfield

Les mémoires associatives - on pré-choisi les w

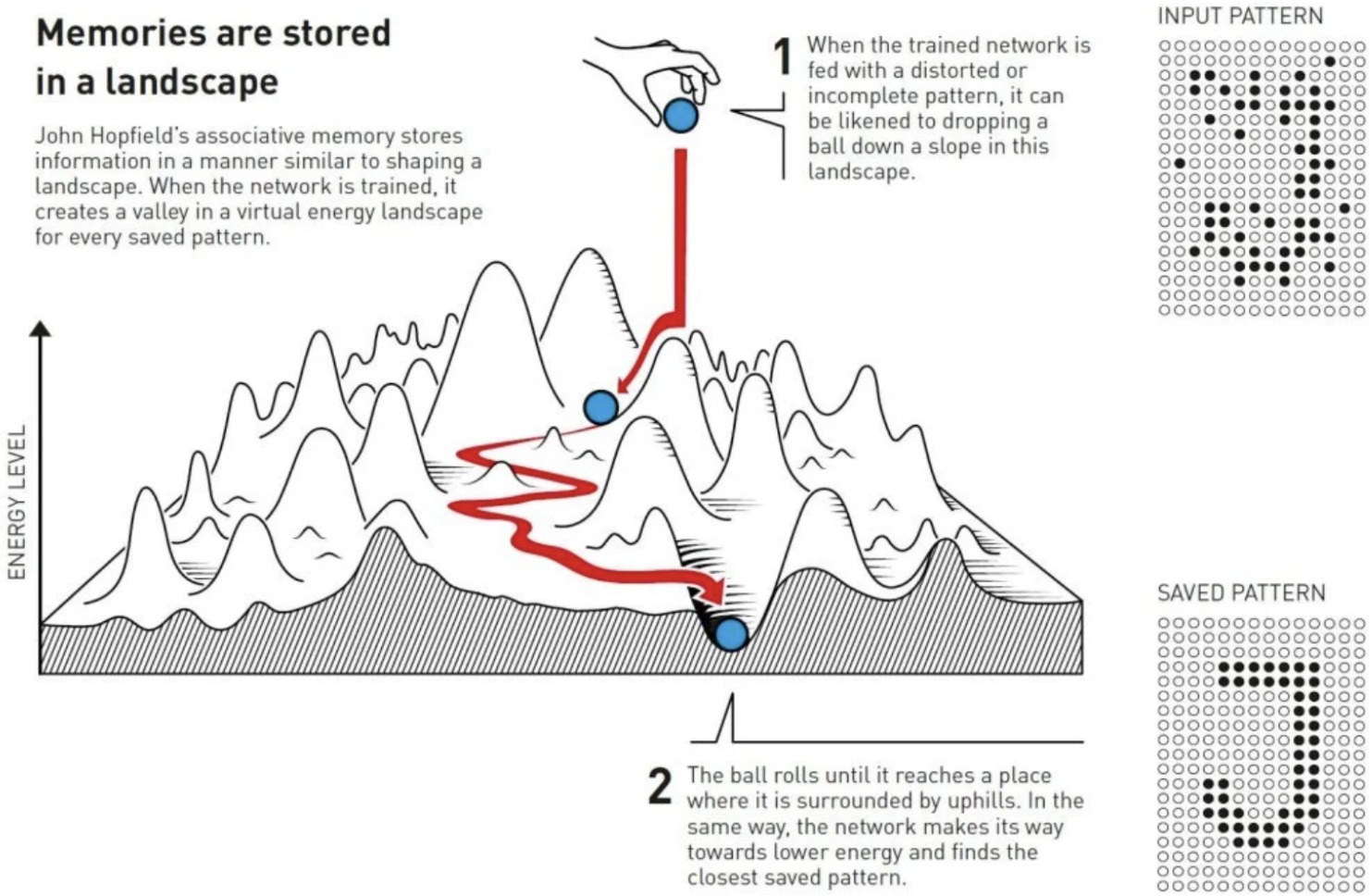


Image www.nobelprize.org

Le modèle de Hopfield

Les mémoires associatives - on choisi les w

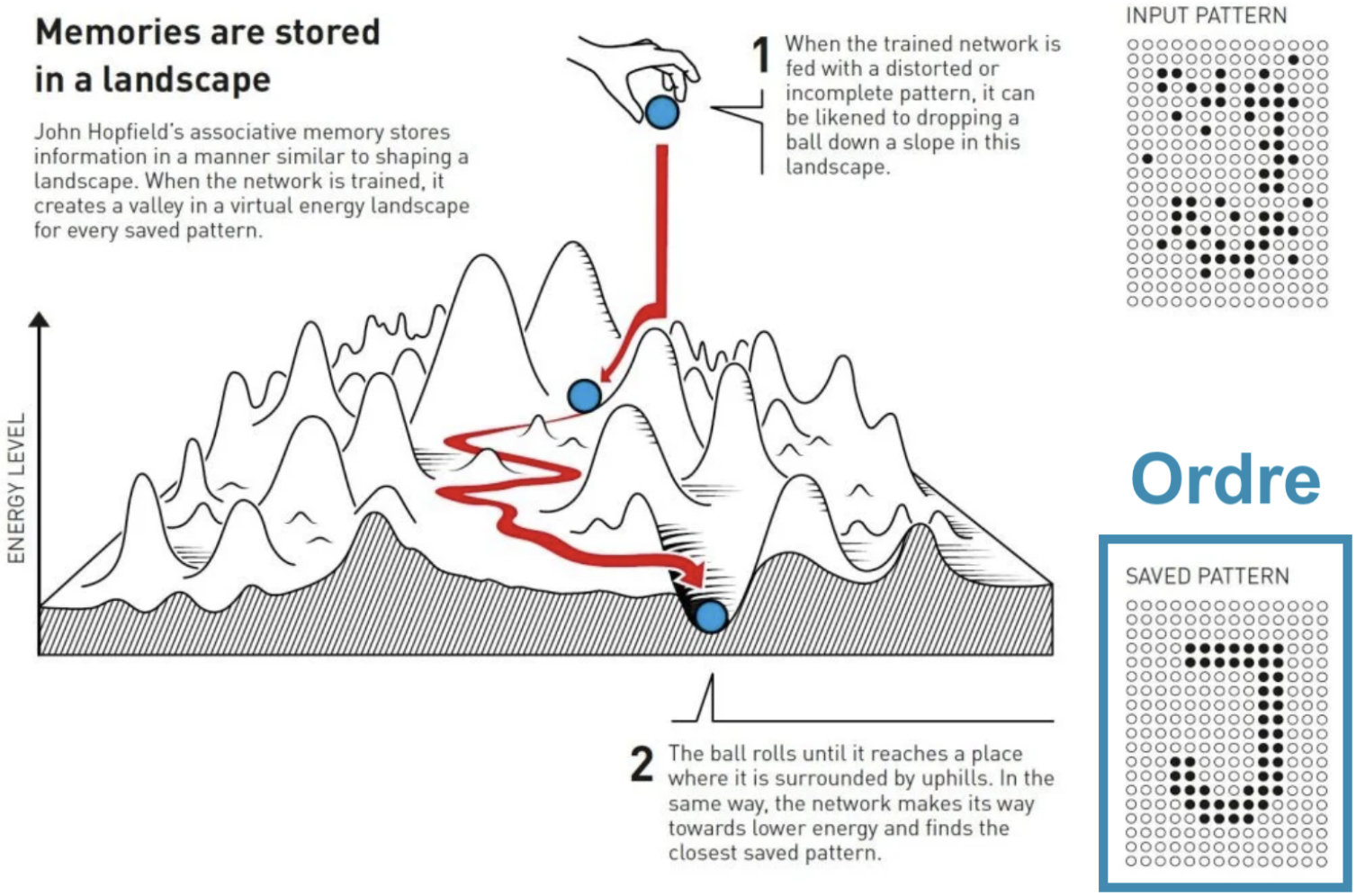


Image www.nobelprize.org

Le modèle de Hopfield

Propriétés

- Les synapses $\{w\}$ façonnent le paysage, la mémoire.
- Basins d'attraction : l'objet montré ne doit pas être trop différent de celui attendu pour que le réseau soit capable de le reconnaître.
- Le réseau a une capacité limitée : il existe une valeur critique de

$$\left(\frac{\text{nombre d}'\text{objets appris}}{\text{nombre de neurones}}\right)_c$$

au-delà de laquelle le réseau ne fonctionne plus

Transition de phase : ordre (fonctionnement correct) - désordre

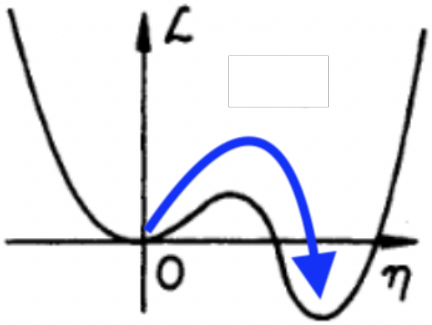
- Le réseau crée des vallées illégitimes qui ne correspondent à aucun objet appris

D. J. Amit, H. Gutfreund & H. Sompolinsky Phys. Rev. Lett. 55, 1530 (1985) avec les techniques de la physique statistique développées par G. Parisi **Nobel 2021**

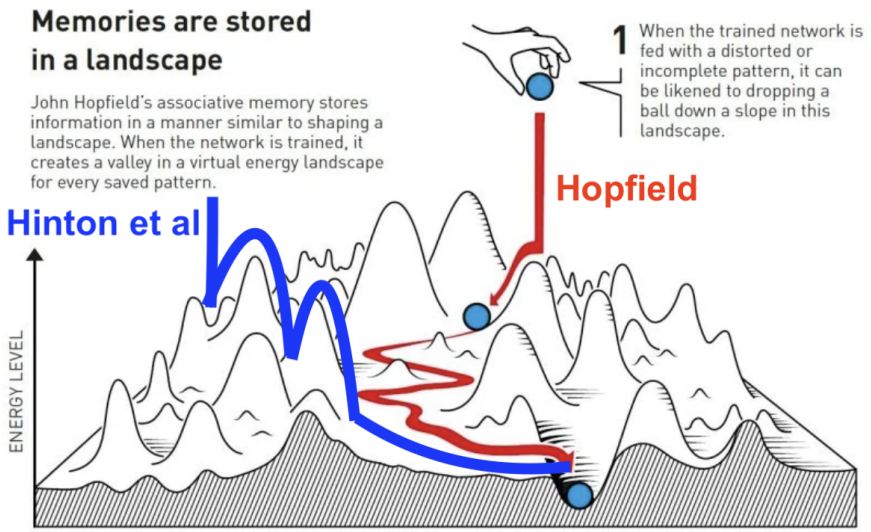
Machines de Boltzmann

Physique $\Rightarrow$ dynamique stochastique $\sim$ température

$T = -0.1°\text{C}$



liquid surfondu glace

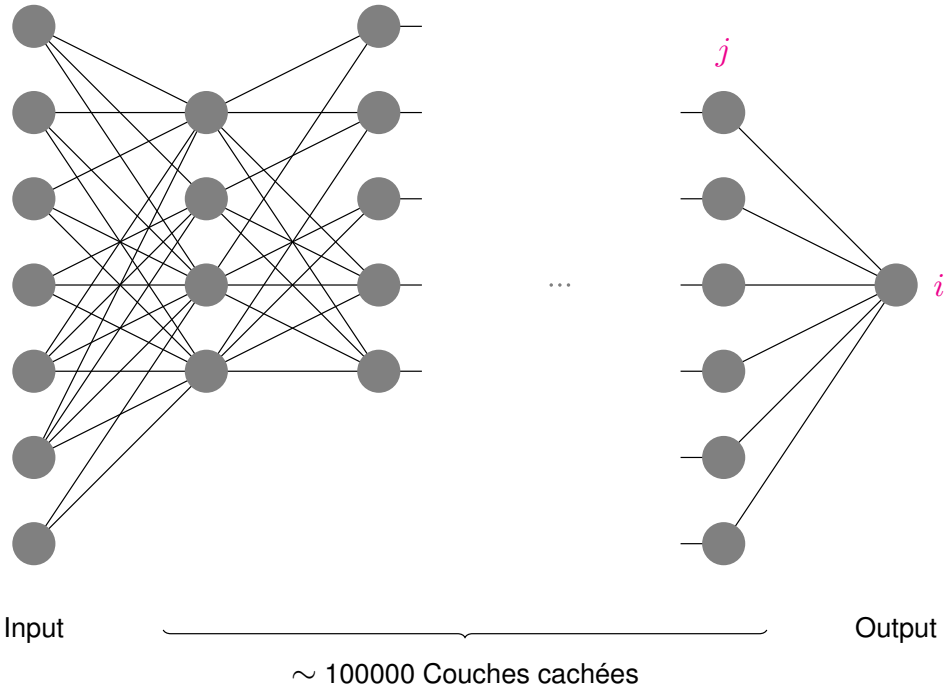


D. Ackley, G. E. Hinton & T. Sejnowski, *A Learning Algorithm for Boltzmann Machines*, Cognitive Science, **9** 147 (1985)

Deep learning

Machine de Boltzmann restreinte $\longrightarrow$ réseaux multicouches

Toutes les synapses sont dirigées de gauche à droite $\longrightarrow$



$$s_i = f\Big(\underbrace{\sum_j w_{ij} s_j}_{h_i}\Big)$$

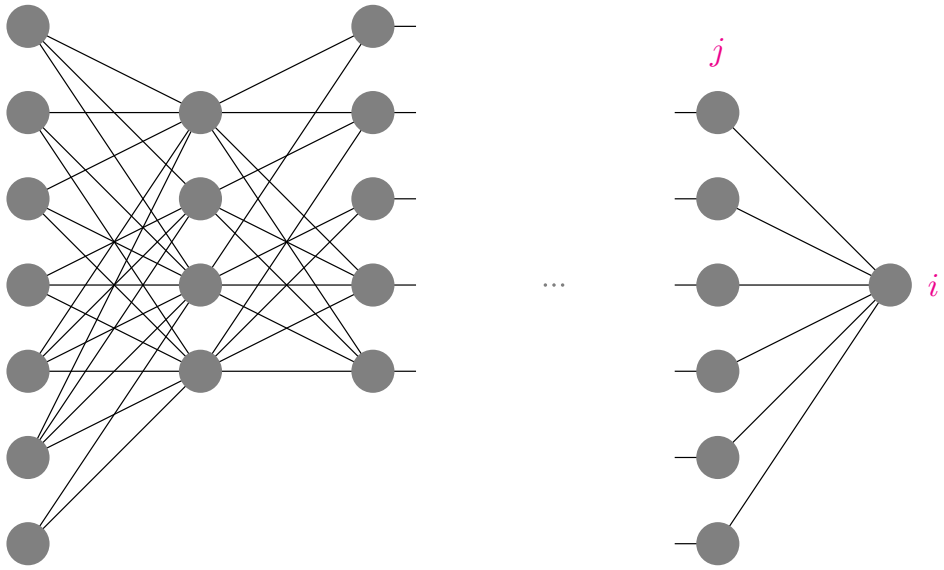
G. E. Hinton, des nombreux articles très influents sur **l'apprentissage** de ces réseaux, e.g.
D. E. Rumelhart, G. E. Hinton & R. J. Williams, *Learning representations by back-propagating errors*, Nature 323, 533 (1986)
Nombre de citations reçues par G. E. Hinton depuis 2019 : **564 667** **Nobel 2024**

Deep learning

Apprentissage avec Big Data et généralisation

Le réseaux représent une correspondance (fonction) entre un vecteur d'entrée et la sortie

La combinaison de nombreuses fonctions f permet au réseau d'approcher des fonctions extrêment complexes. Une fois apprises, elles donnent de nouvelles réponses



$$s_i = f\Big(\underbrace{\sum_j w_{ij} s_j}_{h_i}\Big)$$

$$F(\text{Input Data}) \; vs. \; \text{Data}$$

$$F(\text{New}) = \text{Result}$$

Injection de données

Classification

Apprentissage

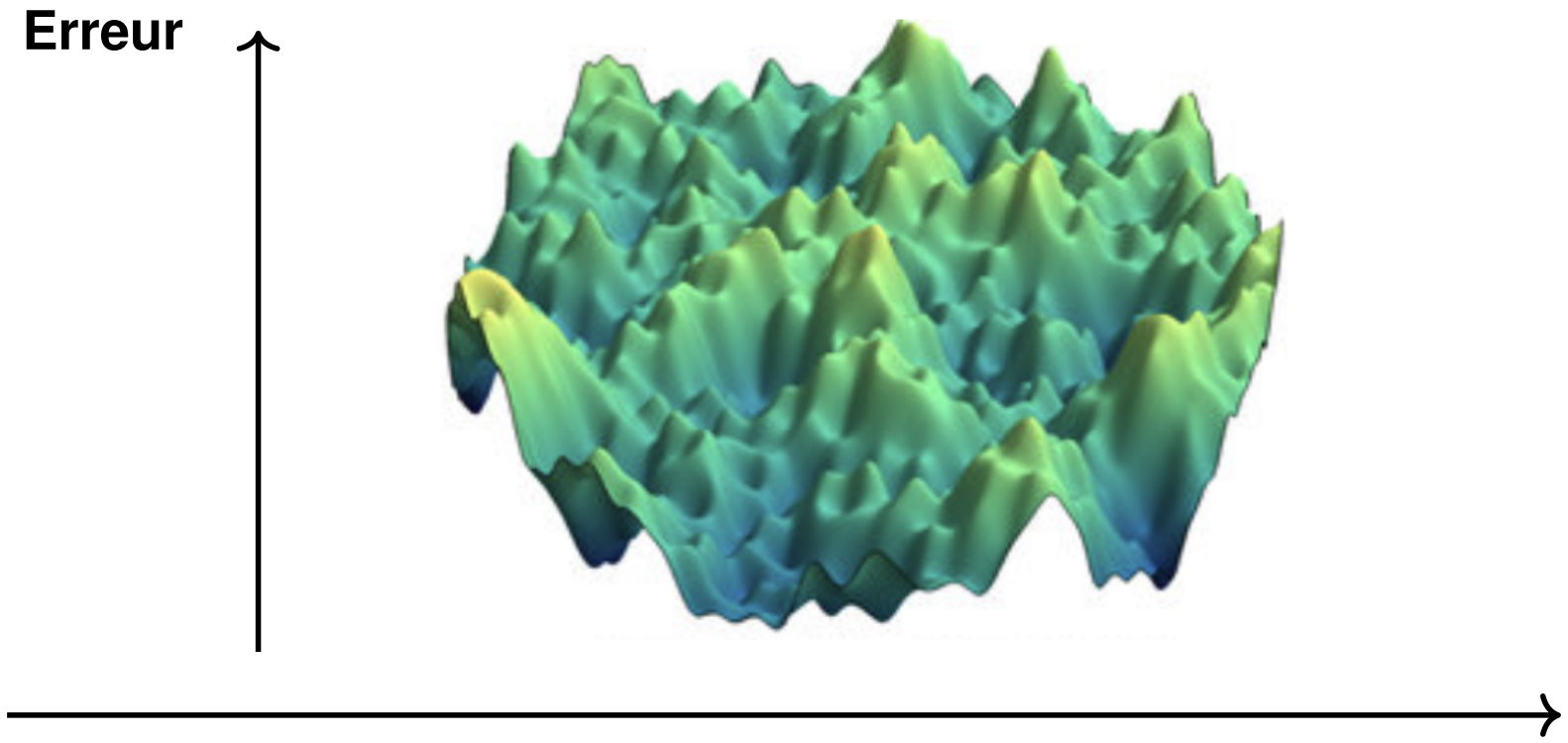
ajustement des poids

La fonction erreur

trouver le minimum absolu pour entraîner le réseau

Différence entre la sortie attendue et celle proposée par le réseau

(si on montre un chat à l'entrée, on nous propose un chat à la sortie ?)



Du chaos

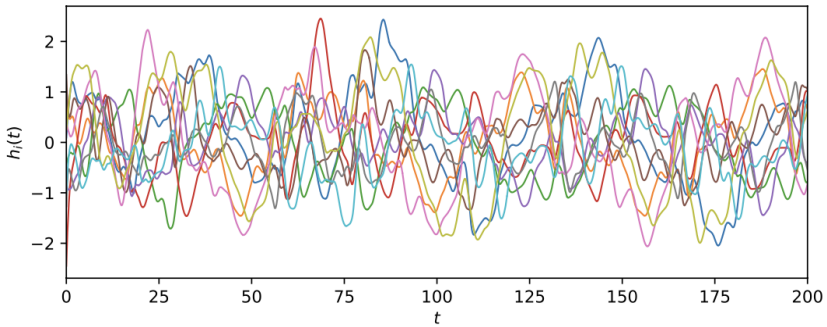
dans les réseaux de neurones

Un système dynamique, avec des neurones qui s'activent au cours du temps

$$h_i(t+\Delta t) = h_i(t) + \Delta t\Big[-h_i(t) + \sum_{j(\neq i)} w_{ij} s_j(t)\Big] \qquad s_i(t+\Delta t) = f(h_i(t+\Delta t))$$

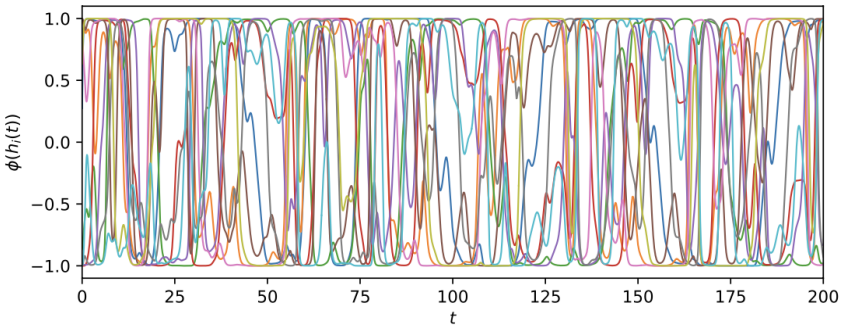
- Apparition de motifs d'activité irréguliers si $w_{ij} \neq w_{ji}$ (asymétrie)

potentiel action h_i



temps t

activité $-1 \leq s_i \leq 1$

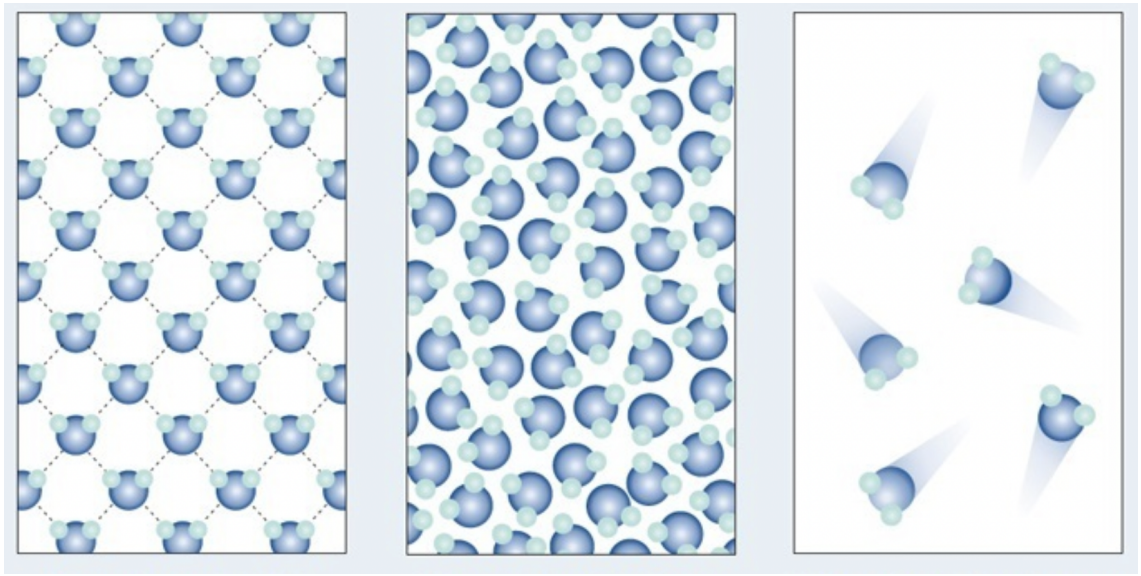


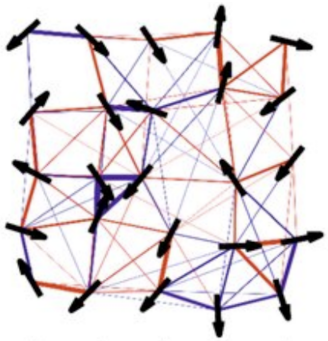
temps t

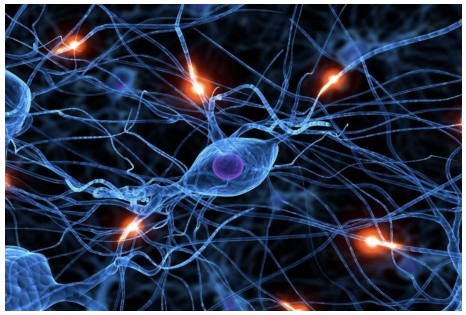
H. Sompolinsky, A. Crisanti & H-J Sommers, *Chaos in random neural networks*, Phys. Rev. Lett. **61**, 259 (1988)

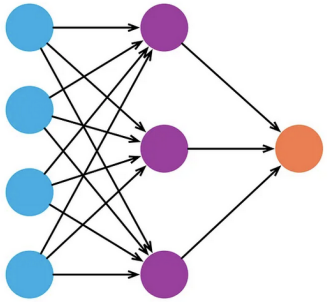
Ordre, transitions, chaos

quelques illustrations









AlphaFold, par **DeepMind**, prédit les structures des protéines (vallées d'un paysage)

D. Baker (Seattle), D. Hassabis and J. M. Jumper (DeepMind) **Nobel Chimie 2024**

Quelques chiffres

Deep learning vs. notre cerveau

- Chat GPT est un *large language model*

  "The exact number of neurons & synapses in GPT-4 hasn't been publicly disclosed"

  Chat GPT-3 a 175 milliards = $\underbrace{175\,000\,000\,000}_{11} \sim 10^{11}$ de paramètres

  Chat GPT-4 en a plus

- Le cerveau d'un être humain

  a 86 milliards $\sim \underbrace{100\,000\,000\,000}_{11} \sim 10^{11}$ de neurones

  5×10^{14} grains de sable dans la plage de Biarritz

  Chaque neurone reçoit $\sim 10\,000 = 10^4$ synapses

  $\underbrace{10\,000}_{4} \times \underbrace{100\,000\,000\,000}_{11} = \underbrace{1000\,000\,000\,000\,000}_{15} \sim 10^{15}$ de synapses

- 5×10^{14} grains de sable dans la plage de Biarritz