



HAL
open science

États métastables dans les systèmes désordonnés : des verres de spins aux

Alexandre Lefevre

► **To cite this version:**

Alexandre Lefevre. États métastables dans les systèmes désordonnés : des verres de spins aux. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2003. Français. NNT : . tel-00003321

HAL Id: tel-00003321

<https://theses.hal.science/tel-00003321>

Submitted on 8 Sep 2003

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.

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER
TOULOUSE III

THÈSE

présentée
pour obtenir

le grade de Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

par

ALEXANDRE LEFEVRE

**États métastables dans les systèmes vitreux : des
verres de spins aux milieux granulaires**

Soutenue le 4 juillet 2003 devant le jury composé de :

| | |
|---------------------------------|--------------------|
| Monsieur Alain Barrat | Examineur |
| Monsieur Jean-Philippe Bouchaud | Rapporteur |
| Monsieur Alan Bray | Examineur |
| Monsieur David Dean | Directeur de thèse |
| Monsieur Jorge Kurchan | Rapporteur |
| Monsieur Pierre Labastie | Président |

Remerciements

Cette thèse s’est déroulée au Laboratoire de Physique Théorique de l’Université Paul Sabatier à Toulouse. J’en remercie les trois directeurs successifs Jean Bellissard, Erik Sørensen et Didier Poilblanc.

David Dean a accepté d’encadrer mon travail durant ces trois ans. Son imagination débordante et son enthousiasme permanent m’ont fourni une énergie formidable pour avancer au sein de la physique des milieux désordonnés (à commencer par son bureau). La confiance dont il a toujours témoigné, associée à une grande liberté d’initiative m’ont permis de connaître ces moments de joie que seule la découverte scientifique peut procurer. De plus, sa patience “so british”, son humour (également “so british”) et sa bonne humeur constante ont contribué à rendre la thèse très agréable. Enfin, sa disponibilité et sa compréhension inconditionnelles dans les moments les plus difficiles ont été salvateurs. Pour tout cela, je qualifierai son (presque) premier encadrement de thèse d’exemplaire et je le remercie vivement.

Je remercie ensuite Jorge Kurchan et Jean-Philippe Bouchaud de m’avoir fait l’immense honneur de rapporter ma thèse. Le choix de Jorge s’imposait bien naturellement, puisqu’il est celui qui a donné une deuxième vie aux travaux d’Edwards sur la thermodynamique des milieux granulaires, et qu’il a encouragé mes efforts au cours de nombreuses discussions, durant lesquelles j’ai pu bénéficier de sa façon unique de réduire la complexité de la physique aux phénomènes essentiels qui la gouvernent. Le choix de Jean-Philippe s’imposait pour les mêmes raisons, ses contributions à la physique des milieux granulaires et plus généralement à la physique des systèmes désordonnés n’étant plus à présenter. De plus, son imagination très fertile m’a fourni de nombreuses pistes de recherche, dont certaines j’espère seront fructueuses. Je remercie Alan Bray de m’avoir fait l’honneur de quitter la pluie de Manchester pour participer à mon jury et pour le soutien qu’il m’a apporté à chacune de nos rencontres. Je remercie également Alain Barrat, qui lors de nombreuses discussions m’a beaucoup appris sur la physique des milieux granulaires, m’a beaucoup encouragé et m’a souvent apporté une critique très utile. Je remercie enfin Pierre Labastie d’avoir bien voulu présider le jury.

Durant ces trois années de thèse, j’ai eu l’occasion de profiter de l’expérience de nombreux physiciens (beaucoup) plus expérimentés. Je remercie pour cela tout particulièrement Leticia Cugliandolo, Satya Majumdar et Bertrand Duplantier, qui m’ont également beaucoup soutenu, ainsi que Giulio Biroli et Ludovic Berthier. Des interactions d’intensités diverses avec Armand Ajdari, Rafi Blumenfeld, Ian Campbell, Mike Cates, John Cardy, Nivedita Deo, Nicolas Destainville, Juanpe Garrahan, Claude Godrèche, Henk Hilhorst, Ron Horgan, Walter Kob, Jean-Marc Luck, Oli-

vier Martin, Hernan Makse, Naryanan Menon, Anita Mehta, Marc Mézard, Rémi Monasson, Andrea Pagnani, David Sherrington, Robin Stinchcombe, Federico Ricci Tersenghi, Éric Vincent, Frédéric Van Wijland et David Wales m'ont également beaucoup apporté. La participation à la session de juillet 2002 de l'École de Physique des Houches a constitué un tournant dans ma façon de voir la physique. Je remercie pour cela les organisateurs Jean-Louis Barrat et Jorge Kurchan. De plus, les interactions que j'ai eues avec tous les autres étudiants, parmi lesquels Éric Bertin, Colin Holmes, Florent Krzakala, Guillemette Picard, Gregory Scher, Guilhem Semerjian, Jacco Snoeijer, Virgile Viasnoff, Thomas Voigtmann et Olivia White, a été très enrichissante.

Je remercie Sam Edwards, qui m'a fait bénéficier de sa vision unique de la physique et découvrir les traditions de Cambridge, ainsi que Jasna Brujic, qui m'a présenté les diverses émulsions et mousses que l'on peut y trouver.

Je remercie enfin les membres du Laboratoire de Physique Théorique, au sein duquel le travail a toujours été un plaisir. Je remercie particulièrement les copains Andreas, David, Fabien, Florent, Mathieu, Nicolas et Sylvain, qui m'ont apporté tant d'assistance technique. Merci aussi à Jean-Pierre Daudey, grâce à qui ma thèse a été conclue par une partie de water-polo mémorable.

Enfin, je remercie tous ceux, famille et amis, qui m'ont accompagné pendant des années jusqu'ici, en particulier Nicolas, Daniel Carrière et Lionel Pelissier.

Pour Laetitia...

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Notations et acronymes les plus utilisés | 0 |
| Introduction | 3 |
| 1 L'état vitreux | 3 |
| 2 Perte d'équilibre et transition vitreuse | 3 |
| 2.1 Transition vitreuse | 4 |
| 2.2 Température de Kauzmann | 4 |
| 2.3 Importance du taux de refroidissement | 5 |
| 3 Quelques propriétés génériques de matériaux vitreux | 5 |
| 3.1 Vieillissement, brisure d'ergodicité | 6 |
| a) Vieillissement | 6 |
| b) Brisure d'ergodicité | 6 |
| 3.2 Dynamique "hors d'équilibre", température effective | 7 |
| a) Équilibre thermodynamique | 7 |
| b) Violation du théorème de fluctuation-dissipation | 7 |
| 3.3 Rajeunissement et mémoire | 9 |
| a) Rajeunissement | 9 |
| b) Mémoire | 9 |
| 4 Plan et objectifs de la thèse | 10 |
| | |
| A États métastables dans les verres de spins | 13 |
| | |
| I Verres de spins | 15 |
| 1 Introduction | 15 |
| 1.1 Verres de spins continus | 17 |
| a) La brisure de symétrie de réplique | 18 |
| b) États purs | 20 |
| 1.2 Verres de spins discontinus | 21 |
| a) Le modèle p-spin sphérique | 21 |
| b) Le scénario de la crise d'entropie | 22 |
| 2 Verres de spins à connectivité finie | 23 |
| 2.1 Statique par la méthode des répliques | 24 |
| a) Solution RS | 24 |
| b) Solution 1RSB | 25 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| c) | Signification de la brisure de symétrie de réplique | 26 |
| 2.2 | Autre systèmes à connectivité finie | 29 |
| a) | Problèmes d'optimisation | 29 |
| b) | Autres applications des systèmes à connectivité finie | 31 |
| II | États métastables dans les systèmes désordonnés | 33 |
| 1 | Introduction | 33 |
| 2 | Définition de différents types d'états | 33 |
| 2.1 | Barrières d'énergie libre | 33 |
| 2.2 | Divers types de minima locaux | 35 |
| 3 | Relation entre les états métastables et la dynamique à grands temps . | 37 |
| 3.1 | Température effective, quasi-équilibre et quasi-états | 37 |
| 3.2 | Structures inhérentes, décomposition de Stillinger et Weber | 39 |
| 4 | Calcul de l'entropie configurationnelle | 40 |
| 4.1 | Calcul numérique | 41 |
| a) | Par énumération exacte | 41 |
| b) | Par l'approche des structures inhérentes | 42 |
| c) | Par l'introduction d'un modèle auxiliaire | 43 |
| 4.2 | Calcul analytique | 45 |
| a) | Approximation recuite | 46 |
| b) | Calcul RS | 46 |
| 5 | Discussion des résultats | 49 |
| 5.1 | Comparaison entre les approximations | 49 |
| 5.2 | Discussion de la complexité | 51 |
| B | États métastables dans les milieux granulaires | 53 |
| III | Rôle des états métastables dans les milieux granulaires | 57 |
| 1 | Introduction aux milieux granulaires | 57 |
| 1.1 | Milieux granulaires secs | 57 |
| 1.2 | Empilements granulaires | 58 |
| 1.3 | Les états de la matière granulaire | 60 |
| a) | Gaz, liquide, solide | 60 |
| b) | Transition de blocage | 61 |
| 2 | Vibration des milieux granulaires | 62 |
| 2.1 | L'expérience de Chicago | 62 |
| a) | Dispositif expérimental | 62 |
| b) | Évolution de la densité | 63 |
| c) | Régime stationnaire | 68 |
| 2.2 | Quelques commentaires sur l'expérience de Chicago | 69 |
| 3 | États métastables et hypothèse d'Edwards | 71 |
| 3.1 | Mesure d'Edwards | 73 |
| 3.2 | Extension de la mesure d'Edwards aux systèmes vitreux | 75 |

| | |
|---|----------------|
| IV Taper des verres de spins | 79 |
| 1 Analogie entre les verres de spins et les milieux granulaires | 79 |
| 1.1 Algorithme de “tapping” | 80 |
| 1.2 Dynamique de l’algorithme de tapping | 81 |
| a) Vers le régime stationnaire | 81 |
| b) Dynamique stationnaire | 81 |
| 1.3 Mesure d’Edwards | 84 |
| 2 Modèles unidimensionnels | 85 |
| 2.1 La chaîne d’Ising | 85 |
| a) Dynamique des murs de domaines | 86 |
| b) Mesure d’Edwards | 90 |
| 2.2 Modèle de déposition | 93 |
| a) Modèles unidimensionnels à contraintes cinétiques | 93 |
| b) Description du modèle et des simulations | 94 |
| c) Mesure d’Edwards généralisée | 95 |
| 2.3 Conclusion sur les modèles unidimensionnels | 98 |
| 3 Transitions de phase et mesure d’Edwards | 98 |
| 3.1 Dynamique de liens | 99 |
| 3.2 Transitions de phase | 101 |
| a) Cas purement ferromagnétique | 101 |
| b) Transitions de phase et mesure d’Edwards | 103 |
| c) Conclusion sur les transitions de phase | 108 |
| 4 Comment tester la mesure d’Edwards? | 108 |
| 4.1 Mesures dynamiques locales | 108 |
| 4.2 Mesures statiques | 109 |
| a) Dynamique de tapping du modèle SK | 109 |
| b) Un test pour la forme canonique de la mesure d’Edwards | 111 |
| Conclusion | 117 |
| Bibliographie | 118 |
| Publications | 129 |

| | |
|----------------------------|---|
| MCT | Théorie du couplage de modes |
| VFT | Vogel-Fulcher-Tammann |
| T_g, T_0, T_K | Température de : transition vitreuse, Vogel et Kauzmann |
| T_d, T_c | Température de transition : dynamique et statique |
| T_{eff}, T_{dyn} | Température : effective et dynamique |
| FDT | Théorème de fluctuation-dissipation |
| EA | Edwards-Anderson |
| SK | Sherrington-Kirkpatrick |
| \bar{A} | Moyenne de A sur toutes les composantes du désordre (géométrie et couplages) |
| $\mathbb{E}[A]$ | Moyenne de A sur les couplages uniquement |
| $\langle A \rangle$ | Moyenne thermodynamique, sur les conditions initiales, ou au cours d'une simulation, de A |
| $\langle A \rangle_\alpha$ | Moyenne thermodynamique de A restreinte à l'état α |
| $\Sigma(\beta, f)$ | Complexité des états métastables d'énergie libre f à température inverse β |
| $\Sigma(\beta)$ | Complexité totale des états métastables à température inverse β |
| $E_{th}(T), E_{eq}(T)$ | Énergie : de seuil et d'équilibre à température T |
| $\mathbb{P}(J_{ij})$ | Distribution de probabilité de J_{ij} |
| \underline{x} | Vecteur $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ de l'espace des répliques |
| RS | À symétrie de réplique ("replica symmetric") |
| RSB | Brisure de symétrie de réplique ("replica symmetry breaking") |
| 1RSB | Brisure de symétrie de réplique à un pas |
| Tr | Sommation sur toutes les valeurs possibles des spins présents |
| SAT | Satisfaisabilité, ou satisfaisable |
| UNSAT | Non satisfaisable |
| TAP | Thouless-Anderson-Palmer |
| Σ_k | Complexité des états stables par retournement d'au plus k spins |
| ΔE_i | Coût énergétique du retournement du spin i |
| q_{th} | Recouvrement au sein des états de seuil |
| $s_c(E)$ | Entropie configurationnelle (ou complexité des structures inhérentes) à l'énergie E |
| IS, MS, Edw | Restreint aux structures inhérentes |
| $s_a(E)$ | Approximation recuite de l'entropie configurationnelle à l'énergie E |
| ROM | Modèle orthogonal aléatoire |
| O(N) | Groupe orthogonal de \mathbb{R}^N |
| RCP | Empilement aléatoire compact ("random close packing") |
| RLP | Empilement fragile aléatoire ("random loose packing") |
| ϕ, ρ | Densité (ou fraction volumique) |
| g | Constante de gravité : $g \approx 9,81$ |
| KA | Kob-Andersen |
| FA | Fredrickson-Andersen |
| \mathbb{Z}_2 | Groupe de symétrie par renversement des spins (d'Ising) |
| M_n | Mesure d'Edwards avec n quantités connues a priori |
| E_F, E_{SG} | Énergie pour : $\alpha = 0$ et $\alpha = 1/2$ |

Introduction

1 L'état vitreux

Il existe dans la nature de nombreux matériaux dans l'état vitreux. On peut citer par exemple les verres des fenêtres, les empilements granulaires [1], les verres de spins, mais aussi de façon plus inattendue le fromage ou les gels coiffants. Mais que signifie le terme "vitreux" ? Un point commun entre les fromages hollandais et les verres des fenêtres est le fait que d'un point de vue mécanique, ceux-ci semblent avoir des propriétés solides. Par exemple, si on les soumet à une compression infinitésimale, ceux-ci auront tendance à répondre par une force opposée à cette compression et qui tend à replacer le matériau dans sa configuration de repos. Inversement, un liquide répondra par un écoulement dans un plan transverse à la force. De plus, le temps typique d'évolution des systèmes cités plus haut est beaucoup plus grand que la durée typique d'une mesure durant une expérience, qui est de l'ordre de quelques heures au maximum, ce qui fait que leurs propriétés physiques semblent stationnaires. Un système vitreux est un système physique qui a un temps de décorrélation beaucoup plus grand que la durée des expériences qui visent à l'étudier. C'est donc un système hors d'équilibre, dans un sens plus fort que pour un système simplement en régime transitoire (comme une particule tombant dans un puits de potentiel par exemple), étant donné que ce régime transitoire est quasi-stationnaire.

Les systèmes vitreux présentent une phénoménologie très riche et les études de la dernière décennie tendent à montrer que derrière cet adjectif commun de "vitreux" se cachent des mécanismes universels. Le défi théorique actuel consiste à identifier quels sont les mécanismes et les propriétés qui sont génériques et qui peuvent donc servir à une définition rigoureuse de l'état vitreux. L'objet de cette thèse est d'étudier certains de ces systèmes vitreux, à savoir les verres de spins et les matériaux granulaires, afin de dégager le rôle des états métastables.

2 Perte d'équilibre et transition vitreuse

Dans cette section, nous allons décrire brièvement quelques aspects importants de la phénoménologie des verres structuraux [2] qui seront utiles ultérieurement. Les verres structuraux, tels les verres des fenêtres, sont obtenus en refroidissant brutalement des liquides, comme la silice (SiO_2) par exemple. Le système obtenu est un matériau amorphe ayant des propriétés mécaniques semblables à celles d'un

solide mais ne possédant pas de structure cristalline.

2.1 Transition vitreuse

Dans un liquide, la viscosité η comporte une échelle de temps, correspondant au temps nécessaire au système pour s'écouler en réponse à un cisaillement infinitésimal. Cette échelle de temps $\tau(\eta)$ -ainsi que la viscosité - varie avec la température du système de la même façon que le temps typique de relaxation τ_{relax} du système. Il est observé pour un grand nombre de matériaux liquides que ce temps de relaxation (et de façon équivalente la viscosité) croît rapidement lorsque la température décroît, et atteint des valeurs vertigineuses à basse température, si bien que sa mesure devient impossible, τ_{relax} devenant plus grand que le temps d'expérience possible. C'est pour de tels temps de relaxation que le système est dit vitreux. La température de transition vitreuse T_g est définie afin de rendre compte de cette constatation expérimentale; c'est la température à laquelle la viscosité vaut 10^{13} Poise, ce qui correspond à un temps de relaxation de l'ordre de 100 min. Il s'agit donc d'une définition purement arbitraire, qui n'est nullement associée à la divergence d'une quelconque quantité, mais plutôt au fait que le temps de relaxation "diverge du point de vue de celui qui le mesure". L'approche de cette transition vitreuse depuis la phase liquide semble bien décrite par la théorie du couplage de mode (MCT) [3, 4], avec la réserve notable que cette dernière prédit une vraie divergence de η , à une température T_c environ deux fois supérieure à T_g . Cette différence est due au fait que la MCT ne prend pas en compte le franchissement de barrières d'énergie par activation, dont l'effet pourrait être "d'éviter" la transition MCT associée à une divergence en loi de puissance, grâce au passage à un régime activé.

Dans de nombreuses simulations et expériences, la dépendance en température de la viscosité s'ajuste bien avec une loi de Vogel-Fulcher-Tammann (VFT) [2] :

$$\eta(T) \propto \exp\left(\frac{A}{T - T_0}\right) \quad (1)$$

où $A > 0$ et $T_0 \geq 0$ est la "température de Vogel". Dans le cas où $T_0 = 0$, on obtient la loi d'Arrhenius. De plus, un verre sera dit "fort" si $T_0 = 0$ et "fragile" sinon. Angel introduisit une représentation graphique de cette "fragilité" [5] en traçant $\log \eta$ en fonction de T_g/T pour $T > T_g$. Cette classification fragile/fort semble favoriser l'existence de plusieurs mécanismes pour la transition vitreuse. En particulier, si l'on suppose que la dynamique est principalement activée, les verres forts correspondent à des barrières d'énergie variant peu avec la température, alors que les verres fragiles correspondent au contraire à des barrières qui divergent à la température de Vogel.

2.2 Température de Kauzmann

À basse température, la diffusion des particules s'opère de plusieurs façons. Celles-ci peuvent diffuser à l'intérieur de petites régions (des "cages") dans lesquelles elles sont confinées par les interactions avec les particules les plus proches; elles peuvent aussi diffuser en quittant leurs cages, ce qui implique le franchissement de barrières d'énergie et donc des échelles de temps plus grandes. Le fait que les par-

ticules puissent quitter leur cages permet au système de s'écouler. Cette remarque permet de séparer la chaleur spécifique en deux contributions : les vibrations dans les cages, et les mouvements structuraux (ou "configurationnels"). Par intégration thermodynamique, la même séparation peut être faite pour l'entropie, qui est la somme de l'entropie due aux vibrations des particules dans leurs cages, ou autour de leurs positions d'équilibre dans le cristal, et de l'entropie configurationnelle, associée aux mouvements structuraux. Kauzmann a calculé l'entropie du liquide et celle du cristal à basse température, la différence entre les deux étant l'entropie configurationnelle du liquide (l'entropie configurationnelle du cristal étant nulle). L'extrapolation des données obtenues par Kauzmann à très basse température suggère que pour un verre fragile, l'entropie configurationnelle devient négative à une certaine température T_K , la température de Kauzmann [6]. L'entropie configurationnelle étant une grandeur positive, cela signifie qu'elle est nulle en dessous de T_K , et donc que le système n'a plus qu'un seul état accessible et ne peut plus s'écouler. L'état obtenu est appelé "état vitreux idéal". Cependant, Stillinger a argumenté que si cet état vitreux existe, alors du fait de la dimensionnalité finie de l'espace, il en existe un nombre exponentiel d'autres, et l'entropie configurationnelle ne peut être nulle [7]. Ajoutons que la valeur supposée de T_K est très proche de celle de T_0 . Ceci est décrit par la théorie phénoménologique d'Adam, Gibbs et Di Marzio selon laquelle la taille typique des barrières à franchir est inversement proportionnelle à l'entropie configurationnelle [8, 9].

2.3 Importance du taux de refroidissement

La transition vitreuse correspond à la perte de l'équilibre lorsque la température approche de T_g . Cependant, la phase vitreuse ne semble présente que parce que le temps suffisant pour équilibrer n'a pas été laissé au système. Ainsi, si l'on refroidit un système jusque dans la phase vitreuse, on lui laisse d'autant plus de temps pour équilibrer qu'on le refroidit lentement. Si l'on trace la variation du volume en fonction de la température en fonction de la vitesse de refroidissement, on observe effectivement une diminution de la température à laquelle l'équilibre est quitté lorsque cette vitesse diminue.

3 Quelques propriétés génériques de matériaux vitreux

Nous allons décrire ici certaines propriétés qui ont été mises en évidence durant ces dernières années dans de nombreuses expériences et modèles théoriques. Ces propriétés sont génériques dans le sens qu'elles ont été observées dans la majorité des systèmes qu'on serait tenté de qualifier de "vitreux".

3.1 Vieillissement, brisure d'ergodicité

a) Vieillissement

Le vieillissement est une propriété essentielle des systèmes vitreux. En effet, l'étude d'un système à l'équilibre thermique ne permet pas de connaître l'origine du temps, c'est-à-dire l'âge du système. Ainsi, les mêmes propriétés physiques macroscopiques sont observées quelque soit le temps passé depuis la préparation de l'échantillon concerné : la physique est invariante par translation dans le temps. Dans le cas d'un système vitreux, cette invariance par translation dans le temps est brisée, c'est-à-dire les propriétés dépendent fortement de l'âge et de l'histoire de l'échantillon. En particulier, un système "vieux" relaxe beaucoup plus lentement qu'un système jeune, d'où le terme "vieillissement". Dans un système vieillissant, les quantités à deux temps dépendent donc explicitement de ces deux temps, et non de leur seule différence. Ainsi, il est possible (au moins dans des expériences de pensée...) de déterminer l'âge du système par des mesures adéquates.

b) Brisure d'ergodicité

Lorsqu'un système est à l'équilibre thermique, il n'évolue plus que par des fluctuations qui sont dues à des échanges d'énergie avec son environnement et qui tendent à décorrélérer le système d'un état dans lequel il était à un instant précédent. Un système vitreux évolue très lentement et naturellement reste corrélé pendant de très grands temps. Une telle corrélation est un signe de brisure d'ergodicité : le système n'explore qu'une région restreinte de l'espace des configurations possibles. Par exemple, imaginons un système ferromagnétique de très grande taille préparé dans un état d'aimantation par spin $m > 0$ à basse température. Du fait de sa grande taille, le système en question va rester bloqué pendant un temps très grand (qui croît exponentiellement avec la taille) dans la région de l'espace des configurations d'aimantation positive et l'aimantation va fluctuer autour de sa valeur moyenne. La brisure d'ergodicité est due ici à une brisure de symétrie. Cependant, la corrélation entre les états du système à deux temps différents tend rapidement vers zéro lorsque la différence de ces temps grandit. Inversement, si l'on prépare le système dans un état d'aimantation nulle - et que l'on ne brise pas la symétrie par renversement de tous les spins par des conditions limites particulières ou un champ extérieur - celui-ci va garder une aimantation nulle et évoluer par croissance de domaines de spins de même orientation. Plus ses domaines vont être grands, plus lentement ils évolueront ; le système reste corrélé sur de longs temps : il vieillit. Cependant, à très grands temps cette corrélation disparaît. Lorsque comme dans cet exemple la corrélation reste non nulle longtemps avant de disparaître lentement, on parle de "brisure faible d'ergodicité" ; si cette corrélation reste non nulle sans jamais décroître à zéro, on parle de "brisure forte d'ergodicité".

Cette brisure faible d'ergodicité est clairement à l'origine de la brisure de l'invariance par translation du temps. Elle est aussi à l'origine de la perte de l'équilibre thermodynamique puisque le système n'explore pendant le temps de l'expérience qu'une région souvent très restreinte de l'espace des configurations.

Edwards et Anderson ont introduit un paramètre q_{EA} pour quantifier cette

corrélation à grands temps [10], appelé ainsi “paramètre d’Edwards-Anderson”. Schématiquement, ce paramètre prend la valeur 0 si deux états du système séparés par un très grand temps sont totalement décorrélés et la valeur 1 s’ils sont entièrement corrélés (c’est-à-dire identiques). La définition de ce paramètre dépendant du modèle considéré, nous y reviendrons plus tard.

3.2 Dynamique “hors d’équilibre”, température effective

Avant de décrire une dynamique hors d’équilibre, commençons par rappeler succinctement les propriétés d’une dynamique à l’équilibre thermodynamique.

a) Équilibre thermodynamique

Du point de vue dynamique, l’équilibre thermodynamique est caractérisé par :

- la stationnarité ;
- l’invariance par translation du temps ;
- le théorème de fluctuation-dissipation (FDT).

Le théorème de fluctuation-dissipation est une conséquence de l’équilibre thermodynamique, et il doit donc être vérifié pour que la distribution d’équilibre corresponde à la distribution de Boltzmann-Gibbs. Si l’on prend l’exemple d’un système magnétique décrit par un champ scalaire $\phi(x, t)$ au point x et à l’instant t , il s’écrit à température T :

$$\partial_{t'} C_c(x, t; x', t') = T R(x, t; x', t') \quad (2)$$

où la fonction de corrélation connexe et la réponse à un champ externe sont respectivement :

$$C_c(x, t; x', t') = \langle \phi(x, t) \phi(x', t') \rangle - \langle \phi(x, t) \rangle \langle \phi(x', t') \rangle \quad (3)$$

et

$$R(x, t; x', t') = \frac{\delta \langle \phi(x, t) \rangle}{\delta h(x', t')}, \quad (t' < t) \quad (4)$$

On définit usuellement la réponse à un champ infinitésimal constant agissant à partir de l’instant t' (ou réponse intégrée) :

$$\chi(x, t; x', t') = \int_{t'}^t dt'' R(x, t; x', t'') \quad (5)$$

b) Violation du théorème de fluctuation-dissipation

Lorsqu’un système est hors d’équilibre thermodynamique, le théorème de fluctuation-dissipation n’est plus vérifié. Dans un système vitreux, la dynamique étant très lente, on peut observer une séparation des échelles de temps [11] :

- localement, le système est sensible à l’agitation thermique, c’est-à-dire ses fluctuations locales sont rapides et typiques d’un système à l’équilibre thermique. Ainsi, la dynamique à temps courts, dominée par des mouvements locaux, est une dynamique d’équilibre ;

- la dynamique à temps longs s’opère par des mouvements collectifs très lents impliquant un grand nombre d’objets (particules, spins, etc). Ces structures de grande échelle servent en quelque sorte de “squelette” à la dynamique, puisque toutes les configurations parcourues pendant un grand intervalle de temps “s’appuient” sur cette structure qui n’évolue quasiment pas. Ainsi ces mouvements à grande échelle, qualifiés de structuraux, ne sont pas régis par les “lois” de la dynamique à température T .

La résolution de la dynamique lente du modèle p-spin sphérique par Cugliandolo et Kurchan [12] a permis de quantifier cette séparation des échelles de temps. En effet, ils ont montré que dans la limite où les deux temps t et t' sont très grands¹, tout en étant eux-mêmes très séparés, la dérivée $\partial_{t'} C(t, t')$ de la corrélation et la réponse $R(t, t')$ sont toujours proportionnelles, le coefficient de proportionnalité n’étant plus T mais $T_{eff} > T$, la “température effective”. Ainsi, lorsque $t, t' \rightarrow \infty$, l’ensemble des points de coordonnées $(C(t, t'), \chi(t, t'))$ est une courbe paramétrée par t constituée de deux droites de pentes $1/T$ lorsque $t - t' \ll t'$ et $1/T_{eff}$ lorsque $t - t' \gg t'$. L’appellation “température” effective est justifiée dans la mesure où il a été montré que T_{eff} vérifie des propriétés d’une vraie température [13, 14]. En effet, celle-ci ne dépend pas de la paire {observable + champ conjugué} utilisée dans le FDT. De plus, cette température contrôle le sens des flux de chaleurs les plus lents et peut être mesurée par un thermomètre, à condition que celui-ci soit sensible à des grandes échelles de temps.

Dans d’autres modèles de verres de spins en champ-moyen, comme le modèle de Sherrington-Kirkpatrick [15], la température effective varie en fonction de la valeur de $C(t, t')$ (toujours avec $t, t' \rightarrow \infty$ et $t - t' \gg t'$), le système présentant alors une hiérarchie d’échelles de temps complexe.

Depuis, cette construction d’une température effective a été effectuée dans de nombreux systèmes vitreux. Il a été observé en particulier dans les verres structuraux et les verres colloïdaux que lorsque le temps passé dans la phase vitreuse est grand, la courbe de $(C(t, t'), \chi(t, t'))$ paramétrée par t est constituée de deux droites, dont la pente croît avec t' et s’approche de $1/T$ quand $t' \rightarrow \infty$, c’est-à-dire la température effective dépend du temps t_w passé dans la phase vitreuse, et T_{eff} décroît vers T lorsque t_w augmente à l’infini [16]. En effet, lorsque t_w croît, le système est de plus en plus proche de l’équilibre, et en particulier, lorsque t_w dépasse le temps d’équilibration, T_{eff} rejoint T (à condition qu’il n’y ait pas eu de cristallisation auparavant). La température effective ainsi observée correspond qualitativement à la “température fictive” introduite par Tool en 1946 comme la température à laquelle le système gèle dans une expérience de refroidissement lent. Comme expliqué précédemment, cette température dépend du taux de refroidissement, donc du temps passé à chaque température dans la phase vitreuse.

Il existe également des situations sans vieillissement où le FDT est violé et une température effective existe ; Berthier et al. ont montré l’existence d’une température

¹Puisque l’invariance par translation dans le temps est brisée, il faut préciser l’origine des temps. Dans l’étude des systèmes vitreux, on utilise souvent un protocole générique consistant à préparer un échantillon à haute température et à le refroidir brusquement à température T dans la phase vitreuse. Le temps 0 est l’instant de “trempé” du système.

effective dans des liquides cisailés [17, 18], dans lesquels le flot de cisaillement brise le bilan détaillé. Berthier et Barrat ont calculé T_{eff} pour de nombreuses observables, et ont vérifié que celle-ci ne dépend pas de l'observable choisie [19, 20] ; ils ont également proposé d'utiliser une particule traceur comme "thermomètre" pour mesurer T_{eff} [19].

3.3 Rajeunissement et mémoire

Récemment, des expériences de cycles en température, semblables à celles effectuées par Kovacs dans des polymères en 1963 [21, 22], ont été effectuées dans divers matériaux vitreux, allant des verres de spins [23, 24] aux verres structuraux, en passant par les milieux granulaires [25] et les verres polymériques [26] ou colloïdaux [27]. Ces expériences mettent en évidence des effets de "rajeunissement" et de "mémoire" qui constituent des indices supplémentaires qui sous-tendent l'existence d'un comportement universel dans la phase vitreuse.

a) Rajeunissement

Considérons par exemple un verre de spins à température T_i supérieure à T_g , c'est-à-dire dans la phase paramagnétique. Refroidissons-le jusqu'à $T_A < T_g$, avec une vitesse de refroidissement constante γ . Si l'on mesure la susceptibilité alternative $\chi(\omega)$ à une pulsation ω donnée (c'est-à-dire la réponse à un champ sinusoïdal de pulsation ω), celle-ci décroît progressivement avec T . À T_A , laissons le système évoluer pendant un temps suffisant sans changer de température. Pendant ce temps, le système vieillissant, $\chi(\omega)$ continue à diminuer. Reprenons ensuite le processus de refroidissement à vitesse γ . On observe que $\chi(\omega)$ ne diminue plus mais au contraire augmente pendant un certain temps, jusqu'à approximativement rejoindre la valeur qu'elle aurait eue à la même température sans la période d'attente à T_A . Puis $\chi(\omega)$ rediminue en suivant l'évolution qu'elle aurait suivie si cette attente n'avait pas eu lieu. En d'autres termes, l'effet du redémarrage du refroidissement est d'abord d'effacer le vieillissement subit à T_A ; c'est le "rajeunissement".

b) Mémoire

Continuons l'expérience précédente. Une fois une température $T_b < T_A$ - suffisante pour que le rajeunissement soit complet - atteinte, effectuons le parcours en sens inverse en réchauffant le système à vitesse γ . Si l'évolution était réversible, on devrait suivre dans le sens inverse l'évolution obtenue en refroidissant constamment, à vitesse γ entre T_i et T_B . Or, à l'approche de T_A , $\chi(\omega)$ subit une légère diminution par rapport à l'évolution prévue puis la rattrape un peu après avoir quitté T_A . C'est le phénomène de mémoire, ou effet "Kovacs" [21, 22, 23, 24].

Le rajeunissement et la mémoire sont deux effets qui montrent de façon spectaculaire que l'évolution d'un système vitreux à un instant donné dépend fortement de son évolution aux instants antérieurs. Il existe maintenant de nombreux protocoles expérimentaux impliquant des combinaisons de ceux évoqués au-dessus, qui ont été réalisés dans le but de discriminer parmi les mécanismes et modèles de verres de spins disponibles, et à venir [28, 29]. Nous rencontrerons ultérieurement des effets de ce type dans les milieux granulaires.

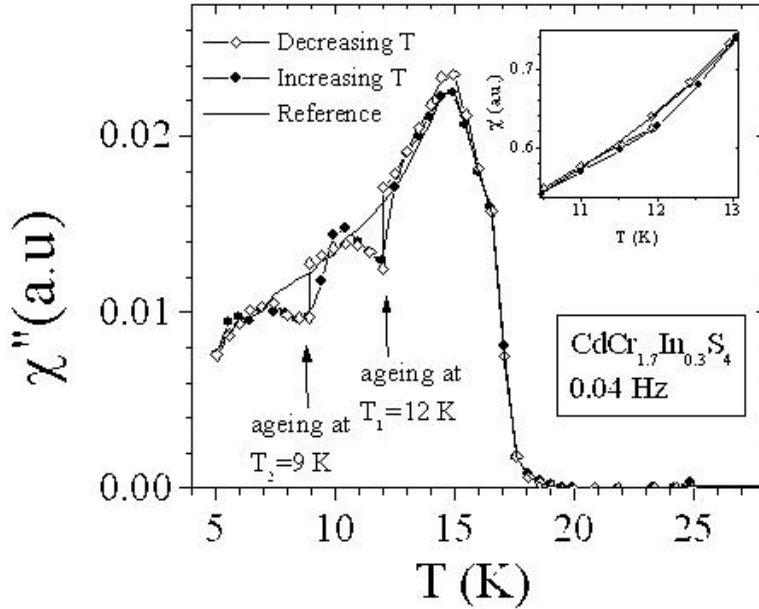


FIG. 1 – Expérience de rajeunissement et mémoire dans un verre de spins (extrait de [23]).

4 Plan et objectifs de la thèse

Cette thèse a pour objet l'étude des connexions qui existent naturellement entre plusieurs types de systèmes vitreux, du fait de la prolifération des états métastables. En particulier, les milieux granulaires denses, dont l'appartenance à part entière à la famille des matériaux vitreux n'est que récente, sont mis à l'honneur ; nous verrons comment les connaissances acquises dans l'étude des verres de spins permettent d'aborder des milieux aussi complexes que des empilements de grains.

Cette thèse est découpée en deux parties. Dans la première partie, les états métastables dans les systèmes vitreux, en particulier dans les verres de spins, sont étudiés. Le chapitre I constitue une introduction aux verres de spins et à la description de quelques uns des modèles les plus étudiés. L'accent y est mis sur les systèmes à connectivité finie, qui sont en quelque sorte les vedettes de cette thèse, et les techniques de base permettant l'approche analytique des problèmes y sont détaillées. Dans le chapitre II, la notion de métastabilité dans les systèmes vitreux est introduite et discutée, ainsi que le lien entre la dynamique à grand temps des systèmes vitreux et le paysage d'énergie libre. Enfin, une partie importante de ce chapitre est consacrée aux méthodes utilisées pour dénombrer les minima locaux qui bloquent la dynamique à température nulle. L'exemple des verres de spins sur des graphes aléatoires de connectivité fixe sera particulièrement étudié.

La seconde partie est consacrée au rôle des états métastables dans des milieux athermaux tels que les milieux granulaires, en s'appuyant sur l'application des méthodes de la thermodynamique à de tels systèmes. Dans le chapitre III, après

une brève introduction aux milieux granulaires, les expériences de vibration d'empilements granulaires sont décrites, ainsi que l'hypothèse introduite par Edwards pour caractériser les configurations visitées lors de ces expériences. Enfin, le chapitre IV, qui est le plus long, introduit un algorithme permettant de simuler une dynamique similaire à celle des milieux granulaires vibrés, à partir de modèles de verres de spins. Le modèle ainsi obtenu est utilisé comme un paradigme pour étudier le rôle des états bloqués dans les systèmes athermaux soumis à des sollicitations externes. L'étude de modèles unidimensionnels, puis celle de modèles sur des graphes aléatoires sont menées à bien afin de cerner les possibilités et les limitations de l'approche du type thermodynamique à la Edwards. Pour conclure ce chapitre, le paradigme introduit au cours de cette thèse est utilisé pour proposer des tests de cette approche, accessibles à l'expérience.

L'étude des systèmes vitreux et des milieux granulaires par l'approche à la Edwards a été l'objet de nombreux travaux durant ces trois dernières années et est un sujet en plein développement. Ce mémoire est une tentative pour situer mes contributions à cette étude dans un contexte général, et s'inscrit donc en complémentarité des publications qui en ont découlé, et qui sont compilées à la fin. En particulier, les travaux concernant les verres de spins en champ moyen appartenant à la classe des modèles orthogonaux (publications 7 et 8) n'ont pas été inclus; de plus, un certain nombre de détails techniques n'ont pas été exposés, mais sont disponibles dans les publications qui jointes. À l'opposé, des points qui n'ont pas fait l'objet de publication ont été ajoutés dans le corps du mémoire. En particulier, le calcul de la complexité des états métastables par les méthodes des répliques et de la cavité est discuté en détail dans le chapitre II. J'ai jugé intéressant de le développer ici, étant donné que la connexion entre ces deux méthodes y est claire, contrairement à ce qui ressort des publications dont elles ont fait récemment l'objet séparément (en particulier, la méthode des répliques est ici utilisable pour n'importe quelle distribution de couplages).

Première partie

États métastables dans les verres de spins

Chapitre I

Verres de spins

1 Introduction

Les verres de spins [30, 31] sont des matériaux magnétiques amorphes qui ont une phase vitreuse à basse température. Cette phase se distingue des phases ferromagnétique et antiferromagnétique usuelles par l'absence d'ordre périodique. Plus précisément, les aimantations locales $m_i = \langle s_i \rangle$ sont non nulles, mais aucun pic de Bragg n'apparaît dans une expérience de diffraction de neutrons, c'est-à-dire

$$\sum_i m_i e^{2\pi x_i q} = 0, \quad (1)$$

pour tout vecteur d'onde q .

Un verre de spins est généralement synthétisé à partir d'un matériau non magnétique (constitué à partir d'un métal noble : Ag, Au, etc) au sein duquel sont introduites en faible dilution des impuretés magnétiques (des métaux de transitions : Mn, Fe). Aux températures expérimentales, ces impuretés sont figées à des positions aléatoires et polarisent magnétiquement les électrons de conduction du milieu dans lequel elles sont immergées, induisant des interactions effectives entre les spins ainsi créés. Ces interactions effectives ont été introduites en 1954 par Ruderman et Kittel, puis en 1956 par Kasuya et en 1957 par Yosida dans le contexte des verres de spins. Elles sont décrites par l'hamiltonien effectif suivant :

$$\mathcal{H}_{RKKY} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j, \quad (2)$$
$$J_{ij} \propto \frac{\cos(2k_F r_{ij})}{r_{ij}^3},$$

où k_F est la longueur d'onde au niveau de Fermi et les spins \vec{s}_i sont des spins d'Heisenberg quantique. Génériquement, la température critique est suffisamment élevée pour que les fluctuations quantiques puissent être négligées devant les fluctuations thermiques. De plus, des composés tels que AgMn sont très anisotropes, et sont bien décrits par le modèle d'Ising, les interactions effectives RKKY induisant des

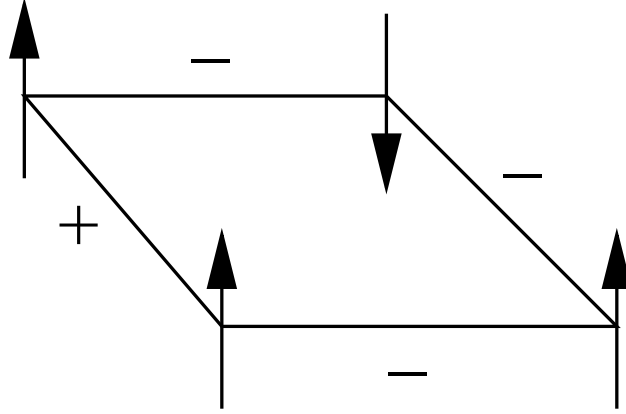


FIG. I.1 – Exemple de plaquette frustrée : la configuration représentée est l’un des 8 minima globaux possibles de l’énergie (les couplages sont égaux en valeur absolue), mais il demeure une interaction non satisfaite. Il n’existe pas de configuration qui satisfait toutes les interactions simultanément.

interactions aléatoires entre les spins du réseau hôte. En 1975, Edwards et Anderson [10] ont introduit le modèle (modèle d’Edwards-Anderson) décrit par l’hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j, \quad (3)$$

où les $s_i \in \{-1, 1\}$ sont des variables d’Ising, les J_{ij} des couplages aléatoires, et les crochets $\langle \rangle$ signifient que la somme est restreinte aux sites voisins sur un réseau hypercubique de dimension d ($d = 3$ étant la dimension usuelle).

La complexité de la physique émergeant de ce modèle est due à la frustration [32]. Dans un verre de spins, les spins en interaction peuvent s’aligner dans le même sens, ou tête-bêche, selon que leur interaction est ferromagnétique ou antiferromagnétique, de façon à minimiser l’énergie (on dit que l’interaction est satisfaite). Un système est frustré lorsqu’il n’est pas possible de satisfaire toutes les interactions à la fois. Dans un verre de spins, il existe un grand nombre de plaquettes frustrées, qui sont celles qui contiennent un nombre impair de couplages antiferromagnétiques. Dans le cas où les couplages sont ± 1 , la frustration induit une dégénérescence du minimum sur chaque plaquette (cf. figure (I.1)) et les interactions entre les plaquettes induisent une grande dégénérescence de l’état fondamental. La frustration est ici due à la présence de désordre gelé ; elle est aussi présente dans de nombreux problèmes sans désordre gelé comme les verres structuraux par exemple. Dans ces systèmes, la frustration est induite par l’existence de conditions initiales désordonnées, auxquelles le système reste corrélé durant un très grand temps. Dans certains systèmes comme les milieux granulaires, la frustration, de nature purement géométrique est engendrée par une exclusion volumique, les grains ne pouvant s’interpénétrer.

Le modèle d’Edwards-Anderson est très difficile à traiter analytiquement. Plu-

sieurs approximations ont été proposées, toutes réduisant le modèle d'Edwards-Anderson (EA) à des modèles plus simples et traitables analytiquement. Une première façon est de considérer la limite de très grande dimension, où la théorie du champ moyen est exacte. Cette limite correspond au modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [15], dont l'hamiltonien est donné par (3), les couplages étant Gaussiens, de variance $\frac{1}{N}$, et la somme étant étendue à toutes les paires de sites distincts, d'où l'appellation usuelle de modèle complètement connecté. La statique de ce modèle a été résolue par Parisi [33] en 1979. Une autre approche est l'utilisation de lois d'échelles, valides dans l'approximation de Migdall-Kadonov, introduites indépendamment par Fisher et Huse [34] d'une part et Bray et Moore [35] d'autre part. Dans cette approche, contrairement à ce que prédit le champ moyen, le système possède seulement deux états fondamentaux, symétriques l'un de l'autre par renversement de tous les spins ; les premiers états excités sont obtenus à partir d'un de ces deux fondamentaux en retournant des zones connexes de spins. La théorie dite des "gouttelettes" stipule que l'énergie de retournement d'une gouttelette de L spins croît comme L^θ . Dans la suite de cette thèse, nous nous intéresserons à des modèles qualitativement décrits par la théorie de champ moyen.

1.1 Verres de spins continus

Comme expliqué plus haut, un verre de spins ne présente aucun ordre périodique. Dans un modèle avec désordre gelé, ceci s'exprime par $\overline{m_i} = 0$, où le surlignement indique le moyennage sur le désordre. Par contre, pour une réalisation donnée du désordre, les aimantations locales ne sont pas nulles, et en particulier, le recouvrement d'équilibre $q = \overline{m_i^2}$ est strictement positif. La signification de ce paramètre est la suivante. Dans un système vitreux, l'espace des phases est séparé en un nombre énorme de régions déconnectées, souvent appelées vallées (ces vallées sont les bassins d'attraction des différents minima). Le recouvrement q décrit la corrélation entre deux configurations typiques : il prend la valeur 0 s'il n'existe qu'une seule vallée (paramagnétique) et 1 si les vallées sont constituées d'une seule configuration. Le paramètre d'Edwards-Anderson, qui traduit la corrélation à l'intérieur des vallées uniquement, est défini dynamiquement. La fonction d'auto-corrélation spin-spin¹ est définie par $C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i(t) \rangle \langle s_i(t_w) \rangle$. Si l'espace des configurations est divisé en régions bien séparées, la dynamique à temps intermédiaires est dominée par le piégeage du système dans des vallées, de plus en plus profondes au fur et à mesure que t_w croît. La dynamique à temps courts est elle dominée par la relaxation au sein d'une vallée et celle à temps très long par des déplacements entre les vallées. La forme des fonctions de corrélations est montrée sur la figure (I.2) pour différentes valeurs de t_w . Le paramètre d'Edwards-Anderson est

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t_w \rightarrow \infty} C(t + t_w, t_w). \quad (4)$$

¹En l'absence de champ externe. Dans toute la suite de cette thèse, aucun champ externe ne sera appliqué.

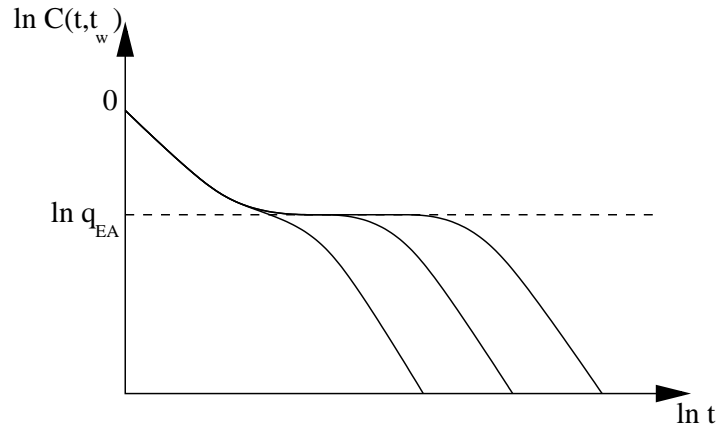


FIG. I.2 – Allure des fonctions de corrélation à deux temps $C(t, t_w)$ en fonction de t pour plusieurs valeurs de t_w . La longueur du plateau augmente avec t_w .

a) La brisure de symétrie de réplique

La relation entre la phase verre de spins et la forme très rugueuse du paysage d'énergie a été quantifiée par Parisi via l'introduction de la brisure de symétrie de réplique [33]. En présence de désordre gelé, seules les moyennes (sur le désordre) des fonctions thermodynamiques “auto-moyennantes” ont une signification pertinente. Le terme “auto-moyennant” signifie qu'une quantité est naturellement moyennée par la limite thermodynamique, c'est-à-dire lorsque la taille du système est infinie, la valeur de cette quantité ne dépend pas de la réalisation du désordre considérée [31]. En particulier, l'énergie libre est auto-moyennante, et la fonction thermodynamique à calculer pour connaître les propriétés statiques du système est $\overline{\ln Z(\beta)}$. Afin de calculer cette quantité, Edwards et Anderson ont utilisé la méthode des répliques, introduite par Edwards dans les polymères :

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}. \quad (5)$$

La méthode des répliques consiste à calculer Z^n pour des valeurs entières de n , ce qui revient à calculer la fonction de partition pour n répliques s_i^a ($a = 1, \dots, n$ est l'indice de réplique), puis à effectuer un prolongement analytique $n \rightarrow 0$. Ces fonctions de partition sont corrélées par la réalisation du désordre considérée. Il n'est pas possible de calculer la fonction de partition pour le modèle d'Edwards-Anderson dès que $d > 1$, mais pour le modèle SK, ceci est possible. À la limite thermodynamique, les corrélations entre les sites sont transformées en corrélations entre les répliques, et l'énergie libre par site est donnée par la méthode du col et vaut

$$-\beta f(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \text{Extr}_{Q_{ab}} \mathcal{F}(Q_{ab}), \quad (6)$$

où Q_{ab} est une matrice $n \times n$ et $\mathcal{F}(Q_{ab})$ est une fonctionnelle agissant sur Q . La signification de Q au col est $Q_{ab} = \overline{\langle s_i^a \rangle \langle s_i^b \rangle}$. Remarquons que tous les sites étant

connectés entre eux, cette fonction de corrélation ne dépend pas du site i choisi. Une propriété essentielle de \mathcal{F} est l'invariance par permutation des répliques ("symétrie de réplique"). Lorsque n est entier, le maximum de \mathcal{F} est obtenu pour une matrice Q de la forme $Q_{ab} = \delta_{ab}(1 - q) + q$, qui respecte la symétrie de réplique (RS). Cependant, la limite $n \rightarrow 0$ est singulière, dans le sens où le point stationnaire RS n'est plus stable et ne peut donc représenter l'état du système. Parisi a montré que la bonne solution est donnée par une forme de Q brisant la symétrie de réplique (RSB). L'ensemble des répliques est d'abord divisé en n/m paquets de taille m . Si les indices a et b sont dans le même paquet (et différents), Q_{ab} prend une valeur q_1 et une valeur q_0 s'ils sont dans des paquets différents. Ceci constitue la brisure de symétrie de réplique à un pas (1RSB). Le processus est itéré k fois pour obtenir une RSB à k pas, en remplaçant les blocs diagonaux RS de Q les plus petits par une forme 1RSB. Dans la limite $k \rightarrow \infty$, la matrice Q est paramétrée par une infinité de paramètres $q_0 < q_1 < q_2 < \dots$. Parisi a montré que l'on peut alors décrire ceux-ci par une fonction $q(x)$, où x décrit l'intervalle $[0, 1]$, \mathcal{F} devenant une fonctionnelle de $q(x)$. De Dominicis et Kondor ont montré que cette solution est marginalement stable à toute température [36], c'est-à-dire que toutes les valeurs propres de la hessienne correspondante sont positives, l'une d'elles au moins étant nulle. Ainsi, la solution est la suivante : au dessus de $T_g = 1$, $Q_{ab} = \delta_{ab}$ et le système est paramagnétique ; à T_g , Q_{ab} ($a \neq b$) prend continuellement une valeur non nulle. Celle-ci a une interprétation simple : à T_g l'espace des configurations se divise en un nombre exponentiel de vallées, chaque vallée étant elle-même divisée en sous-vallées, cette division continuant à l'infini. Si la symétrie de réplique est brisée k fois, les configurations peuvent donc être regroupées en "états", au sein desquels le recouvrement typique de deux configurations est q_k ; q_k est donc égal à q_{EA} . Ces "états" peuvent être regroupés en amas d'états, le recouvrement typique entre deux configurations appartenant à des états différents du même amas étant q_{k-1} . On peut ensuite définir des amas d'amas, et ainsi de suite, les recouvrements diminuant au fur et à mesure. On peut alors définir une distance entre répliques $d_{ab} = \frac{1-q_{ab}}{2}$, qui rend l'espace des configurations ultramétrique², c'est-à-dire l'espace des configurations est hiérarchisé et organisé en vallées de plus en plus profondes (cf. figure (I.3)), l'avant dernier niveau de cette hiérarchie étant constituée des "états purs" [37]. La notion d'état pur est utilisée ici pour désigner des régions de l'espace des configurations séparées par des barrières d'énergie libre infinies. En effet, un recouvrement non nul entre deux états indique que le nombre typique de spins à retourner pour passer de l'un à l'autre est une fonction de la taille N du système, qui diverge lorsque N tend vers l'infini. Dans le cas du modèle SK, l'existence d'un ensemble continu de valeurs possibles de $q(x)$ indique que le nombre de spins à retourner pour quitter un état croît moins vite que N ; des simulations numériques tendent à indiquer que cette croissance est en $N^{\frac{1}{3}}$ [38]. Nous décrivons plus loin des systèmes pour lesquels ce nombre croît comme N .

²Deux configurations symétriques l'un de l'autre par renversement de tous les spins ont un recouvrement -1 . Pour obtenir une structure ultramétrique qui n'est pas trivialement violée par la symétrie \mathbb{Z}_2 , il est nécessaire de quotienter l'espace des configurations par \mathbb{Z}_2

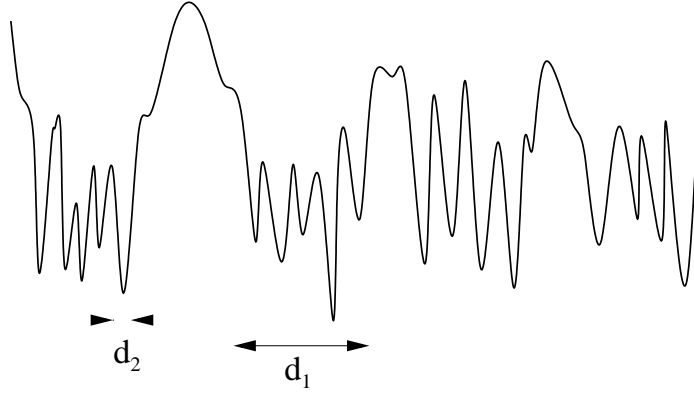


FIG. I.3 – Organisation schématique de l'espace des configurations pour un système présentant une brisure de symétrie de réplique à deux pas. Les vallées les plus profondes correspondent aux états, qui eux-mêmes regroupent des configurations ayant une distance mutuelle typique d_2 .

b) États purs

Il est possible de matérialiser les états purs grâce aux équations de champ moyen, dérivées par Thouless, Anderson et Palmer [39] (les fameuses équations TAP). Pour le modèle SK, elles s'écrivent

$$\frac{\partial f_{TAP}}{\partial m_i} = \tanh^{-1} m_i - \beta \left(\sum_j J_{ij} m_j - \beta \sum_j J_{ij}^2 (1 - m_j^2) m_i \right) = 0. \quad (7)$$

Ces équations diffèrent des équations de champ moyen écrites en généralisant naïvement la théorie du champ moyen de Weiss par le terme de réaction d'Onsager $-\beta^2 \sum_j J_{ij}^2 (1 - m_j^2) m_i$, qui traduit la frustration au sein du système. Pour une réalisation donnée du désordre $\{J_{ij}\}$, il existe un grand nombre \mathcal{N} de solutions α ($\alpha = 1, \dots, \mathcal{N}$) de (7), d'aimantations m_i^α . Ces solutions sont les points stationnaires de l'énergie libre, et la mesure de Gibbs est donc donnée par la somme des contributions de tous ces points stationnaires [40] :

$$\langle \cdot \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle \cdot \rangle_{\alpha}, \quad (8)$$

où w_{α} est le poids de chaque solution. Le choix le plus naturel $w_{\alpha} \propto e^{-\beta F_{\alpha}}$, F_{α} étant l'énergie libre de la solution α , permet de retrouver la solution de Parisi. Le paramètre d'Edwards-Anderson et le recouvrement d'équilibre sont donnés par : $q_{EA} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \overline{(m_i^{\alpha})^2}$, $q = \sum_{\alpha, \beta} w_{\alpha} w_{\beta} \overline{m_i^{\alpha} m_i^{\beta}}$. La fonction de partition du système peut être écrite sous la forme $Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta F_{\alpha}}$; il est utile de grouper les solutions des équations TAP de même énergie libre en introduisant l'entropie $\Sigma(\beta, f)$ associée à la croissance exponentielle (avec N) du nombre de solutions des équations TAP

d'énergie libre par spin f , appelée "complexité" :

$$e^{N\Sigma(\beta,f)} = \sum_{\alpha} \delta(F^{\alpha} - Nf), \quad (9)$$

et la fonction de partition devient

$$Z = \int df e^{N\Sigma(\beta,f) - N\beta f}. \quad (10)$$

Le terme $e^{N\Sigma(\beta,f)}$ est le nombre de solutions d'énergie libre f . À la limite thermodynamique, la fonction de partition est donc dominée par les solutions d'énergie libre f^* qui maximise $\Sigma(\beta, f) - \beta f$. Dans le modèle SK, en dessous de la température de transition T_g , $\Sigma(\beta, f)$ est strictement positif pour f compris entre $f_0(\beta)$ et $f_1(\beta)$, où la complexité s'annule. Dans ce cas, on peut montrer que f^* n'est pas un extremum, mais $f^*(\beta) = f_0(\beta)$, ce qui signifie que la thermodynamique est donnée par un nombre non exponentiel d'états TAP.

1.2 Verres de spins discontinus

Le modèle SK décrit dans les paragraphes précédents est dans la classe des verres de spins "continus", dans le sens où le paramètre d'ordre n'a pas de discontinuité à la température de transition. Il existe des modèles introduits originellement pour décrire des verres de spins pour lesquels ce n'est pas le cas.

a) Le modèle p-spin sphérique

Le modèle avec interactions à p spins (où modèle "p-spin") est défini par l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1, \dots, i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p}, \quad (11)$$

où les couplages J_{i_1, \dots, i_p} sont Gaussiens et de variance d'ordre $N^{\frac{1-p}{2}}$. La version sphérique (telle que $\sum_i s_i^2 = N$) est entièrement soluble. Pour ce modèle, la symétrie de réplique n'est brisée qu'une fois et donc les barrières d'énergie sont d'ordre N . Comme pour le modèle SK, il est aussi possible d'écrire des équations de champ moyen. Cependant, le comportement de la complexité n'est pas le même [41, 42, 43], et il existe deux températures caractéristiques T_c et T_d ($T_d > T_c$) telles que : au-dessus de T_d , il existe une seule solution des équations TAP, à savoir $m_i = 0$; entre T_c et T_d , il existe un nombre exponentiel de solutions $\Sigma > 0$ entre $f_0(\beta)$ et $f_1(\beta)$ et $\Sigma(\beta, f) - \beta f$ est maximum pour $f^* \in]f_0(\beta), f_1(\beta)[$ tel que $\beta = \frac{\partial \Sigma(\beta, f)}{\partial f} |_{f=f^*}$. Autrement dit, dans cette gamme de température, la thermodynamique est dominée par un nombre exponentiel d'états. Cependant, la complexité $\Sigma(\beta, f^*)$ compense exactement la contribution de l'énergie libre βf^* , de sorte que $\Sigma(\beta, f^*) - \beta f^* = -\beta f_{para}$ où f_{para} est l'énergie libre de la solution paramagnétique $m_i = 0$. D'un point de vue statique, le système est donc paramagnétique ; cependant, l'apparition d'une complexité non nulle à T_d indique la présence d'un nombre exponentiel d'états métastables qui font perdre l'équilibre au système en dessous de T_d . La complexité $\Sigma(\beta) = \Sigma(\beta, f^*(\beta))$ s'annule à $T_c < T_d$. En dessous de T_c , le nombre de solutions

qui dominant la thermodynamique n'est donc plus exponentiel et le système subit une transition discontinue à T_c , le paramètre d'ordre statique q sautant de zéro à une valeur non nulle. La transition à T_c est une transition thermodynamique, au sens où au-dessus de T_c , dans la phase paramagnétique, un nombre exponentiel de configurations contribue à la thermodynamique, alors qu'en dessous de T_c un nombre fini de configurations y contribuent : le système est gelé.

b) Le scénario de la crise d'entropie

Afin d'identifier les états TAP avec les fonds des vallées du paysage d'énergie libre, il est nécessaire de séparer parmi les points stationnaires de l'énergie libre ceux qui sont des minima de ceux qui sont des selles ou des maxima. Ceci a été fait par Cavagna et al. [44, 45], qui ont calculé les valeurs propres de la hessienne $\frac{\partial^2 f_{TAP}}{\partial m_i \partial m_j}$. La densité de valeurs propres obtenue pour des solutions d'énergie E est une loi en demi-cercle, de la forme $\rho(\lambda, E) \propto \sqrt{E_{th}(T)^2 - (\lambda + E)^2}$. Lorsque $E < -|E_{th}(T)|$, les états TAP sont principalement des minima. Dans le cas contraire, ce sont principalement des cols. De plus, à $E = E_{th}(T)$, minima et cols ayant une seule direction négative coexistent en nombre égaux. Au dessus de T_d , l'énergie d'équilibre est supérieure à $E_{th}(T)$ et le point représentatif du système dans l'espace des configurations évolue entre des points selles, sans être vraiment près de certains en particulier. En dessous de T_d , l'énergie d'équilibre est inférieure à $E_{th}(T)$. En particulier, si le système est trempé depuis $T_i > T_d$ à une température $T < T_d$, celui-ci va minimiser son énergie en utilisant les directions négatives présentes dans les cols d'énergie plus grande que $E_{th}(T)$. Cependant, le nombre de directions négatives disponibles diminue avec l'énergie, jusqu'à s'annuler au seuil, ce qui signifie que l'évolution du système est de plus en plus lente. L'étude de la dynamique du modèle p-spin sphérique par Cugliandolo et Kurchan [12] a montré qu'en dessous de T_d l'énergie du système à temps infini est $E_{th}(T) > E_{eq}(T)$. Cette dynamique vers les états de seuil peut être reliée à la taille des barrières entre ceux-ci. En effet, les barrières d'énergie entre les états de seuil croissent comme $N^{\frac{1}{3}}$ [46], alors que les barrières entre les états d'énergie plus basse croissent comme N . Biroli a montré par l'étude dynamique des équations TAP que le système reste bloqué à grand temps au dessus (et au voisinage) de E_{th} et évolue en ce déplaçant (à grands temps) le long de directions plates qui séparent les bassins d'attraction des minima locaux [47].

En dessous de la transition dynamique, les états qui donnent thermodynamique sont des minima locaux. La fonction de partition peut donc être décomposée comme dans (10). L'énergie libre f de chaque vallée est la somme de l'énergie du minimum TAP constituant le fond de la vallée et de la contribution entropique de toutes les configurations contenues dans la vallée. Ainsi, l'entropie est constituée de deux parties : l'une donnée par la complexité lorsqu'un nombre exponentiel de minima locaux dominant la thermodynamique et l'autre donnée par l'entropie au sein des vallées. À la transition statique T_c , la première de ces contributions s'annule et reste nulle en dessous de T_c alors que l'autre ne subit pas de singularité à T_c . Ainsi, à la transition statique, une partie de l'entropie disparaît de façon brutale ; c'est la "crise d'entropie" et la chaleur spécifique chute de façon discontinue.

Ce scénario est analogue au scénario de Kauzmann. L’analogie de la complexité dans le cadre des verres structuraux est l’entropie configurationnelle (la différence entre l’entropie du liquide et celle du cristal). La température T_c correspond donc à la température de Kauzmann où l’entropie configurationnelle s’annule. Pour cette raison, la transition thermodynamique à T_c est appelée “transition vitreuse structurale”.

L’analogie entre le modèle p-spin sphérique et les verres structuraux est plus profonde. Dans une série de papiers célèbre, Kirkpatrick et al. [48, 49, 50] ont montré que les équations dynamiques portant sur la fonction d’auto-corrélation de spins dans la phase paramagnétique du modèle $p = 3$ sont formellement identiques aux équations schématiques obtenues à partir de la théorie du couplage de mode en restreignant le nombre de vecteurs d’ondes à un seul [3, 4]. Ces équations montrent que le temps de relaxation diverge à la transition dynamique. En partant de cette analogie, on peut considérer les modèles de verres de spins discontinus comme des modèles paradigmatiques pour la transition vitreuse. En particulier, de nombreuses tentatives ont été faites pour relier le ralentissement dynamique près de la transition vitreuse à des changements de la structure du paysage d’énergie [51, 52, 53, 54].

2 Verres de spins à connectivité finie

Jusqu’ici, il a été question des modèles de verres de spins complètement connectés. La pertinence de l’image physique obtenue de ces modèles quant-à la compréhension des verres de spins “réalistes”, c’est-à-dire en dimension finie, demeure controversée. Les modèles à connectivité finie ont été introduits afin de tenir compte du fait que chaque spin interagit avec seulement un nombre fini d’autres. Il existe plusieurs types de verres de spins à connectivité finie. Dans le modèle de Viana-Bray [55, 56], le nombre de spins avec lesquels interagit un spin donné fluctue en suivant une loi de Poisson. Nous allons étudier ici des modèles à connectivité³ c fixe, pour lesquels les spins sont situés sur un graphe aléatoire, dont chaque nœud est connecté à exactement c autres nœuds. L’hamiltonien du système est

$$\mathcal{H} = \sum_{i < j} n_{ij} J_{ij} s_i s_j, \tag{12}$$

où les J_{ij} sont des couplages aléatoires indépendants ayant la même distribution $\mathbb{P}(J_{ij})$ et la matrice n est la matrice de connection du réseau : $\forall(i, j) n_{ji} = n_{ij} \in \{0, 1\}$ et $\forall i \sum_j n_{ij} = c$. Du fait de la connectivité finie, il n’est plus possible de décrire la statique à l’aide de la seule matrice Q_{ab} . Cependant, le modèle SK est obtenu en changeant l’échelle des couplages d’un facteur $\frac{1}{\sqrt{c}}$ et en prenant la limite $c \rightarrow \infty$.

³On parle aussi de “coordinance”.

2.1 Statique par la méthode des répliques

Le calcul de l'énergie libre par spin peut s'obtenir par la méthode du col à partir de la fonctionnelle suivante [57] :

$$\frac{c}{2} \ln \left(\sum_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} \rho(\underline{\sigma})^{c-1} \rho(\underline{\tau})^{c-1} \right) - (c-1) \ln \left(\sum_{\underline{\sigma}} \rho(\underline{\sigma})^c \right) \quad (13)$$

Les sommations sont sur $\underline{\sigma}$ et $\underline{\tau}$ appartenant à $\{-1, 1\}^n$. Le paramètre d'ordre est $\rho(\underline{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_i \prod_a \delta(\sigma_a - s_i^a)$. L'interprétation de ce paramètre est simple. En effet, la corrélation en un site entre k répliques est : $\langle s_i^{a_1} \rangle \cdots \langle s_i^{a_k} \rangle = \sum_{\underline{\sigma}} \rho(\underline{\sigma}) \sigma^{a_1} \cdots \sigma^{a_k} = Q_{a_1, \dots, a_k}$. Ainsi $\rho(\underline{\sigma})$ est la fonction génératrice de ces fonctions de corrélations, et la forme (13) exprime le fait qu'il n'est pas possible d'obtenir d'équations fermées pour un nombre fini de ces corrélations. Remarquons que l'introduction de ce paramètre d'ordre fonctionnel est aussi possible dans les modèles complètement connectés. Pour le modèle SK par exemple, il a une forme "gaussienne" : $\rho(\underline{\sigma}) \propto e^{\frac{\beta^2}{4} \sum_{ab} Q_{ab} \sigma_a \sigma_b}$. Du fait que $Q_{ab} = \sum_{\underline{\sigma}} \rho(\underline{\sigma}) \sigma_a \sigma_b$, il est clair que dans ce cas les fonctions de corrélations d'ordre supérieur à 2 s'expriment en fonction de Q_{ab} et la fonctionnelle (13) dépend de Q_{ab} seulement.

a) Solution RS

La première difficulté dans la méthode des répliques est d'écrire les calculs de sorte à pouvoir effectuer la limite $n \rightarrow 0$. Pour cela, on peut exprimer le paramètre d'ordre de la façon suivante :

$$\rho(\underline{\sigma}) = \int d^n \underline{h} P(h^1, \dots, h^n) \prod_a \frac{e^{\beta h^a \sigma^a}}{2 \cosh \beta h^a} \quad (14)$$

De plus, du fait que $|\sigma_a| = 1$, toute fonction des σ_a invariante par toutes les permutations des n indices est une fonction de $\hat{\sigma} = \sum_a \sigma_a$ et donc la forme RS la plus générale pour $\rho(\underline{\sigma})$ est

$$\rho(\underline{\sigma}) = \int dh P(h) \frac{e^{\beta h \hat{\sigma}}}{(2 \cosh \beta h)^n}. \quad (15)$$

Cette forme exprime le fait que dans (14), les champs des répliques sont tous égaux. L'équation de col RS qui en découle est

$$P(h) = \int \prod_{k=1}^{c-1} (dh_k P(h_k)) \mathbb{E} \left[\delta \left(h - \sum_k u(h_k, J_k) \right) \right], \quad (16)$$

où $u(h, J) = \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{\cosh(\beta h + \beta J)}{\cosh(\beta h - \beta J)} \right)$.

Cette équation est une équation de point fixe pour la densité de probabilité $P(h)$ et peut donc par conséquent être résolue par une dynamique de population de la façon suivante :

- considérer N variables réelles h_i , de valeurs aléatoires, ainsi que des couplages J_i distribués selon la loi du désordre ;
- choisir c parmi ces $h_i : h_{i_0}, h_{i_1}, \dots, h_{i_{(c-1)}}$;
- changer la valeur de h_{i_0} à la nouvelle valeur $\sum_{k=1}^{c-1} u(h_{i_k}, J_{i_k})$;
- rechoisir c champs, et itérer, jusqu'à convergence.

Pour prendre un exemple concret, le modèle binaire symétrique possède une distribution $\mathbb{P}(J) = \frac{1}{2} (\delta(J+1) + \delta(J-1))$. À haute température, le système est paramagnétique et la solution RS $P(h) = \delta(h)$ est stable. Cette solution est instable dès que $\beta > \beta_c$, avec β_c donné par $(c-1) \tanh^2 \beta_c = 1$. Mottishaw a montré que la solution RS est aussi instable pour les mêmes températures, et donc que la symétrie de réplique est brisée [58].

b) Solution 1RSB

Dans le cas des systèmes à connectivité finie, il est simple de généraliser l'ansatz 1RSB des modèles complètement connectés. En effet, il suffit de partitionner l'ensemble des n répliques en n/m blocs de taille $m : \underline{h} = (\underline{h}^1, \dots, \underline{h}^{\frac{n}{m}})$. L'ansatz 1RSB le plus général consiste donc à choisir $P(\underline{h})$ invariant par permutation des vecteurs \underline{h}^b et par permutation de leurs composantes :

$$P(\underline{h}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \prod_b P_{\lambda}(\underline{h}^b) \quad (17)$$

et⁴

$$P_{\lambda}(\underline{h}^b) = \int dh \rho_{\lambda}(h) \prod_c \delta(h^{b,c} - h). \quad (18)$$

Si l'on introduit $\mathcal{P}(\rho) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \delta(\rho - \rho_{\lambda})$, on obtient

$$P(\underline{\sigma}) = \int \mathcal{D}\rho \mathcal{P}(\rho) \prod_b \int dh^b \rho(h^b) \frac{e^{\beta h^b \sum_c \sigma^{b,c}}}{2 \cosh(\beta h^b)}. \quad (19)$$

Dans ce cas la distribution $\mathcal{P}(\rho)$ vérifie l'équation suivante [59] :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\rho) &= \mathbb{E} \left[\int \prod_{i=1}^k (\mathcal{D}\rho_i \mathcal{P}(\rho_i)) \delta(\rho - \rho(\{\rho_i\}, \{J_i\})) \right] \\ \rho(\{\rho_i\}, \{J_i\})(h) &= \frac{1}{Z} \int \prod_i (dh_i \rho_i(h_i)) \\ &\quad \times \left((1 - \tanh^2(\beta J_i) \tanh^2(\beta h_i))^{\frac{m}{2}} (2 \cosh(\beta h))^m \right) \\ &\quad \times \delta(h - \sum_i u(h_i, J_i)) \end{aligned} \quad (20)$$

La généralisation à une brisure à k pas est très simple, quoique lourde, car elle implique que le paramètre d'ordre devient une fonctionnelle de fonctionnelles, etc.

⁴Les exposants a, b, \dots désignant des indices de répliques, la notation a, b, \dots rend compte de la subdivision des l'ensemble des répliques en sous-ensembles imbriqués, a réfèrent ici aux sous-blocs les plus grands, b aux sous-blocs de ces sous-blocs, etc.

Cependant, la limite $k \rightarrow \infty$ n'est connue que dans la limite de grande connectivité [60, 61] ou au voisinage de la température critique, où Mottishaw [58] a montré que la symétrie de réplique doit être brisée continuellement.

c) Signification de la brisure de symétrie de réplique

L'équation (16) est exacte si l'on place le modèle non sur un graphe aléatoire, mais sur un arbre de Bethe [62, 63]. En effet, pour un graphe aléatoire, la taille des boucles est d'ordre $\ln N$ et tend vers l'infini avec N , et un graphe aléatoire à connectivité fixe c a donc localement la structure d'un arbre à $c - 1$ fils. On construit un arbre de Cayley de la façon suivante : partant d'un site (la racine), celui-ci est relié à c fils, qui définissent la première génération, dont les $c(c - 1)$, fils définissent la deuxième génération, et ainsi de suite. Un arbre ainsi construit avec K générations est un arbre de niveau K . La limite thermodynamique s'obtient en faisant croître K à l'infini ; cependant, il est crucial pour cela de tenir compte des conditions aux bords (les feuilles de l'arbre). En effet, pour un tel système, une fraction finie de spins appartiennent au bord. Si l'on fixe les conditions aux bord, l'arbre de Cayley est clairement un système non homogène. On peut résoudre le problème en moyennant sur toutes les conditions de bord possibles, auquel cas le système obtenu est paramagnétique à toute température, du fait qu'une fraction finie de spins n'interagissent qu'avec un seul voisin. La construction de l'arbre de Bethe est faite pour éliminer les bords en les rejetant à l'infini [64]. À partir d'un arbre de Cayley à L générations, considérons un sous arbre partant d'un des noeuds, à $L' < L$ générations. L'arbre (ou le réseau) de Bethe est le sous-système obtenu en prenant d'abord la limite $L \rightarrow \infty$, puis $L' \rightarrow \infty$.

Il devient alors possible de calculer la fonction de partition itérativement, génération par génération, en calculant le champ effectif exercé par une génération sur la génération parente. La méthode de la cavité permet de généraliser ce calcul itératif à des systèmes qui ne sont pas des arbres, mais qui ont une structure locale d'arbre, c'est-à-dire dont la taille des boucles tends vers l'infini avec la taille du système [65]. Considérant un système de N spins, un site 0 est ajouté au système. Lorsque N est grand, les grandeurs thermodynamiques sont modifiées d'une grandeur finie qui est calculée en fonction de la structure locale du système. Pour un arbre de Bethe, la méthode de la cavité est simple : pour ajouter un spin, il suffit de considérer des sites $i \in [1, k]$ ($k = c - 1$), qui sont les extrémités de branches d'arbre, et le site 0 qui est ajouté (cf. figure (I.4)). Le champ effectif h_0 créé par les spins i est tel que $\langle \sigma_0 \rangle \propto \tanh(\beta h_0)$ et la distribution p_0 de σ_0 vérifie

$$p_0(\sigma_0) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_k} p(\sigma_1, \dots, \sigma_k) p(\sigma_0 | \sigma_1, \dots, \sigma_k). \quad (21)$$

Or sur l'arbre de Bethe, les branches qui finissent aux sites $1, \dots, k$ sont décorréélées, donc la distribution jointe $p(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ est factorisable : $p(\sigma_1, \dots, \sigma_k) = \prod_i p_i(\sigma_i)$, où $p_i(\sigma_i) \propto e^{\beta h_i \sigma_i}$ et $p(\sigma_0 | \sigma_1, \dots, \sigma_k) \propto e^{\beta \sigma_0 \sum_i J_{0i} \sigma_i}$. On obtient donc $\frac{e^{\beta h_0 \sigma_0}}{\prod_i (\sum_{\sigma_i} e^{\beta h_i \sigma_i + \beta J_{0i} \sigma_0 \sigma_i})} \propto e^{\beta \sigma_0 \sum_i u(h_i, J_{0i})}$, et si l'on pose $P(h) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(h - h_i) \rangle$, $P(h)$ est solution de (16). Nous avons ici considéré l'addition d'un site pour calculer de façon auto cohérente la distribution des champs de cavité. Cependant, cette

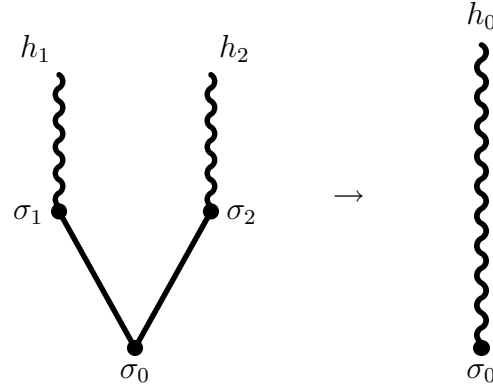


FIG. I.4 – Itération de la méthode de la cavité pour une connectivité $c = 3$. La sommation sur les spins voisins du spin 0 induit un nouveau champ de cavité sur celui-ci.

construction ne construit que des arbres à k fils, c'est-à-dire il y a toujours un site qui n'a pas c mais $k = c - 1$ voisins. Afin de connaître les grandeurs thermodynamiques, il est nécessaire de construire un réseau où tous les sites ont c voisins. Il y a deux façons possibles, représentées sur les figures (I.5) et (I.6) : relier c branches à un site central 0, ou relier entre elles deux extrémités de branches 0 et 0'. L'énergie libre totale est la somme des contributions de chaque branche et d'une contribution de l'interaction entre les branches due à la réunion. Par exemple, dans le deuxième cas, l'énergie libre de la première branche est obtenue en prenant la trace sur les spins σ_i et σ_0 (et similairement pour l'autre branche), alors que l'énergie libre du système réuni est obtenue en faisant la trace sur les $\sigma_i, \sigma_{i'}, \sigma_0$ et $\sigma_{0'}$. Il est facile de montrer que ces contributions diffèrent de la valeur suivante :

$$-\beta\Delta f^{(2)} = \text{TrE} \left[\exp \left(\beta J_0 \sigma_0 \sigma'_0 + \beta \sum_{i=1}^k ((J_i \sigma_0 + h_i) \sigma_i + (J'_i \sigma'_0 + h'_i) \sigma'_i) \right) \right] \quad (22)$$

et la différence lorsqu'on réunit c branches en un site :

$$-\beta\Delta f^{(1)} = \mathbb{E} \left[\sum_{\sigma_0, \dots, \sigma_c} \exp \left(\beta \sum_{i=1}^c (h_i + J_i \sigma_0) \sigma_i \right) \right]. \quad (23)$$

Si la branche i contient en moyenne un grand nombre $N_i \simeq \alpha N$ spins, la densité d'énergie libre vérifie $(c\alpha N + 1)f = c\alpha N f_{\text{branche}} + \Delta f^{(1)}$ et $2\alpha N f = 2\alpha N f_{\text{branche}} + \Delta f^{(2)}$, et donc :

$$f = \Delta f^{(1)} - \frac{c}{2} \Delta f^{(2)}. \quad (24)$$

Si l'on insère la forme (17) dans (13), on trouve la même forme pour la densité d'énergie libre.

Comme nous l'avons dit précédemment, les graphes que nous considérons ont une structure local d'arbre. Cependant, pour un système de N sites, il se forme des boucles dont la taille est de l'ordre de $\ln N$, du fait que partant du site central, le nombre des sites à une génération donnée croît exponentiellement avec l'éloignement. Un graphe aléatoire à connectivité finie est donc obtenu à partir d'un arbre d'ordre

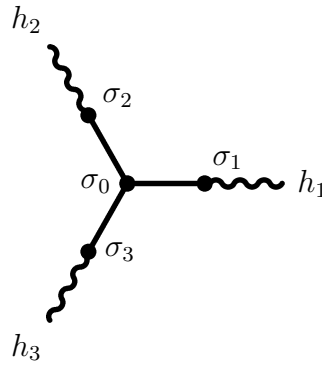
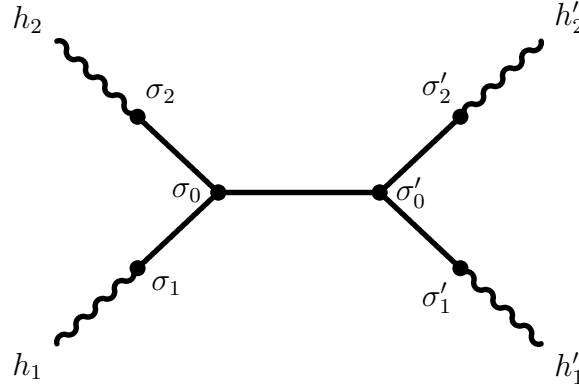

 FIG. I.5 – Formation du graphe en reliant c branches en un site.


FIG. I.6 – Formation du graphe en reliant 2 branches.

$K \sim \ln N$ en regroupant les feuilles par groupes de c feuilles et en identifiant les valeurs des spins à l'intérieur de chaque groupe. Il est clair que dans ce cas, les champs locaux h_i considérés dans la méthode de la cavité ne sont plus indépendants et donc (16) n'est pas vérifiée. Ceci est traduit par l'existence de plusieurs états purs, les champs de cavité h_i^α fluctuant d'état pur à état pur et de site à site. La distribution par site moyennée sur les états purs est

$$\rho_i(h) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle \delta(h - h_i^{\alpha}) \rangle, \quad (25)$$

où $p_i^{\alpha}(h) = \langle \delta(h - h_i^{\alpha}) \rangle$ est la moyenne thermodynamique de la distribution du champ de cavité dans l'état α . La méthode de la cavité doit être modifiée pour tenir compte des fluctuations entre états [65]. Dans ce cas, la distribution $p(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ factorise à l'intérieur de chaque état⁵, et la distribution $\mathcal{P}(\rho)$ introduite précédemment est précisément :

$$\mathcal{P}(\rho) = \frac{1}{N} \sum_i \overline{\delta(\rho - \rho_i)} \quad (26)$$

De plus, l'itération de la méthode de la cavité défavorise certains états par rapport à d'autres, leurs poids étant donnés par $w_{\alpha} \propto \exp(-m\beta\Delta f)$ où Δf peut être obtenu formellement à partir de (20).

⁵L'analogie dans l'espace des répliques consiste à identifier $\rho(h^a)$ réplique par réplique, ce qui mène à l'équation (20)

Plus généralement, une brisure de symétrie à deux pas signifie que les états pur sont organisés en amas, que les champs de cavité fluctuent entre différents amas, puis à l'intérieur des amas, et enfin de site à site. Et ainsi de suite...

2.2 Autre systèmes à connectivité finie

Les verres de spins sur des graphes aléatoires ont de nombreuses applications dans divers domaines de la physique ainsi que dans d'autres disciplines, en particulier en optimisation.

a) Problèmes d'optimisation

I. SATISFAISABILITÉ

Il existe de nombreux problèmes d'optimisation dont la résolution peut être mise en correspondance avec des modèles de verres de spins sur des graphes aléatoires. La satisfaisabilité (SAT) en est l'exemple type. Le problème est défini de la façon suivante. Considérons N variables booléennes x_i , $i = 1, \dots, N$. Pour chaque variable x_i , la variable \bar{x}_i représente sa négation. On construit des "clauses" en prenant le OU logique entre k variables choisies parmi les $2N$ variables x_i et \bar{x}_i . Par exemple, pour $N = 10$, $C = x_3$ OU \bar{x}_6 OU \bar{x}_8 est une clause possible. Une instance I du problème est la réunion de M clauses par l'opérateur logique ET : $I = C_1$ ET \dots ET C_M . Une solution du problème est une configuration des variables x_i pour laquelle I est vraie. La k -satisfaisabilité (kSAT) correspond au cas où le nombre de variables dans chaque clause est fixé à k . Un cas qui a focalisé particulièrement l'attention est le cas où le nombre N de variables et le nombre de clauses M sont grands, leur rapport $\alpha = M/N$ étant d'ordre 1. De plus, l'étude de problèmes spécifiques étant très complexe, une approche plus simple consiste à étudier de façon statistique la satisfaisabilité, en choisissant les variables aléatoirement. Le problème ainsi obtenu est celui de la kSAT aléatoire⁶. La théorie de la complexité algorithmique est l'étude du pire cas ; l'utilisation des méthodes de physique statistique permet d'étudier le cas typique. Cette approche est donc particulièrement utile lorsque la complexité du pire cas et du cas typique sont similaires, ce qui a été démontré pour certains problèmes, mais demeure non prouvé pour la satisfaisabilité. Le problème de la satisfaisabilité appartient à la classe des problèmes NP, c'est-à-dire ceux dont on peut tester en temps polynômial si une instance *donnée* est solution du problème. De plus, il a été montré par Cook [66] que SAT est NP-complet : tout problème NP peut se ramener en un temps polynômial à SAT. Il existe une sous-classe de NP qui est la classe P des problèmes qui sont solubles en temps polynômial, comme le tri ou la primauté des nombres⁷. Un problème majeur de l'optimisation combinatoire est de savoir si P et NP sont confondus. La réponse est affirmative si et seulement si il existe un problème NP-complet qui est dans P. L'étude des problèmes NP-

⁶Comme nous ne parlerons que du problème aléatoire, nous l'appellerons kSAT quand même, par abus de langage.

⁷Le problème de tester en temps polynômial si un nombre de N chiffres est premier a été résolu récemment par Agrawal et al. [67]. L'algorithme proposé est en N^{12} et il est probablement possible d'obtenir un algorithme en N^6 selon ses auteurs.

complets, comme kSAT, est donc de première importance. Pour la kSAT, il existe un algorithme, dû à Davis et Putmann, qui permet de dire si un problème donné a une solution [68]. Cet algorithme explore systématiquement toutes les solutions en les classant dans un arbre de recherche, jusqu'à en trouver une (le problème est satisfaisable) ou les avoir toutes explorées (le problème n'est pas satisfaisable). Cet algorithme met un temps exponentiel pour décider, et aucun algorithme connu ne permet de décider plus rapidement qu'en temps exponentiel. Cependant, les outils de la physique statistique ont permis d'aborder le problème de la complexité typique sous un angle nouveau, et ont même conduit à la constructions d'algorithmes très rapides pour trouver des solutions lorsque le problème est satisfaisable.

La kSAT peut être ramenée à un verre de spin dilué [69, 70, 71] en associant à chaque variable x_i un spin s_i , qui vaudra 1 (resp. -1) si la variable est vraie (resp. fausse). L'énergie d'une configuration est ensuite définie comme le nombre de clauses non satisfaites par celle-ci, de sorte que les solutions du problème sont les états fondamentaux de l'énergie ainsi construite. Cette énergie est la somme des énergies des clauses ; par exemple l'énergie de la clause donnée pour exemple plus haut est $\mathcal{E} = \left(\frac{1+s_3}{2}\right) \left(\frac{1-s_6}{2}\right) \left(\frac{1-s_8}{2}\right)$.

Le modèle de verre de spins ainsi construit est un modèle dilué à connectivité fluctuante. En effet, la probabilité qu'une variable appartienne à l clauses est poissonnienne : $P(l) = e^{-k\alpha} \frac{(k\alpha)^l}{l!}$. Lorsque $k \leq 2$, le graphe contient des boucles de taille typique $\ln N$; il contient des "hyperboucles" lorsque $k \geq 3$. Une hyperboucle est un sous-graphe minimal \mathcal{C} tel que chaque site est connecté à un nombre pair de voisins dans \mathcal{C} . Ainsi, la topologie des graphes change lorsque k devient plus grand que 2. Ce changement topologique est à l'origine de la différence qualitative entre les solutions de 2SAT et kSAT, $k \geq 3$. En effet, 2SAT peut être résolue exactement avec ou sans l'usage de la méthode des répliques. Pour $\alpha < \alpha_p$, où α_p est le seuil de percolation, le système est non frustré, et il existe un nombre croissant exponentiellement avec N de solutions (phase "SAT") ; pour $\alpha > \alpha_p$, le système est frustré et il n'existe plus de solutions (phase "UNSAT"). L'intuition en est simple : lorsque α est petit, le système est fortement sous-contraint et possède beaucoup de solutions. Par contre, lorsque α devient grand, le système est surcontraint et ne possède donc plus de solutions. Il n'existe pas de solution exacte connue de 3SAT. Cependant, le diagramme de phase peut être trouvé en utilisant un schéma 1RSB. En utilisant un calcul variationnel gaussien [72] (c'est-à-dire dont la distribution des champs de cavité est une superposition gaussienne de gaussiennes), Biroli et al. ont mis en évidence le comportement suivant : pour $\alpha < \alpha_d$, le système est non frustré et possède un nombre exponentiel de solutions (phase "SAT"). Lorsque α croît jusqu'à dépasser α_d , il existe toujours un nombre exponentiel de solutions. Cependant, l'ensemble de ces solutions est éclaté en amas disjoints au sein desquels la distance typique entre solutions est la même, définissant la taille de ces amas. La distance moyenne entre ces amas varie peu avec α , mais à $\alpha_c > \alpha_d$, une transition de phase survient : il n'y a plus de solutions qui satisfont toutes les clauses. De plus, dans les configurations optimales (celles qui satisfont le plus de clauses) la majorité des variables deviennent gelées (c'est-à-dire complètement contraintes). Ces variables gelées peuvent être divisées en deux catégories : celles qui fluctuent entre les configurations optimales et

celles qui sont les mêmes dans toutes les configurations optimales. L'ensemble de ces dernières constitue le "squelette" du problème. Ce diagramme de phase a été affiné par Mézard et al. qui ont résolu le problème dans le cadre de la méthode de la cavité au niveau 1RSB. Ils ont également construit un algorithme permettant de résoudre en temps non exponentiel kSAT jusqu'à α_c pour des instances aléatoires fixées [73, 74].

II. CODES CORRECTEURS ET COLORIAGE DE GRAPHES

Il existe un problème pour lequel l'existence de l'organisation hiérarchique des configurations optimales prévue par la méthode des répliques peut être prouvée rigoureusement. Il s'agit de la kXOR-SAT aléatoire [75, 76, 77, 78]. Le problème implique, comme pour la kSAT, $M = \alpha N$ clauses constituées de k variables booléennes x_i choisies parmi N . Seule la manière dont les clauses sont satisfaites diffère : à chaque clause C_m est associée une parité y_m . Cette clause est satisfaite si la parité de la somme de ses variables est la même que celle de y_m :

$$\sum_{q=1}^k x_{i_q} \equiv y_m \pmod{2}. \quad (27)$$

En introduisant $\sigma_i = (-1)^{x_i}$ et $J_m = (-1)^{y_m}$, le problème revient à trouver des états fondamentaux non frustrés de l'hamiltonien $\mathcal{H} = \sum_{m=1}^M (1 - J_m \sigma_{i_1} \cdots \sigma_{i_k})$. Il s'agit ici d'un problème de verre de spins sur un hypergraphe aléatoire dont la connectivité fluctue autour de sa moyenne α .

L'étude de la kXOR-SAT aléatoire en présence d'un champ aléatoire est liée à celle de codes correcteurs d'erreurs [79].

Un autre problème d'optimisation sur les graphes aléatoires est le problème du coloriage : étant donné un graphe, dont les sommets sont tous "coloriés" à l'aide d'un nombre donné de couleurs, quel est le nombre minimal de couleurs nécessaires pour que deux sommets voisins soient toujours de couleurs différentes ? Ce problème est équivalent à étudier les modèles de Potts antiferromagnétiques à q états sur le graphe considéré avec l'hamiltonien $\mathcal{H} = \sum_{ij} n_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$, et à déterminer la valeur minimale de q pour laquelle l'énergie du fondamental est nulle. Il a été résolu par Mulet et al. en utilisant l'approximation 1RSB [80].

b) Autres applications des systèmes à connectivité finie

Il existe d'autres systèmes proches des verres de spins à connectivité finie [81, 82, 83]. Les cas des connectivités 3 et 4 ont été particulièrement étudiés pour leur lien avec la gravité à deux dimensions et la théorie des cordes [82, 84, 85, 86]. En effet, la fonction de partition dans l'ensemble grand canonique est formellement celle d'une théorie ϕ^3 (ou ϕ^4) de dimension d'espace 0 mais de paramètre d'ordre de dimension N , dont le développement diagrammatique est précisément la moyenne de la fonction de partition d'un modèle d'Ising ferromagnétique sur des graphes aléatoires de connectivité 3 ou 4.

La résolution systématique de problèmes à connectivité finie à l'aide de la méthode des répliques/cavité (les deux étant équivalents) dans l'ensemble 1RSB (ou des brisures d'ordres supérieures, mais l'effort numérique nécessaire est important, sans

changer de façon significative le résultat dans de nombreux cas) à l'aide de dynamiques de populations ou d'algorithmes plus complexes permet d'étudier de nombreux modèles sur réseau dans l'approximation "graphes aléatoires", comme les modèles d'hétéropolymères par exemple.

Chapitre II

États métastables dans les systèmes désordonnés

1 Introduction

Usuellement, la notion de métastabilité décrit une phase dont l'énergie libre n'est minimale que localement ; dans un système vitreux, elle est reliée à l'existence d'une organisation très complexe de l'espace des phases. Si l'on considère par exemple un système sujet à une transition de phase du premier ordre quand on change la température, il est simple de voir l'effet de cette métastabilité. Si le système est refroidit très lentement depuis une température assez élevée, il reste dans la phase métastable jusqu'à ce que celle-ci disparaisse à la température spinodale, située en dessous de la température critique où les deux phases (s'il y a une seule phase métastable) coexistent. Pour certains systèmes, comme de l'eau au point tricritique, plusieurs phases métastables, représentant différents états physiques peuvent être présentes simultanément.

Dans un système vitreux, les états métastables ne représentent pas des états physiques différents, mais des régions déconnectées de l'espace des phases qui ne contiennent pas de minimum global de l'énergie libre. Ces régions sont séparées par de grandes barrières d'énergie que le système doit franchir pour passer d'une à l'autre. Celui-ci doit franchir des barrières de plus en plus profondes pour diminuer son énergie. La première formulation quantitative du ralentissement qui en découle a été le "modèle de pièges" de Bouchaud [87, 88]. Dans les paragraphes qui suivent, plusieurs définitions possibles d'états métastables, vont être données.

2 Définition de différents types d'états

2.1 Barrières d'énergie libre

Les modèles de verres de spins infiniment connectés ont été les premiers modèles dans lesquels une prolifération exponentielle d'états métastables a été observée analytiquement. Dans ces modèles, dont deux comportements typiques sont ceux du

modèle SK et du modèle p-spin sphérique, on désigne par “vallée”, ou “états” les voisinages des minima locaux de l’énergie libre. Cependant, il est difficile de définir convenablement ces vallées afin d’obtenir une notion pertinente dans l’étude d’une large gamme de modèles vitreux. Quoi qu’il en soit, une définition dynamique ne peut être dissociée d’une définition en terme de régions séparées par de grandes barrières d’énergie libre. En effet, on peut définir dynamiquement une vallée comme une région de l’espace des configurations dans lequel le système reste un temps qui diverge avec N quand N tend vers l’infini. Or, si un système peut quitter une vallée pour en visiter une autre en un temps fini τ , c’est qu’il a dû franchir une barrière d’énergie libre, τ étant donné par la loi d’Arrhenius par la $\Delta F : \tau \propto e^{\frac{\Delta F}{T}}$. La divergence du temps nécessaire pour quitter la vallée est donc équivalente à la divergence de la barrière d’énergie libre correspondante. Remarquons qu’une barrière d’énergie libre peut être une barrière énergétique ou entropique, ou les deux à la fois. Il existe des modèles ne contenant que des barrières entropiques [89, 90], dont le modèle du Backgammon [91, 92, 93] introduit par Ritort est un bon exemple. Dans ce modèle, à l’instant initial, N particules sont placées au hasard sur un réseau comportant N sites. L’énergie du système est simplement définie comme le nombre de sites occupés. La dynamique est une dynamique de Métropolis dans laquelle les particules peuvent sauter de leur position courante à n’importe quelle autre. L’état fondamental du système est N fois dégénéré et correspond à des configurations où toutes les particules sont sur le même site. À très basse température, afin de s’approcher de l’état fondamental, le système peuple un nombre fini de sites de façon macroscopique. Cependant, le peuplement d’un site unique requiert le dépeuplement des autres sites les plus remplis, ce qui donne des barrières entropiques d’ordre N . La présence de ses barrières fait que le système met un temps très grand pour rejoindre l’équilibre au voisinage de $T = 0$. Un exemple plus simple de barrière entropique est celui d’un système formé de deux réservoirs reliés l’un à l’autre par un tuyau très fin. À l’instant initial, l’un est rempli de gaz et l’autre est vide. Il est clair que dans l’état d’équilibre du système les deux réservoirs sont remplis, à la même pression, mais l’obligation qu’ont les particules de migrer par le tuyau central constitue une barrière entropique.

Si dans les modèles de champ moyen, les états métastables peuvent être définis comme des régions d’énergies libres différentes séparées par des barrières d’énergie libre infinies, une telle définition n’est plus possible en dimension finie. En effet, en dimension finie si une phase A a une énergie libre supérieure à celle d’une phase B, la phase A peut être détruite par la nucléation d’une “goutte” de B. La barrière à franchir pour cette nucléation est due à la tension de surface à l’interface entre les deux phases. Si une fluctuation fait naître une goutte suffisamment grande pour que cette tension de surface ne puisse la faire disparaître, celle-ci peut continuer de croître et de détruire la phase métastable. En dimension infinie, la surface n’est plus négligeable par rapport au volume (par exemple sur l’arbre de Bethe, le volume d’une goutte est proportionnelle à sa surface), et donc le coût énergétique de l’interface reste supérieur au gain en énergie libre.

2.2 Divers types de minima locaux

Dans les modèles de champ moyen, il est tentant d'appeler "états" les solutions des équations TAP qui correspondent à des minima locaux de l'énergie libre. Cependant la structure de ces minima est difficile à appréhender et ceux-ci ne peuvent pas être définis en dimension finie. Il convient donc d'avoir une définition différente, avec un plus large champ d'application.

À température nulle, il est simple de définir les états métastables comme les minima locaux de l'énergie, qui sont les configurations qui ne peuvent être quittées à $T = 0$ par une dynamique locale, c'est-à-dire les configurations finales obtenues en faisant des descentes de gradient dans l'espace d'énergie. Ces minima locaux sont aussi appelés "structures inhérentes", et ils dépendent de la dynamique.

Pour un verre de spins d'Ising sur un réseau hypercubique, un graphe aléatoire ou un réseau complètement connecté, et pour les dynamiques usuelles où les spins peuvent être retournés un par un, une structure inhérente est une configuration telle que l'énergie augmente lorsqu'on retourne un spin quelconque. À température non nulle, ces états qui sont métastables à $T = 0$ ne stoppent plus la dynamique. Cependant, selon leur degré de stabilité, ils peuvent piéger le système pendant un temps plus ou moins long. On peut définir des configurations k -métastables comme des configurations pour lesquelles il est nécessaire de renverser au moins $k + 1$ spins pour diminuer l'énergie ($k + 1$ est le meilleur cas ; dans le cas typique, la croissance est exponentielle avec k). Dans le cas typique, le temps nécessaire pour quitter un tel état est au moins $k + 1$. Le nombre de configurations k -métastables croît exponentiellement avec la taille du système, le taux logarithmique de croissance Σ_k définissant leur complexité. Il apparaît naturel de définir un état métastable comme un ensemble de configurations k -métastables, k tendant vers l'infini avec N . Dans le cas du modèle SK ou des verres de spins sur des graphes aléatoires, Biroli et Monasson ont argumenté que pour le modèle SK, tous les états 1-métastables sont k -métastables [94] pour tout k fini. L'argument pour $k = 2$ est le suivant : considérons une configuration 1-métastable et retournons deux spins i et j . Désignant par $\Delta E_i > 0$ et $\Delta E_j > 0$ les coûts énergétiques respectifs du retournement isolé de chacun de ces spins, le coût énergétique du retournement de la paire (i, j) est $\Delta E_{ij} = \Delta E_i + \Delta E_j - 2J_{ij}s_i s_j$. Or, la partie $-2J_{ij}s_i s_j$ est d'ordre $\frac{1}{\sqrt{N}}$ et donc $\Delta E_{ij} = \Delta E_i + \Delta E_j$ à la limite thermodynamique (ΔE_i et ΔE_j étant d'ordre 1), et donc $\Delta E_{ij} > 0$. Ceci est généralisable directement à $k > 2$. Cependant cet argument peut être discuté, car il repose sur le fait que tous les champs locaux sont d'ordre 1 ; or, il peut exister des configurations dans lesquelles une fraction de spins ayant un champ local d'ordre $\frac{1}{\sqrt{N}}$, tout en étant alignés avec celui-ci. De telles configurations sont 1-métastables, mais pas nécessairement 2-métastables. De plus, il faut être prudent avant d'identifier à température nulle les états TAP avec les configurations 1-métastables et k -métastables. En effet, dans les modèles SK les équations TAP s'écrivent

$$m_i = \tanh \left(\beta \left(\sum_j J_{ij} m_j - \beta(1 - q) m_i \right) \right). \quad (1)$$

Ces équations tendent vers des configurations 1-métastables à condition que le re-

couvrement tende très vite vers 1 quand T tend vers 0 : $1 - q \ll T$. Or la valeur de q intervenant dans (1) est le recouvrement entre les états les plus nombreux, à savoir les états de seuil ; ce recouvrement q_{th} vérifie $1 - q_{th} \sim_{T \rightarrow 0} aT$. La constante a est le résidu à $T = 0$ du terme de réaction d’Onsager et joue le rôle d’un champ magnétique, détruisant la majorité des solutions. Cavagna et al. [95] ont calculé la complexité totale à $T = 0$; ils ont trouvé¹ $\Sigma = 0,0073$, à comparer avec la complexité des configurations 1-métastables $\Sigma_1 = 0,1992$. Cette différence peut-être comprise en revenant à la définition de la complexité Σ des états TAP. Cette complexité est associée au nombre total de solutions des équations TAP qui sont des minima, complexité donnée par celle des états de seuil. Or la complexité des configurations 1-métastables, Σ_1 , est associée à tous les états 1-métastables, dont on ne peut dire s’ils sont des minima, des cols ou des maxima de l’énergie libre à $T = 0$, compte-tenu du caractère discret du problème. Parmi ceux-ci, seuls ceux qui sont obtenus par extrapolation des états de seuil à $T = 0$ contribuent à la complexité $\Sigma(T = 0)$. Une autre difficulté réside dans l’existence de champs locaux nuls (qui sont nombreux pour des graphes aléatoires de connectivité paire). Dans ce cas, les spins correspondants ont une aimantation nulle. Le fait de renverser ces spins ne change pas l’énergie, ce qui signifie qu’il y a autant de directions plates dans le paysage d’énergie que de tels spins. En particulier, les états métastables contenant une fraction de champs locaux nuls ne peuvent être des minima. Dans le cas du modèle SK, les couplages étant proportionnels à $\frac{1}{\sqrt{N}}$, certains champs locaux peuvent être d’ordre $\frac{1}{\sqrt{N}}$, et donc ceux-ci ne peuvent être considérés comme nuls que si $\beta \ll \sqrt{N}$; l’ordre des limites $\beta \rightarrow \infty$ et $N \rightarrow \infty$ est donc important, ce qui explique la difficulté de comparer les états TAP, qui sont bien définis à température T finie et taille N infinie, aux configurations k -métastables, qui elles sont bien définies à température nulle et taille N finie. Il demeure possible que les états TAP à $T = 0$ soient les états k -métastables, où k tends vers l’infini avec N , par exemple $k \sim N^\alpha$, α dépendant du degré de stabilité, minimum pour les états de seuil.

Notons ici que même si les configurations 1-métastables ne sont celles qui dominent ni la dynamique ni la statique, y compris à température nulle, la frustration au sein du système est qualitativement liée à l’existence d’un nombre exponentiel de telles configurations. Par exemple, dans le modèle SK, la ligne de De Almeida et Thouless [96] (“ligne AT”), qui sépare dans le plan température/champ la phase verre de spins de la phase paramagnétique, a un pendant dans le plan énergie/champ [97], qui sépare celui-ci en deux zones, l’une où $\Sigma_1 > 0$ et l’autre où $\Sigma_1 = 0$.

S’il est difficile de définir (même de façon peu rigoureuse) des états en champ-moyen, cette tâche devient un énorme défi en dimension finie. En effet, dans ce cas les états métastables ont un temps de vie fini, qui toutefois peut être assez grand comparé aux échelles de temps des simulations ou des expériences. La difficulté est de construire des objets qui dans la limite champ-moyen permettent de retrouver tous les résultats statiques et dynamiques connus. Une approche possible

¹Ce calcul est celui de la complexité recuite, qui correspond à un calcul statique 1RSB (et incluant à la fois les minima et les maxima de l’énergie libre TAP). Un calcul exact de la complexité impliquerait un calcul RSB complet, et il est possible que le résultat en serait $\Sigma = 0$, comme c’est le cas à température finie.

consiste à généraliser au niveau champ-moyen les états à des états à durée de vie finie donnée [98], c'est-à-dire des états dans lesquels le système reste durant un temps t^* à température T . Dans la limite $t^* \rightarrow \infty$, les états TAP sont retrouvés. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle nécessite un calcul dynamique, qui est très difficile en dimension finie.

3 Relation entre les états métastables et la dynamique à grands temps

La métastabilité dans les systèmes vitreux réfère à l'existence de régions de l'espace des configurations dans lesquelles le système peut rester durant des temps très long. C'est pourquoi les états métastables influencent la dynamique aux temps longs. La question majeure est : comment ?

3.1 Température effective, quasi-équilibre et quasi-états

Considérons le modèle p-spin sphérique à température $T' > T_d$ plongé subitement à $T \in]T_d, T_c[$. L'énergie atteinte asymptotiquement est $E_{th}(T)$. De plus, à grands temps, la température effective T_{eff} , obtenue par la solution des équations dynamiques, et la complexité Σ , obtenue par un calcul purement statique, vérifient la relation

$$\frac{1}{T_{eff}} = \left. \frac{\partial \Sigma(\beta, f)}{\partial f} \right|_{f=f_{th}}. \quad (2)$$

Cette relation suggère une importance particulière des états de seuil. Pour formaliser un peu cette relation, introduisons d'abord une énergie libre auxiliaire conjuguée à la complexité par transformation de Legendre :

$$\begin{aligned} e^{-N\gamma\Phi(\gamma,\beta)} &\equiv Z(\gamma, \beta) \\ &\equiv \sum_{\alpha} e^{-N\gamma f_{\alpha}} \\ &= \int df e^{-N\gamma f + N\Sigma(\beta, f)}. \end{aligned} \quad (3)$$

On obtient la complexité à partir de $\Phi(\gamma, \beta)$ de façon usuelle :

$$\begin{aligned} \Sigma(\beta, f) &= \frac{\partial (\Phi(\gamma, \beta))}{\partial \gamma}, \\ f &= \frac{\partial (\gamma\Phi(\gamma, \beta))}{\partial \gamma}. \end{aligned} \quad (4)$$

Inversement, la température γ des états métastables est

$$\gamma = \frac{\partial \Sigma(\beta, f)}{\partial f}. \quad (5)$$

La violation de FDT est strictement valide dans la limite $t_w = \infty$ et la dynamique vers le plateau (à temps court) est bien connue. Cependant, le régime intermédiaire

est peu connu, et c'est pourtant dans ce secteur que le FDT commence à être violé. Franz et Virasoro [99] ont tenté de formaliser cela de la façon suivante. Plaçons-nous à $t_w \gg 1$. Si on se place à un temps $\tau = t - t_w \sim t_w$, les degrés de liberté rapides, qui contribuent à la dynamique d'équilibre à temps court peuvent être considérés comme thermalisés. On peut alors décomposer $s_i(t)$ en deux parties : $s_i(t) = m_i(t) + (s_i(t) - m_i(t))$. La première partie correspond à des aimantations très proches de celles de certaines vallées, alors que la deuxième partie correspond à l'écart au fond de ces vallées. La corrélation $C(t + t_w, t_w)$ se décompose en deux parties :

$$C(\tau + t_w, t_w) = C_{eq}(\tau) + C_{ag}(\tau + t_w, t_w), \quad (6)$$

avec

$$\begin{aligned} C_{eq}(\tau) &= \overline{\langle (s_i(\tau + t_w) - m_i(\tau + t_w))(s_i(t_w) - m_i(t_w)) \rangle}, \\ C_{ag}(\tau + t_w, t_w) &= \overline{\langle m_i(\tau + t_w)m_i(t_w) \rangle}, \end{aligned} \quad (7)$$

et les corrélations croisées sont négligeables. Les $m_i(t)$ définissent des “quasi-états”, qui ont un temps de vie fini $\tau(t_w)$ étant donné que t_w est fini. Il est donc nécessaire de s'intéresser à t_w suffisamment grand pour que $\tau(t_w)$ apparaisse infini (si l'on fait une simulation numérique par exemple). Le fait que les variables $s_i(t)$ vérifient le FDT traduit que celles-ci sont quasi-équilibrées dans les quasi-états. La fonction de réponse associée aux quasi-états est

$$R_{ag}(\tau + t_w, t_w) = \frac{\delta \overline{\langle m_i(\tau + t_w) \rangle}}{\delta h_i(t_w)}, \quad (8)$$

où les quasi-états sont équilibrés à la température γ . La distribution d'équilibre correspondante en présence d'un petit champ est

$$P(\{m_i(t)\}) \propto e^{-N\gamma f_{TAP}(\{m_i(t)\}) - N\gamma m_i(t)h_i(t)}. \quad (9)$$

La violation du FDT signifie que les quasi-états vérifient une relation du type fluctuation-dissipation :

$$\chi_{ag}(\tau + t_w, t_w) = \frac{1}{T_{eff}} (q_{EA} - C_{ag}(\tau + t_w, t_w)) \quad (10)$$

Après un refroidissement rapide, les seuls états accessibles sont les états de seuil, les états plus profonds étant isolés par des barrières d'énergie infinies. La comparaison de (2), (5) et (10) suggère donc que les degrés de liberté les plus lents sont en équilibre effectif à la température $T_{eff} = \frac{1}{\gamma}$ dans les états de seuils. Ceci ne signifie pas que le système reste confiné dans un état métastable. Kurchan et Laloux [46] ont montré que le système évolue au contraire sur la frontière séparant différents bassins, c'est-à-dire sur des “canaux” reliant des états possédant des directions instables. Au fur et à mesure que le système vieillit, les frontières se séparent en frontières de frontières, par multifurcations successives [100], le nombre de directions instables et la largeur des canaux diminuant au fur et à mesure. Le quasi-équilibre de la relaxation rapide

peut donc être interprété comme un équilibrage dans les directions transverses à ces canaux. Pour quantifier cette dynamique dans les directions transverses, Cavagna et al. [101] ont étudié la dynamique au voisinage d'un col. Ils ont montré qu'à temps courts, le système semble ignorer l'existence de directions plates avant de quitter le col après un temps inversement proportionnel à la densité de directions plates. Ainsi, la croissance de la taille $\tau(t_w)$ avec le temps d'attente t_w peut être attribuée au fait que le système se déplace le long de directions "presque plates" et accède à des états de plus en plus profonds, ayant par conséquent de moins en moins de directions plates...

La conclusion du paragraphe précédent est qu'une situation complètement hors d'équilibre (où l'énergie asymptotique n'est même pas égale à l'énergie d'équilibre!) est similaire à une situation d'équilibre, pourvu qu'on s'intéresse aux bonnes échelles de temps. Pour le modèle p-spin sphérique, la discussion est simplifiée par la taille des barrières d'énergie libre qui introduisent deux échelles de temps bien séparées. Dans le cas du modèle SK, les barrières divergent moins vite que N et le système vieillit en explorant des états de plus en plus profonds, séparés par des barrières de plus en plus grandes. Ceci se traduit par l'apparition d'une infinité d'échelles de temps et d'une ultramétrie dynamique non triviale [102, 11]. De plus, les grandeurs macroscopiques asymptotiques sont celles de l'équilibre, ce qui se traduit par une correspondance entre les violations statique et dynamique du FDT.

3.2 Structures inhérentes, décomposition de Stillinger et Weber

Nous venons de voir que les états métastables jouent un rôle fondamental dans la dynamique lente des verres de spins. Étant donné l'analogie formelle entre les modèles discontinus et les verres structuraux, on peut se demander à quoi correspondent les vallées dans ces derniers. L'idée de considérer la dynamique vitreuse comme une évolution dans un paysage d'énergie très rugueux a été émise par Goldstein en 1969 [103] : au-dessus, mais près de la température de transition vitreuse, la dynamique d'un système à l'équilibre peut être décomposée en deux mécanismes, l'un étant la relaxation à l'intérieur d'un bassin, et l'autre le franchissement de barrière pour changer de bassin. L'hypothèse sous-jacente est que le temps typique de relaxation au sein des bassins est très petit devant le temps pour sauter d'un bassin à l'autre, sans quoi il n'est pas possible de séparer les deux mécanismes.

La façon la plus simple de définir des bassins est celle de Stillinger et Weber [104, 7] : les bassins sont les zones d'attraction des minima locaux de l'énergie. Le bassin d'attraction d'un minimum local est défini comme l'ensemble des configurations qui y aboutissent en effectuant une descente de gradient dans le paysage d'énergie. Ainsi partitionne-t-on l'espace des configurations en régions dont les intersections sont de mesure nulle et la fonction de partition d'un système de N particules en interaction peut s'écrire

$$Z(\beta) = \sum_{\alpha} e^{-N\beta\Phi_{\alpha}} \int_{R_{\alpha}} d^{3N} \mathbf{r} e^{-N\beta\Delta\Phi(\mathbf{r})}, \quad (11)$$

où les α indexent les différents minima et $\Delta\Phi(\mathbf{r})$ est la différence d'énergie entre la

configuration $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{3N}$ et le minimum local correspondant.

Introduisant $\Omega(e) = \sum_{\alpha} \delta(e - \Phi_{\alpha})$, $\Omega(e)$ croît exponentiellement avec le nombre de particules : $\Omega(e) \equiv e^{Ns_c(e)}$, et

$$Z \sim \int de e^{Ns_c(e) - N\beta e - N\beta f_{IS}(\beta, e)}, \quad (12)$$

où $f_{IS}(\beta, e)$ est l'énergie libre typique d'un bassin ayant un minimum d'énergie e [104, 7]. La quantité $s_c(e)$ est l'entropie associée à l'existence d'un nombre exponentiel de bassins d'énergie e . Sciortino et al. [105] ont calculé numériquement la différence entre l'entropie de la phase liquide et celle de la phase vitreuse d'un mélange binaire de particules interagissant via un potentiel de Lennard-Jones, en utilisant le fait que l'énergie libre dans la phase liquide est donnée par (12). Leur résultat est que l'entropie configurationnelle² est égale à $s_c(e_{IS}(T))$, où $e_{IS}(T)$ est l'énergie typique des structures inhérentes visitées à température T . C'est ce qu'on s'attend à obtenir si la dynamique au sein des bassins est bien séparée de la dynamique de saut entre bassins ; en effet, dans ce cas, la différence entre le liquide et le solide est la possibilité de passer d'un bassin à l'autre, et donc la différence d'entropie est donnée par la dégénérescence des bassins typiques. Il existe de nombreux travaux à propos de l'importance des structures inhérentes pour la thermodynamique des liquides surfondus, et autant d'études des points stationnaires de l'énergie. En particulier, certains auteurs inspirés par l'image de la transition dynamique dans les verres de spins discontinus interprètent la température du couplage de mode T_{MC} comme la température à laquelle l'index typique des cols (c'est-à-dire le nombre de directions instables) s'annule.

La théorie des structures inhérentes a été testée sur de nombreux systèmes [53, 105, 106, 107, 108, 109, 54, 110]. Elle a été en particulier testée sur un modèle de verre de spins discontinu, le modèle orthogonal aléatoire (ROM) par Crisanti et Ritort [106, 107]. Par des simulations numériques, ils ont montré que la température effective est donnée (dans la limite des précisions numériques) par les structures inhérentes. Ce point sera discuté ultérieurement.

4 Calcul de l'entropie configurationnelle

Dans les chapitres suivants, il sera question de systèmes pour lesquels les minima locaux de l'énergie ont un rôle essentiel, ainsi que l'entropie configurationnelle. Le calcul analytique de cette entropie est simple pour des systèmes unidimensionnels [111, 112, 113], mais est souvent difficile, voire impossible dans d'autres cas. La fin de ce chapitre sera donc destinée à montrer comment calculer celle-ci pour divers systèmes, en insistant sur le cas des verres de spins sur des graphes aléatoires, le calcul de la complexité des configurations métastables³ pour des verres de spins

²Dès lors que l'entropie configurationnelle est associée aux structures inhérentes, le terme "entropie configurationnelle" sera utilisé pour désigner la complexité des états 1-métastables dans la suite.

³Pour utiliser la terminologie courante, le terme métastable sera utilisé à la place de 1-métastable.

sur des graphes aléatoires ayant constitué le début du travail de thèse. Le modèle étudié possède une distribution de couplages bimodale non symétrique : $\mathbb{P}(J_{ij}) = \alpha\delta(1 + J_{ij}) + (1 - \alpha)\delta(1 - J_{ij})$, où $\alpha \in [0, 1/2]$. Sauf mention contraire, les systèmes auront toujours pour connectivité $c = 3$, pour laquelle certains calculs peuvent être traités analytiquement [114, 115]. Avant de calculer l'entropie configurationnelle, rappelons que les états métastables sont ceux que l'on ne peut quitter par une dynamique de Metropolis à $T = 0$. Ceci se traduit par la contrainte suivante :

$$\forall i, \Delta E_i = s_i \sum_j J_{ij} s_j > 0. \quad (13)$$

En d'autres termes, chaque spin est orienté dans le sens de son champ local. Dans la suite, cette contrainte sera relaxée, et une configuration sera métastable si tous les ΔE_i sont positifs ou nuls. Lorsque la connectivité est impaire, cela n'a pas d'effet ; par contre, l'effet est d'augmenter l'entropie configurationnelle pour les connectivités paires.

Le nombre d'états métastables d'énergie E est donc

$$\mathcal{N}_{MS}(E) = \text{Tr} \delta \left(E + \sum_{i < j} n_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) \prod_i \theta \left(\sum_{j \neq i} n_{ij} J_{ij} s_i s_j \right). \quad (14)$$

Tout comme la fonction de partition canonique, le nombre d'états métastables d'énergie E n'est pas auto-moyennant ; par contre l'entropie configurationnelle l'est. À la limite thermodynamique, celle-ci est donnée par

$$s_c(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln(\mathcal{N}_{MS}(E))}, \quad (15)$$

dont l'approximation recuite est

$$s_a(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left(\overline{\mathcal{N}_{MS}(E)} \right). \quad (16)$$

La convexité du logarithme implique que $s_a(E)$ donne une borne supérieure de $s_c(E)$. Cependant, pour les modèles de verres de spins pour lesquels une comparaison détaillée de $s_c(E)$ et $s_a(E)$ a été effectuée, ces dernières coïncident sur la gamme de haute énergie [116, 117]. En particulier, elles atteignent leur maximum à une énergie appartenant à cette région de coïncidence (cf. figure (II.3) pour une illustration). Ceci se traduit par $\ln(\overline{\mathcal{N}_{MS}}) = \overline{\ln(\mathcal{N}_{MS})}$, c'est-à-dire, le nombre total d'états métastables est auto-moyennant.

4.1 Calcul numérique

Il existe plusieurs méthodes pour échantillonner les états métastables d'un système de spins. Chacune ont leurs avantages et inconvénients, que nous allons décrire.

a) Par énumération exacte

La méthode la plus naïve consiste à énumérer toutes les configurations et à regarder lesquelles sont métastables. Pour un système de spins d'Ising, pour lequel

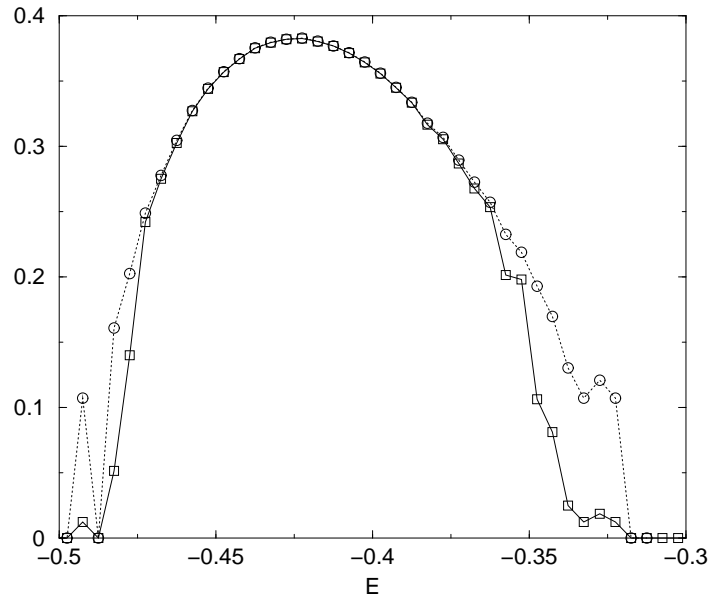


FIG. II.1 – Comparaison entre les entropies configurationnelles recuite (cercles) et gelée (carrés) obtenues par énumérations pour 32 réalisations du ROM avec $N = 30$ spins [118].

les degrés de libertés ont le nombre le plus petit possibles de valeurs (à savoir ± 1), cette méthode est très vite limitée par la taille du système, dont le maximum est autour de 35, si l’on doit moyenner sur du désordre gelé. Cependant, pour des systèmes infiniment connectés comme le ROM ou le modèle SK, on obtient déjà à de telles tailles une assez bonne précision sur la valeur de l’entropie configurationnelle pour N infini à partir de l’extrapolation de la variation de $\ln \mathcal{N}_{MS}$ avec N (N fini).

L’inconvénient majeur de cette méthode est qu’elle ne marche que dans un nombre limité de cas simples et ne peut donc pas être génériquement utilisée. Un avantage est qu’aux tailles accessibles, il est possible de calculer à la fois les moyennes recuite et gelée de l’entropie configurationnelle. Sur la figure (II.1), l’entropie configurationnelle calculée pour le ROM est montrée.

b) Par l’approche des structures inhérentes

Une méthode un peu moins naïve consiste à obtenir des états métastables en effectuant des trempes à $T = 0$, en partant soit d’une température infinie (configuration aléatoire) soit d’une température finie [107]. Si la dynamique locale de température nulle n’autorise pas de mouvements sans variation d’énergie, et que les changements d’énergie sont “quantifiés”, celle-ci est condamnée à s’arrêter au bout d’un temps fini, dans un état métastable, par définition. Cependant, avec une telle méthode, il est nécessaire d’examiner avec soin les poids relatifs des états obtenus en itérant le processus un grand nombre de fois.

Considérons un système équilibré à une température $T > 0$, puis trempé à

température nulle. La probabilité d'obtenir un état métastable d'énergie E est

$$P_N(E, T) = \frac{e^{Ns_c(E) - N\beta f_{IS}(E, T)}}{Z_N(T)}. \quad (17)$$

On peut ainsi obtenir l'entropie configurationnelle :

$$s_c(E) = \frac{\ln Z_N(T)}{N} + \beta f_{IS}(E, T) + \frac{\ln P_N(E, T)}{N}. \quad (18)$$

L'hypothèse fondamentale de la théorie des structures inhérentes est que les bassins d'attraction des états métastables sont très similaires, dans le sens que l'énergie libre $f_{IS}(E, T)$ dépend très peu de E . Ainsi, si l'on trace $\frac{\ln P_N(E, T)}{N}$ en fonction de E et pour diverses températures, on obtient des courbes qui sont superposables et qui donnent l'entropie configurationnelle à une constante additive près. Cependant, cette méthode, qui est assez rapide au niveau du temps de calcul a plusieurs inconvénients importants :

- elle ne donne l'entropie configurationnelle qu'à une constante additive près ;
- les états métastables obtenus après une trempe depuis l'équilibre à la température T ont une énergie moyenne inférieure à l'énergie d'équilibre $E_{eq}(T)$, et donc si l'on effectue la trempe depuis une température basse, les états métastables d'énergie haute sont perdus⁴. En particulier, l'énergie maximale $E_f(T)$ des états métastables ainsi obtenus vérifie $E_f(T) < E_{eq}(T)$;
- l'hypothèse selon laquelle l'énergie libre des bassins dépend très peu de la température n'est plus valable dès que l'énergie est suffisamment élevée, et d'autant plus que la température d'équilibration est élevée. Ceci constitue également une limitation de la gamme d'énergie obtenue.

Cette méthode permet donc d'explorer raisonnablement bien les états métastables de basse énergie, mais une méthode systématique doit être utilisée si l'on souhaite s'affranchir d'une approximation incontrôlée telle que celle faite ici.

c) Par l'introduction d'un modèle auxiliaire

Cette méthode, introduite par Barrat et al. afin d'échantillonner de façon uniforme les configurations bloquées pour des modèles de particules à répulsion de cœur dur se déplaçant sur un réseau, est basée sur l'utilisation d'un modèle auxiliaire qui interpole entre l'absence de contraintes locales de métastabilité et la présence de ces contraintes. Si l'on se place à densité constante, on définit un hamiltonien auxiliaire $\mathcal{H}_{aux} = \sum_{i=1}^N \theta_i$, où θ_i prend respectivement la valeur 0 ou 1 si la particule i peut bouger ou non. L'énergie auxiliaire représente donc le nombre de particules qui peuvent bouger et la "température auxiliaire" β_{aux} en est la température conjuguée. Les états bloqués sont donc les états fondamentaux du modèle auxiliaire. Si l'on sait équilibrer à nombre de particules fixés le modèle auxiliaire pour de valeurs grandes de β_{aux} , on obtient l'entropie configurationnelle par intégration :

$$s_c(\rho) = \lim_{\beta_{aux} \rightarrow \infty} \left\{ s_{eq}(\rho) - \int_0^{\beta_{aux}} d\beta'_{aux} e_{aux}(\beta'_{aux}, \rho) + \beta_{aux} e_{aux}(\beta_{aux}, \rho) \right\}, \quad (19)$$

⁴En pratique, la température n'est pas trop basse, puisque le système doit quand même être à l'équilibre.

où s_{eq} est l'entropie d'équilibre et $e_{aux} = \langle \frac{1}{N} \sum_i \theta_i \rangle$. Le dernier terme de (19) étant nul par construction, on obtient

$$s_c(\rho) = s_{eq}(\rho) - \int_0^\infty d\beta_{aux} e_{aux}(\beta_{aux}, \rho). \quad (20)$$

Dans l'ensemble canonique, il faut opérer un peu différemment. Supposons que nous disposons d'un système discret⁵ possédant un hamiltonien \mathcal{H} , N variables dynamiques et une dynamique locale contenant des états bloqués, c'est-à-dire des configurations qui ne peuvent pas évoluer si la dynamique est purement relaxationnelle. L'hamiltonien auxiliaire est défini de la façon suivante :

$$\mathcal{H}_{aux} = \frac{\beta}{\beta_{aux}} \mathcal{H} + \sum_{i=1}^N \theta_i, \quad (21)$$

où θ_i prend respectivement la valeur 0 ou 1 si la variable i peut changer d'état ou non lors de la dynamique relaxationnelle. Dans le cas d'un verre de spins d'Ising, $\theta_i = \theta(s_i h_i)$, où h_i est le champ local agissant sur le spin s_i . On peut a priori calculer l'énergie moyenne des états métastables dans l'ensemble canonique à température β de n'importe quel système. L'équation (20) n'est plus utilisable du fait que l'hamiltonien auxiliaire contient deux parties dont une n'est pas conjuguée à β_{aux} . On peut cependant obtenir l'entropie après avoir calculé l'énergie $e(\beta) = \frac{1}{N} \lim_{\beta_{aux} \rightarrow \infty} \langle \mathcal{H}_{aux} \rangle$.

En pratique (que l'on soit dans l'ensemble canonique ou microcanonique), on peut utiliser un recuit simulé pour minimiser l'énergie tout en ayant suffisamment de temps pour équilibrer le système à température T : le système est équilibré à $T_{aux} = \frac{1}{\beta_{aux}} = \infty$, puis T_{aux} est diminuée progressivement avec un taux de refroidissement suffisant pour que le système retrouve l'équilibre après chaque saut, jusqu'à $T_{aux} = 0$. Cette méthode a le mérite d'être fiable et systématique. Si l'on utilise une dynamique de Monte Carlo, le bilan détaillé est vérifié pour toutes les valeurs non nulles de β_{aux} , donc cette méthode permet de simuler l'hamiltonien auxiliaire avec la précision des simulations Monte Carlo usuelles. De plus, il est possible dans certains cas d'utiliser des méthodes de Monte Carlo non locales comme des algorithmes d'amas. Remarquons que pour des systèmes de taille finie, et pour chaque réalisation de l'algorithme, le nombre de variables mobiles s'annule à une valeur faible mais non nulle de T_{aux} , ce qui signifie qu'en moyenne e_{aux} tend exponentiellement vite vers 0 avec β_{aux} , et donc le dernier terme de (19) est bien nul. Lorsque β_{aux} est grand, le système reste piégé dans des régions très petites ; il est donc essentiel de faire varier β_{aux} suffisamment lentement afin de ne pas perdre la limite $\beta_{aux} \rightarrow \infty$ en tombant trop tôt dans un état métastable. Cependant, même pour un taux de refroidissement très lent et une grande taille de système, l'approche de $e_{aux} \ll 1$ peut apporter une légère chute de l'énergie, et donc une erreur négative systématique. Pour pallier à ce problème, l'énergie $e(\beta)|_{\beta_{aux}=\infty}$ est mesurée de deux façons différentes :

⁵La méthode est utilisable pour des systèmes continus. Dans ce cas, il est nécessaire de définir un seuil de blocage, par exemple la distance maximale que peut parcourir une particule très peu mobile, considérée alors comme bloquée.

- en arrêtant les simulations dès $e_{aux} = \frac{1}{N}$, puis en extrapolant la moyenne des courbes d'énergie e_{aux} à $\beta_{aux} \rightarrow \infty$;
- en arrêtant les simulations dès $e_{aux} = 0$ et en mesurant l'énergie moyenne de l'état métastable obtenu.

Le calcul est considéré comme bon à partir du moment où les deux résultats obtenus sont suffisamment proches.

Dans le cas présent, l'énergie $E(\beta)$ et l'aimantation $m(\beta)$ des états métastables ont été obtenues en moyennant sur 25 configurations initiales pour des systèmes comportant $N = 10^5$ spins. La complexité $s_c(E)$ a ensuite été calculée par intégration de $\beta(E)$, la constante d'intégration ayant été déterminée en imposant la valeur particulière $s_c|_{\beta=0} = \frac{1}{2} \ln \frac{8}{5}$, qui est la valeur obtenue par le calcul analytique [119, 114].

4.2 Calcul analytique

Le calcul analytique de la complexité peut être effectué à l'aide de la méthode des répliques.

Nous allons calculer $\overline{Z_{MS}(\beta)^n}$ en répliquant le système n fois et en utilisant une représentation intégrale de la fonction θ :

$$\theta(x) = \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\mu}{2i\pi\mu} e^{\mu x}, \quad (22)$$

ce qui donne⁶ :

$$\begin{aligned} \overline{Z_{MS}(\beta)^n} &= \frac{1}{\mathcal{N}(p, c)} \sum_{s_i^a} \int \frac{d\lambda_i}{2i\pi} \int \frac{d\mu_i^a}{2i\pi\mu_i^a} e^{-c \sum_i \lambda_i - \frac{Np}{2}} \\ &\exp \left(\frac{p}{2N} \sum_{i \neq j} \mathbb{E} \left[e^{\lambda_i + \lambda_j + J \sum_a (\mu_i^a + \mu_j^a + \beta) s_i^a s_j^a} \right] \right), \end{aligned} \quad (23)$$

où $\mathcal{N}(p, c) \sim e^{N[\frac{c}{2}(\ln c + \ln p - 1) - \frac{p}{2} - \ln(c!)]}$ est le nombre total moyen de graphes de connectivité c construits à partir de graphes de connectivité fluctuante de moyenne p . Introduisons

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathcal{D}q(\mu^a, s^a) \delta(Nq(\mu^a, s^a) - \sqrt{\frac{p}{c}} \sum_i e^{\lambda_i} \prod_a \mu_i^a \delta(\mu^a - \mu_i^a) \delta_{s^a, s_i^a}) \\ &= \int \mathcal{D}q(\mu^a, s^a) \int \mathcal{D}\hat{q}(\mu^a, s^a) \\ &\exp \left[N \sum_{s^a} \int d\mu^a q(\mu^a, s^a) \hat{q}(\mu^a, s^a) - \sqrt{\frac{p}{c}} \sum_i \hat{q}(\mu_i^a, s_i^a) e^{\lambda_i} \prod_a \mu_i^a \right], \end{aligned} \quad (24)$$

et remplaçons \hat{q} par sa valeur au point col. Après quelques calculs, on arrive à

$$\overline{Z_{MS}(\beta)^n} = \int \mathcal{D}q(\mu^a, s^a) e^{NS[q]}, \quad (25)$$

⁶Les paramètres λ_i fixent la contrainte sur le nombre de voisins de chaque site, et ne sont donc pas répliqués.

avec

$$S[q] = -\frac{c}{2} \log \left[\sum_{s^a, s'^a} \int \frac{d\mu^a}{\mu^a} \frac{d\mu'^a}{\mu'^a} q(\mu^a, s^a) q(\mu'^a, s'^a) \mathbb{E} \left[e^{\sum_a J(\mu^a + \mu'^a + \beta) s^a s'^a} \right] \right] \\ + (c-1) \log \left[\sum_{s^a} \int \frac{d\mu^a}{\mu^a} q(\mu^a, s^a)^{\frac{c}{c-1}} \right]. \quad (26)$$

À la limite $N \rightarrow \infty$, le paramètre d'ordre fonctionnel vérifie⁷

$$q(\underline{\mu}, \underline{s}) = \frac{1}{Z} \left(\sum_{\underline{s}'} \int \frac{d\mu'^a}{\mu'^a} q(\underline{\mu}', \underline{s}') \mathbb{E} \left[e^{\sum_a J(\mu^a + \mu'^a + \beta) s^a s'^a} \right] \right)^{c-1}, \quad (27)$$

où Z est une constante de normalisation.

a) Approximation recuite

À ce stade, le calcul recuit exposé dans les publications 1 et 5 est obtenu facilement en factorisant $q(\underline{\mu}, \underline{s})$:

$$q(\underline{\mu}, \underline{s}) = \prod_a (Q_1(\mu^a) + s^a Q_2(\mu^a)) \quad (28)$$

En posant ensuite $Z_i^\pm = \int \frac{d\mu}{2i\pi\mu} Q_i(\mu) e^{\pm(\frac{\beta}{2} + \mu)}$, on obtient l'action recuite, qui ne porte plus que sur 4 paramètres. L'avantage de ce calcul recuit est qu'il permet d'éliminer la température au profit de l'énergie et donc donne accès à l'ensemble microcanonique.

b) Calcul RS

I. PREMIÈRE MÉTHODE

Comme nous l'avons vu au cours du précédent chapitre, la forme des solutions générales respectant ou brisant la symétrie des répliques est simplifiée par la présence de variables d'Ising dans le paramètre d'ordre. Ici, ce n'est pas le cas, et nous introduisons donc

$$p(\underline{s}, \underline{t}) = \mathbb{E} \left[\int \frac{d\mu^a}{\mu^a} q(\underline{\mu}, \underline{s}) e^{\sum_a (\mu^a + \frac{\beta}{2}) J s^a t^a} \right], \quad (29)$$

où $\underline{t} \in \{-1; 1\}^n$. L'équation (27) devient alors

$$p(\underline{s}, \underline{t}) = \mathbb{E} [\Gamma(\underline{s}, \underline{t})], \quad (30)$$

⁷Remarquons que $S[q]$ ne dépend plus de p , ce qui est normal, étant donné que l'usage de graphes à connectivité fluctuante n'étant qu'un élargissement intermédiaire de l'ensemble des graphes possibles, plus commode pour fabriquer les graphes à connectivité c . Cependant, cette indépendance de p indique que le passage par cet ensemble intermédiaire ne change pas les poids respectifs des graphes ainsi construits.

avec

$$\Gamma(\underline{s}, \underline{t}) = \sum_{\underline{t}_1, \dots, \underline{t}_k} \prod_{l=1}^k p(\underline{t}_l, \underline{s}) \exp\left(\frac{1}{2\beta} \sum_{l=1}^k J_l \underline{t}_l \cdot \underline{s}\right) \prod_a \theta\left(s^a (Jt^a + \sum_{l=1}^k J_l t_l^a)\right). \quad (31)$$

La forme RS peut être écrite [120]

$$p(\underline{s}, \underline{t}) = \int dx dy dz P(x, y, z) \exp\left(\beta x \sum_a s^a + \beta y \sum_a s^a t^a + \beta z \sum_a t^a\right), \quad (32)$$

où $P(x, y, z)$ vérifie

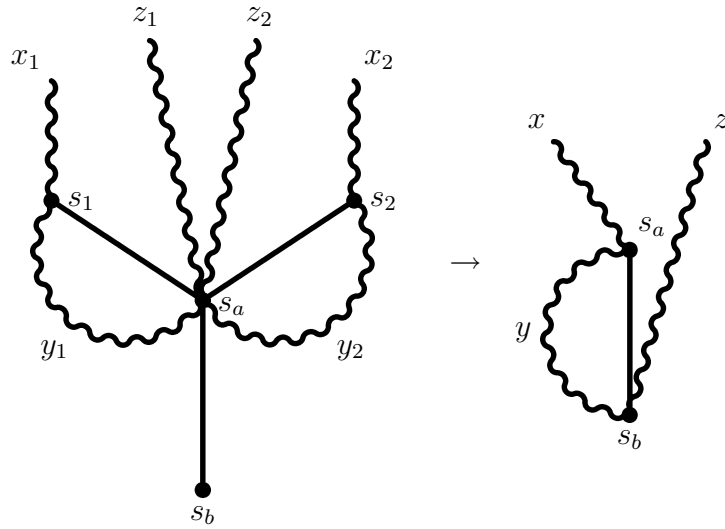
$$\begin{aligned} P(x, y, z) &= \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l dz_l P(x_l, y_l, z_l) \mathbb{E} \left[\delta\left(x - \frac{1}{4\beta} \ln\left(\frac{E_{++}E_{+-}}{E_{-+}E_{--}}\right)\right) \right. \\ &\quad \left. \delta\left(y - \frac{1}{4\beta} \ln\left(\frac{E_{++}E_{--}}{E_{-+}E_{+-}}\right)\right) \delta\left(z - \frac{1}{4\beta} \ln\left(\frac{E_{++}E_{-+}}{E_{+-}E_{--}}\right)\right) \right], \quad (33) \\ E_{\sigma\tau} &= \sum_{\rho_1, \dots, \rho_k = \pm 1} \theta(\sigma(J\tau + \sum_{l=1}^k J_l \rho_l)) e^{\beta \sum_l (x_l \rho_l + \sigma y_l \rho_l + z_l \sigma) + \frac{\beta}{2} \sigma (J\tau + \sum_l J_l \rho_l)}. \end{aligned}$$

Ces équations peuvent être résolues par une dynamique de population simple (cf. statique RS) et la densité d'énergie et d'énergie libre des états métastables sont [120]

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \int \prod_{l=1}^c (dx_l dy_l dz_l P(x_l, y_l, z_l)) \\ &\mathbb{E} \left[\frac{\text{Tr}(s \sum_l J_l s_l) \exp\left\{\beta \sum_l x_l s_l + \beta \sum_l y_l s_l s + \beta \sum_l z_l s + \frac{\beta}{2} s \sum_l J_l s_l\right\} \theta(s \sum_l J_l s_l)}{2 \text{Tr} \exp\left\{\beta \sum_l x_l s_l + \beta \sum_l y_l s_l s + \beta \sum_l z_l s + \frac{\beta}{2} s \sum_l J_l s_l\right\} \theta(s \sum_l J_l s_l)} \right], \\ -\beta f(\beta) &= -c/2 \int \prod_{l=1}^2 (dx_l dy_l dz_l P(x_l, y_l, z_l)) \\ &\ln\left(e^{\beta(y_1+y_2)} \cosh(\beta(x_1+z_1+x_2+z_2)) + e^{-\beta(y_1+y_2)} \cosh(\beta(x_1-z_1-x_2+z_2))\right) \\ &+ \int \prod_{l=1}^c (dx_l dy_l dz_l P(x_l, y_l, z_l)) \mathbb{E} \left[\ln\left(\text{Tr} \theta\left(s \sum_l J_l s_l\right)\right) \right. \\ &\quad \left. \exp\left(\beta \sum_l x_l s_l + \beta \sum_l y_l s_l s + \beta \sum_l z_l s + \frac{\beta}{2} s \sum_l J_l s_l\right)\right] \end{aligned}$$

La brisure de symétrie des répliques s'effectue ensuite exactement comme pour le calcul de la fonction de partition.

L'équation de point fixe (33) et les grandeurs thermodynamiques peuvent être obtenues à partir de la méthode de la cavité. En effet, l'itération de la cavité est un peu plus subtile ici que pour la statique, étant donné qu'il n'est plus possible d'ajouter un site comme sur la figure (I.4), étant donné que la contrainte de métastabilité


 FIG. II.2 – Itération de la méthode de la cavité à plusieurs niveaux pour $c = 3$.

fait intervenir tous les voisins. Considérons donc deux sites a et b , b n'interagissant qu'avec a , et a interagissant avec k autres voisins. La distribution jointe de s_a et s_b est obtenue en faisant la sommation sur les voisins de a , comme indiqué sur la figure (II.2). Sa forme la plus générale est

$$p(s_a, s_b) \propto e^{\beta(x s_a + y s_a s_b + z s_b)}. \quad (34)$$

Si l'on la calcule en sommant sur les spins voisins de a différents de b : $p(s_a, s_b) \propto E_{s_a, s_b}$ où E_{s_a, s_b} est défini dans (33)⁸. On peut ensuite exprimer x, y et z en remarquant :

$$\begin{aligned} \exp(4\beta x) &= \frac{E_{++} E_{+-}}{E_{-+} E_{--}}, \\ \exp(4\beta y) &= \frac{E_{++} E_{--}}{E_{+-} E_{-+}}, \\ \exp(4\beta z) &= \frac{E_{++} E_{-+}}{E_{+-} E_{--}}. \end{aligned} \quad (35)$$

II. DEUXIÈME MÉTHODE

Une autre stratégie possible est l'introduction du champ de cavité agissant sur le spin s^a en écrivant

$$q(\underline{\mu}, \underline{s}) = \int dh^a p(\underline{h}, \underline{s}) e^{\sum_a h^a \mu^a s^a}. \quad (36)$$

⁸Remarquons que le terme $\frac{\beta}{2}(s_a s_b + s_a \sum_l s_l)$ peut être absorbé par une translation sur x et y . Ici, son intérêt est de montrer le lien avec la méthode des répliques.

L'équation (27) devient dans ce cas

$$p(\underline{h}, \underline{s}) = \frac{e^{\beta \sum_a h^a s^a}}{Z} \sum_{\underline{s}_1, \dots, \underline{s}_k} \int \prod_{l=1}^k (dh_l^a p(\underline{h}_l, \underline{s}_l)) \quad (37)$$

$$\mathbb{E} \left[\prod_a \left(\delta \left(h^a - \sum_l J_l s_l^a \right) \prod_l \theta(s_l^a (h_l^a + J_l s^a)) \right) \right].$$

La solution RS a pour forme $p(\underline{h}, \underline{s}) = \int \mathcal{D}\rho \mathcal{P}(\rho) \prod_a \rho(h^a, s^a)$ où $\mathcal{P}(\rho)$ vérifie donc une équation du type (20), avec $\rho(\{\rho_i\}, \{J_i\})(h, s)$ donné par

$$\rho(\{\rho_i\}, \{J_i\})(h, s) = \frac{e^{\beta h s}}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_k} \int \prod_{i=1}^k [dh_i \rho_i(h_i, s_i) \theta(s_i (s J_i + h_i))] \quad (38)$$

$$\times \delta \left(h - \sum_i J_i s_i \right).$$

Cette équation, a la structure d'une équation 1RSB, avec $m = 1$, alors que la solution RS (non recuite) correspond plutôt à $m \rightarrow 0$. La différence avec le calcul de la statique est que dans les états métastables, comme dans les équations TAP, les structures élémentaires ne sont plus les configurations, mais les états. Ainsi, étudier la façon dont le champ local fluctue de site à site au sein d'un seul état n'a pas de sens ici, puisque chaque état est réduit à une seule configuration. En d'autres termes, le calcul RS de la fonction de partition des états métastables a formellement la même structure que le calcul 1RSB de la fonction de partition statique. Ceci est à rapprocher du fait que dans le modèle p-spin, pour lequel la solution est 1RSB, la complexité est donnée par un calcul RS [95]. De plus, si l'on suppose que le système est homogène, ce qui est vrai au niveau statique RS, et donc que $\rho = \rho_i, \forall i$, on obtient les équations de col recuites.

Cette remarque donne un moyen de traiter (38) par une dynamique de population simple, dans lesquels les objets élémentaires ne sont plus les champs de cavité, mais la distribution jointe $p(h, s)$ [121]. Dans le cas de couplages ± 1 , la résolution est facilitée par le fait que les champs h_i sont tous entiers, de sorte que $p(h, s)$ est décrit par un nombre fini de paramètres.

L'équation (38) peut être également obtenue à l'aide de la méthode de la cavité [121]. Elle a pour avantage sur (33) de montrer de façon plus claire le lien entre le calcul 1RSB de la statique et le calcul RS de $s_c(\beta)$. Par contre elle peut s'avérer plus lourde numériquement, par exemple si les couplages sont Gaussiens. Dans ce cas il est nécessaire de discrétiser convenablement $p(h, s)$, ce qui n'est pas le cas pour (33).

5 Discussion des résultats

5.1 Comparaison entre les approximations

Le calcul de $s_c(E)$, pour un système de connectivité 3, obtenu par les méthodes exposées dans les paragraphes précédents, est montré sur la figure (II.3) pour $\alpha =$

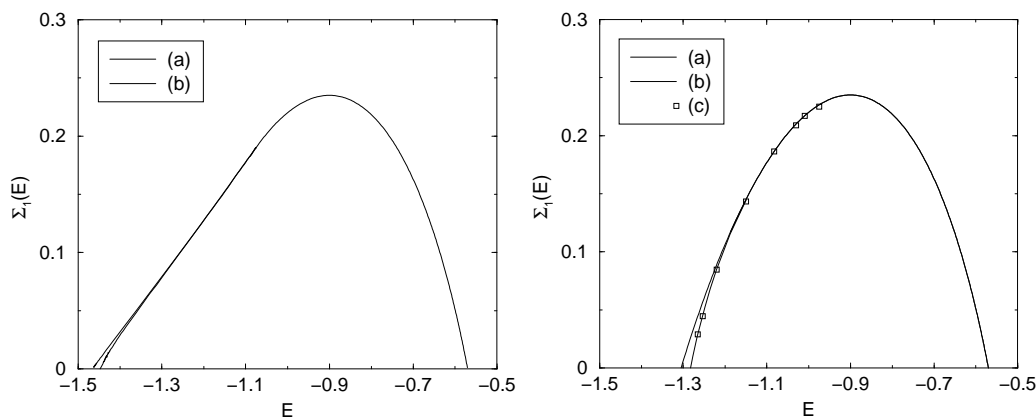


FIG. II.3 – Complexité des états métastables en fonction de l'énergie par spin, pour $c = 3$ et pour $\alpha = 0.02$ (à gauche) et $\alpha = 0.5$ (à droite) : calcul recuit (a), RS (b), simulations Monte Carlo (c)

0.02 et $\alpha = 0.5$. Pour le cas purement ferromagnétique ($\alpha = 0$), la symétrie des répliques n'est pas brisée et le calcul recuit de $s_c(E)$ est donc exact. Dès que α est non nul, il existe des boucles frustrées et un nombre exponentiel d'états purs apparaît ; le calcul recuit est donc de moins en moins bon au fur et à mesure que α s'éloigne de 0, le pire cas étant à $\alpha = 0.5$. Comme on le voit sur la figure (II.3), le calcul recuit ne s'éloigne qu'à basse énergie du calcul obtenu par les simulations Monte Carlo, et le calcul RS n'en est pas distinguable dans les barres d'erreur. Il est possible de faire le calcul 1RSB ; la différence avec le calcul RS est à peine décelable dans l'ensemble canonique (c'est-à-dire pour un β donné) et invisible dans l'ensemble microcanonique [121].

Remarquons cependant que le calcul recuit demeure bon à assez haute énergie. La convexité du logarithme implique que cette approximation fournit une borne supérieure de $s_c(E)$. Bray et Moore ont effectué ce calcul recuit pour le modèle SK [116, 117] et ont montré que l'approximation recuite est exacte au-dessus d'une certaine énergie $E_{RSB} \simeq -0.672$. Dans le cas présent, le calcul recuit est exact uniquement pour $E > E_F = -\frac{15}{14}$, indépendamment de α , sauf pour $\alpha = 0$, où il est toujours exact.

De plus, le nombre d'états métastables étant régulièrement attribué au niveau de frustration du système, il est intrigant de constater ici que, autour de son maximum, l'entropie configurationnelle ne dépend pas de α , et qu'en particulier le modèle symétrique $\alpha = \frac{1}{2}$ a autant d'états métastables que le modèle ferromagnétique $\alpha = 0$. Pour un graphe donné, le nombre total d'états métastables (moyenné sur les couplages) est

$$\mathbb{E}[\mathcal{N}_{MS}] = \mathbb{E} \left[\text{Tr} \prod_i \theta \left(\sum_{j \neq i} n_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) \right]. \quad (39)$$

Dans le cas du modèle symétrique, les spins peuvent être éliminés par une transformation de jauge $J_{ij} \rightarrow J_{ij} s_i s_j$, et les couplages aléatoires J_{ij} sont les seules variables

dynamiques en jeu :

$$\mathbb{E} \left[\mathcal{N}_{MS}^{(\alpha=0.5)} \right] = 2^N \mathbb{E} \left[\prod_i \theta \left(\sum_{j \neq i} n_{ij} J_{ij} \right) \right]. \quad (40)$$

Dans le cas ferromagnétique, les spins ne peuvent pas être éliminés :

$$\mathbb{E} \left[\mathcal{N}_{MS}^{(\alpha=0)} \right] = \mathbb{E} \left[\text{Tr} \prod_i \theta \left(\sum_{j \neq i} n_{ij} s_i s_j \right) \right]. \quad (41)$$

Dans ce cas, les $\frac{N(N-1)}{2}$ variables dynamiques $s_i s_j$ ne sont pas indépendantes, et leurs produit autour de chaque boucle est 1. Le fait que les moyennes sur les graphes de (40) et (41) coïncident montre que les boucles ne jouent pas de rôle pour la majorité des états métastables. Or ces boucles sont la seule source de frustration, ce qui signifie que la majorité des états métastables sont présents grâce à l'absence de frustration !

5.2 Discussion de la complexité

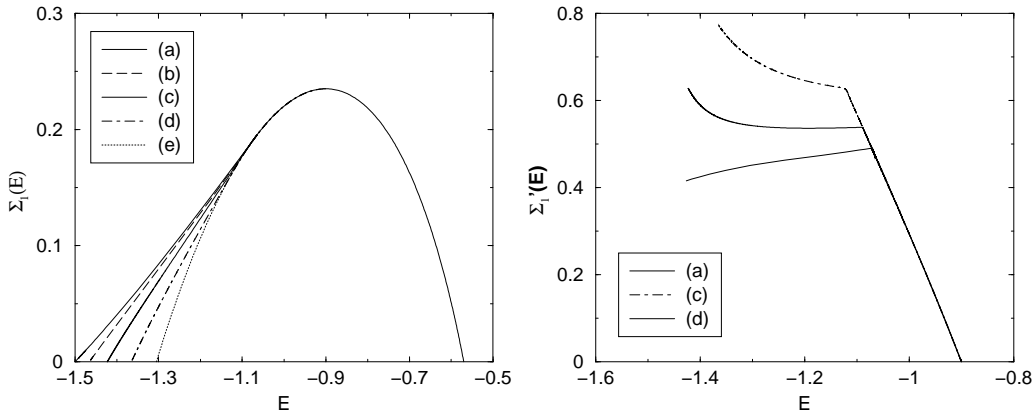


FIG. II.4 – Complexité recuite des états métastables en fonction de l'énergie pour diverses valeurs de α (à gauche) et sa dérivée (à droite) : $\alpha = 0$ (a), $\alpha = 0.02$ (b), $\alpha = 0.05$ (c), $\alpha = 0.1$ (d), $\alpha = 0.5$ (e).

Sur la figure (II.4), le calcul recuit (et sa dérivée) pour plusieurs valeurs de α et $c = 3$ est exposé. Sur une bande d'énergie comprise entre E_F et $E_{MAX} = -\frac{1}{2}$, toutes ces courbes sont identiques. De plus, si la courbe de $s_a(E)$ est concave pour $E \in [E_F, E_{MAX}]$ pour tout α , on peut distinguer plusieurs comportements à basse énergie, selon la valeur de α :

- $\alpha = 0$: $s_a(E)$ est concave en dessous E_F , et pour $E < E_F$, l'aimantation $m(E)$ est non nulle ;
- $\alpha < \alpha_c \simeq 0.07$: $s_a(E)$ est concave pour $E \in [E_1(\alpha), E^*(\alpha)]$ et convexe pour $E < E^*(\alpha) < E_F$. De plus les états métastables sont aimantés en-dessous de $E^*(\alpha)$;

- $\alpha_c < \alpha < \frac{1}{2}$: $s_a(E)$ est toujours concave, et les états métastables sont aimantés en-dessous de $E^*(\alpha) < E_F$.

Le calcul recuit ne donne qu'une borne supérieure de la complexité. Cependant, celle-ci décrit bien d'un point de vue qualitatif l'existence de comportements différents de la complexité pour des valeurs différentes de α . Les méthodes plus précises comme l'approximation RS ou le calcul numérique permettent d'obtenir une description quantitativement bonne des états métastables typiques. En particulier, α_c demeure, mais sa valeur est estimée à $\alpha_c \approx 0,009$; la valeur de $E^*(\alpha)$ est plus élevée que celle obtenue par l'approximation recuite.

Deuxième partie

États métastables dans les milieux granulaires

MAIS, POURQUOI
AVOIR APPELÉ
ÇA "TAPER" ?



Chapitre III

Rôle des états métastables dans les milieux granulaires

Comme cela a été évoqué dans les chapitres précédents, le rôle des états métastables dans les systèmes vitreux est très difficile à appréhender quantitativement. Il existe des systèmes dans lesquels la température ne joue pas de rôle prépondérant et pour lesquels les états métastables sont définis de façon simple. Les milieux granulaires en constituent un exemple type.

1 Introduction aux milieux granulaires

1.1 Milieux granulaires secs

On entend en général par “milieu granulaire” un ensemble de particules de taille macroscopique, les “grains”, dont la masse est suffisamment grande pour que ceux-ci ne ressentent pas l’agitation thermique ; au contraire, l’attraction gravitationnelle devient la force prépondérante. Par exemple, pour des grains de sable de rayon a à température ambiante, l’énergie nécessaire à les élever d’un rayon est de l’ordre de $mag \approx 10^{-3} J$, alors que l’énergie fournie par l’agitation thermique est de l’ordre de $k_B T \approx 4.10^{-21} J$ (la densité de l’atmosphère étant très faible par rapport à celle du sable). Il est clair que l’ensemble de grains considéré, qu’on appellera également “poudre”, peut être considéré comme un système à température nulle. Il faut noter qu’il existe des matériaux granulaires de toutes tailles, allant des grains de sable à des empilements de rochers pouvant peser des centaines de tonnes, en passant par des empilements de pneus. Dans l’étude des milieux granulaires, le rôle des interactions avec le milieu contenant les grains ou des interactions entre les grains peut être très important. En particulier, la présence d’un liquide induit des interactions attractives effectives entre les grains par l’intermédiaire des forces de capillarité. Si le liquide est très visqueux ou les grains très petits, cette force peut être du même ordre de grandeur que la force de gravitation. Lorsque les forces de cohésion dues au solvant sont négligeables, on parle de milieu granulaire “sec”. Cependant, il peut exister des interactions entre grains non négligeables dans un milieu granulaire sec, si les particules sont chargées ou si les grains sont trop petits. Par exemple, dans

une poudre de cacao, les forces de cohésion entre particules dues à la pression de l'air sont importantes, alors que les forces de gravitation sont faibles. Un tel milieu constitue un cas limite de milieu granulaire. Dans la suite, nous ne considérerons que des ensembles de grains soumis à la seule force de gravité, sans autre interaction mutuelle qu'une répulsion de cœur dur.

Il existe un grand nombre de matériaux qui peuvent être décrit ainsi de façon réaliste, parmi lesquels des grains de céréales dans des silos, des sols très fragmentés, certains bétons, un sac de billes, etc...

L'exemple le plus courant (et dont tous les gamins en vacances au bord de la mer sont des expérimentateurs infatigables) est celui du tas de sable. Un tas de sable peut être obtenu simplement en versant un seau de sable sur un sol plan. La première remarque est qu'un ensemble de grains de sables n'étant pas sensible à l'agitation thermique, l'état d'équilibre est un état d'énergie minimale, c'est-à-dire où toutes les particules sont en contact avec le sol. Or, l'état obtenu en versant les grains est le tas de sable, c'est-à-dire un empilement de forme grossièrement conique. Cet empilement est un état métastable, ou état "bloqué". Si l'on exerce une perturbation mécanique sur les bords du tas, les grains situés au voisinage du point d'action de la perturbation commencent à s'écouler vers le bas, entraînant les grains des couches externes qu'ils rencontrent sur leur passage, ainsi que les grains situés au-dessus qui étaient stabilisés par leur présence. Cet événement collectif, qui implique un grand nombre de particules situés à la surface et étendu à quelques couches en profondeur constitue une avalanche. Une pression exercée au sommet du tas a pour effet de diminuer sa taille en opérant une avalanche, les grains pouvant s'échapper latéralement ; une succession de telles pressions permet d'amener tous les grains au niveau du sol. Par contre, si le tas de sable est formé dans un récipient, les grains ne pouvant plus fuir latéralement, il arrive un moment où le tas se comporte comme un solide en réponse à la pression, c'est-à-dire il ne se déforme pas. Ceci est dû au fait que pour se débloquer, les grains doivent franchir des barrières d'énergie, soit gravitationnelle, soit frictionnelle. De plus, les réarrangements de grains sont généralement opérés par augmentation de volume et un milieu granulaire est donc d'autant plus indéformable qu'il est dense et confiné.

Cet exemple illustre le fait que la complexité des propriétés des milieux granulaires vient de l'importance de phénomènes collectifs non linéaires, dans lesquels les interactions (collisions inélastiques) à plus de deux corps sont prépondérantes et de l'existence d'un grand nombre d'états métastables, ou états bloqués. Je ne vais pas décrire tous ces propriétés des matériaux granulaires secs, mais je vais focaliser sur les propriétés statistiques des empilements statiques. En effet, du fait de l'existence de nombreux états métastables, les milieux granulaires possèdent des propriétés communes aux verres structuraux et à tous les systèmes vitreux en général. Ceci permet d'imaginer l'existence de propriétés universelles, c'est-à-dire indépendantes de la forme des grains par exemple.

1.2 Empilements granulaires

Il existe plusieurs protocoles permettant d'échantillonner différentes configurations possibles d'un milieu granulaire, des billes identiques dans une boîte sans cou-

vercle, par exemple. On peut remplir la boîte en déposant les grains un par un ; les configurations obtenues dépendent alors fortement de la façon dont les particules sont placées les unes à la suite des autres. Si la forme de la boîte le permet, on peut par exemple former des couches de billes superposées, pour obtenir divers empilements cristallins (cubique, cubique centré, etc...), qui vont avoir des fractions volumiques et des propriétés mécaniques différentes. On peut aussi disposer aléatoirement les billes une à une, obtenant d'autres propriétés, ou lâcher toutes les billes en même temps, ou les lâcher ensemble dans un liquide de même densité puis évacuer lentement le liquide lorsque l'empilement est stabilisé. Entre ces deux derniers cas, la fraction volumique de l'empilement obtenu est plus faible si les grains sont en compétition pour minimiser leur énergie potentielle, ce qui est le cas en présence de liquide. Il a été observé expérimentalement, puis numériquement, que pour un empilement compact désordonné (c'est-à-dire obtenu en versant d'un coup toutes les billes), la fraction volumique maximale¹ est $\phi_{RCP} \approx 0,637$, alors qu'il a été observé expérimentalement [122] que la fraction volumique (ou compacité) maximale pour un empilement obtenu en présence d'un liquide de même densité que les grains est $\phi = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \approx 0,74$, la compacité minimale [123] étant $\phi \approx 0,55$, pour l'état de rigidité marginale où l'équilibre entre les forces et les contacts entre grains suffisent juste à maintenir l'empilement au repos. La compacité maximale est celle du réseau cubique à faces centrées (CFC). En 1611, Kepler avait postulé que cet empilement est le plus compact possible pour des sphères dures identiques en dimension 3. La démonstration n'a été terminée que très récemment grâce à l'usage de moyens informatiques. La difficulté, qui illustre la difficulté de passer de l'ordre local à l'ordre (ou plutôt désordre) global dans un ensemble de grains est la suivante : localement, la compacité est maximisée en formant les structures les plus compactes. À deux dimensions, ces structures sont les triangles équilatéraux formés en mettant en contact trois sphères, alors qu'à trois dimensions, ce sont des tétraèdres. Or, il est possible de paver l'espace bidimensionnel avec des triangles équilatéraux, et la maximisation locale de la compacité est compatible avec la maximisation globale, comme dans un ferromagnétique où il est possible de minimiser l'énergie totale en minimisant l'énergie de chacun des sites. Par contre, il n'est pas possible de paver l'espace tridimensionnel avec des tétraèdres, même localement, c'est-à-dire il n'est pas possible de disposer des tétraèdres ayant un sommet commun et n'ayant pas recouvrement volumique, sans laisser du volume libre au voisinage du sommet commun. En particulier, il a été montré que le nombre maximum de tétraèdres disjoints que l'on peut disposer autour d'un sommet est 12, autrement dit la coordinance maximale est 12, celle du réseau cubique à faces centrées². Ainsi, il n'est pas simple à trois

¹RCP pour "Random Close Packing". Cette notion d'empilement aléatoire maximale est débattue, du fait qu'elle pourrait dépendre de la façon dont le système est préparé, en particulier du fait qu'elle a été obtenue par vibration. Cependant, il semble raisonnable qu'il ne soit pas possible d'obtenir une compacité plus grande sans corrélérer les déplacements des particules (par exemple, si l'on cisaille horizontalement, les déplacements sont corrélés sur des couches horizontales). Il est par contre probable que la compacité RCP dépende de caractéristiques du matériau constituant les billes, comme le coefficient de friction ou leur densité.

²ce résultat conjecturé lors d'une discussion entre Isaac Newton et David Gregory en 1694 a tenu près de 300 ans avant d'être démontré.

dimensions de paver l'espace à l'aide de structures au sein desquelles il est possible de maximiser la compacité, sans avoir de compétition entre deux telles structures voisines ; un tel système est donc frustré, exactement comme un verre de spins pour lequel il n'est pas possible de satisfaire toutes les interactions simultanément. La présence de frustration constitue la première analogie entre des milieux granulaires et les systèmes déjà couramment identifiés comme vitreux. De plus, l'absence de désordre gelé suggère que la frustration opère comme dans les verres structuraux.

1.3 Les états de la matière granulaire

a) Gaz, liquide, solide

Afin de pousser plus loin l'analogie, il convient de faire évoluer le système pour voir son comportement dynamique. On peut par exemple faire vibrer la boîte contenant les grains. L'évolution du système dépend alors à la fois de la fréquence f des vibrations et de leur amplitude a : si $af^2 \ll g$, l'excitation fournie au système est telle que l'évolution du milieu vibré est une succession d'excitations et de relaxations vers des états bloqués. Par contre, si $af^2 \gg g$, le système est en continuelle agitation et les grains ne sont jamais au repos. Dans le premier cas, la dynamique a permis d'échantillonner diverses configurations dans lesquelles l'assemblée de grains apparaît comme solide, alors que dans le second cas, le système est constamment dans un état similaire à un gaz, où les particules se déplacent et collisionnent entre elles et contre les parois, la différence fondamentale avec un gaz étant que les collisions entre grains sont très inélastiques, et que l'énergie cinétique³ leur est fournie par la vibration des parois. Un gaz granulaire constitue un système complexe au sein duquel l'équipartition de l'énergie est violée, et en particulier la distribution des vitesses n'est pas Maxwellienne [124]. En plus de solides granulaires et de gaz granulaires, il existe aussi des écoulements granulaires, qui sont mal décrits par les lois de l'hydrodynamique, bien qu'il soit possible d'en définir une viscosité. Par exemple, un empilement de plusieurs épaisseurs de grains, disposé sur une surface initialement horizontale et progressivement inclinée, reste dans la même configuration jusqu'à ce que l'angle d'inclinaison soit tel que la friction ne soit plus suffisante pour empêcher les grains de la couche supérieure de se mettre à glisser et de former une avalanche. À ce moment là, si l'inclinaison est augmentée très lentement, ou si des particules sont ajoutées par le haut, il est possible d'obtenir un écoulement stationnaire [125]. Un tel écoulement est le siège de phénomènes encore mal connus, tels que le déplacement par couches, celles-ci roulant sur les couches inférieures, ou la formation de rouleaux de connexion. Il existe donc des états d'un milieu granulaire qui ont des propriétés semblables des états solide, liquide ou gazeux. Cependant, ces similitudes ne sont que partielles, et en particulier il n'existe pas frontière connue entre ces différents états, l'état gazeux correspondant à des faibles fractions volumiques, l'état liquide à des fractions volumiques intermédiaires, et l'état solide, ou empilement, aux fractions volumiques les plus fortes.

³Du fait de la friction, c'est-à-dire de la non sphéricité parfaite, il y a également des échanges d'énergie cinétique entre degrés de liberté de rotation et de translation lors des chocs.

b) Transition de blocage

Lorsque la compacité est supérieure à⁴ $\phi_{RLP} \approx 0,55$, le système n'est typiquement pas mécaniquement stable et ne peut donc être solide. Par contre, la fraction volumique d'un fluide ne peut dépasser celle de l'empilement aléatoire compact $\phi_{RCP} \approx 0,637$ et donc il doit exister une transition dite de "blocage" à une valeur de la compacité située entre ϕ_{RLP} et ϕ_{RCP} , qui correspond (en présence de gravité) à la transition vitreuse observée dans les simulations par dynamique moléculaire de sphères dures à $\phi_G \approx 0,58$ [126, 127]. Cependant, le blocage cinétique, induit par la gravité, qui biaise fortement la dynamique relaxationnelle, ne suffit pas à faire d'un empilement granulaire un solide, comme cela a été remarqué par Cates et al. [128]. Il existe des systèmes, comme les suspensions colloïdales, qui présentent des phénomènes de blocage ayant également leur origine dans l'apparition de chaînes de forces, sans pour autant être des solides. Un exemple réalisable⁵ par la ménagère de moins de 50 ans est celui d'une solution concentrée de maïzena. Si la ménagère remue lentement cette solution avec une spatule (ou un autre objet présentant un front large), la solution s'écoule autour, de la façon dont un écoulement fluide visqueux contourne un obstacle ; si la ménagère tente de déplacer brutalement la cuillère dans la solution, celle-ci s'oppose aussi brutalement à la tentative, du fait de l'apparition de chaînes de forces dans le réseau formé par les particules en suspension. L'existence de telles chaînes de forces est responsable de la stabilisation et du caractère apparemment solide des empilements granulaires. Cependant, Cates et al. ont montré que ces chaînes de forces n'imposent pas une réponse élastique aux sollicitations externes. Par exemple, un tas de sable obtenu par renversement d'un seau sur un support horizontal est stable par application d'une petite force verticale pointant vers le bas (une augmentation de la gravité par exemple), précisément parce que les chaînes de forces responsables du blocage des grains sont celles qui ont permis de contrebalancer la gravité. Par contre, les chaînes de forces n'étant pas résistantes individuellement à une sollicitation qui leur est transverse, une très légère inclinaison du support du tas peut suffire à faire s'écouler une partie des grains. Cates et al. ont suggéré que la possibilité de déformer les particules permet au système de répondre de façon élastique à des sollicitations infinitésimales, comme c'est le cas pour une mousse. Ainsi, les matériaux constitués de particules complètement rigides constituent la matière "fragile", et ceux constitués de grains déformables la matière "bloquée" (dans les conditions correspondantes, un gaz granulaire n'étant pas un système bloqué). Liu et Nagel ont étendu ce concept de matière bloquée [1] à des systèmes ne présentant pas d'interactions de cœur dur, incluant les verres, et ont ainsi suggéré que la transition vitreuse est une transition de blocage⁶. D'Anna et Grémaud ont adopté le point de vue "inverse" : ils ont étudié la transition de blocage de milieux granulaires à l'aide de vibration, en vue de tester quantitativement l'analogie avec la transition vitreuse [129, 130, 131]. En particulier, ils ont observé

⁴RLP pour "Random Loose Packing".

⁵Un avantage de cette expérience est qu'elle sera bientôt l'une des rares financièrement accessibles aux laboratoires.

⁶Ils ont synthétisé cela dans un diagramme de phase schématique, qui peut être trouvé dans [1].

une diminution de la diffusivité lors d’une diminution du paramètre de contrôle de l’amplitude de la vibration, suivant une loi VFT.

2 Vibration des milieux granulaires

Le blocage rapide qui survient lorsqu’on verse un ensemble de grains est dû à la séparation claire des échelles de temps :

- les temps courts, allant de l’ordre de la fraction de seconde pour un seau de sable à quelques minutes pour un éboulis rocheux, correspondent à la relaxation des grains sous l’action de la gravité, jusqu’à ce que toute l’énergie ait été dissipée par les chocs inélastiques ;
- les temps longs correspondent au temps passé par le système dans un état métastable. Idéalement, ces temps sont infinis. En pratique, le système évolue toujours imperceptiblement ; par exemple, du fait de la gravité, les grains peuvent glisser très lentement, même malgré la friction (c’est le “vieillessement” du seuil de friction, qui diminue au cours du temps), jusqu’à ce que l’équilibre mécanique devienne localement instable. De ce fait, il peut y avoir des réarrangements à des temps très espacés et imprévisibles.

Cette séparation des échelles de temps est une réalisation idéale du scénario présenté dans le cadre des modèles champ-moyen de verres de spins, dans lesquels les vallées jouent un rôle important, mais les échelles de temps ne sont bien séparées que lorsque le temps passé à basse température est infini. De plus dans ces derniers, même à température nulle, les états bloqués (1-métastables) ne contribuent pas tous à la dynamique du fait de la persistance de l’effet de seuil. Lorsque l’on verse des grains, la dynamique est purement relaxationnelle et la friction provoque le blocage du système, c’est-à-dire une brisure forte d’ergodicité, le temps que met le système à se décorréler, et même à ce décorréler faiblement devenant infini.

Les expériences de vibrations faibles telles que celles effectuées par le groupe de Chicago et plus récemment par le groupe de Rennes [132] tirent partis de cette séparation des échelles de temps afin d’essayer d’étudier les propriétés statistiques des empilements granulaires et leur rôle dans la compaction de ces derniers.

2.1 L’expérience de Chicago

L’expérience réalisée par le groupe de Nagel à Chicago [133] fait figure de référence pour la compaction des milieux granulaires. Elle va être décrite en détail dans les paragraphes qui suivent.

a) Dispositif expérimental

Le dispositif est constitué d’un cylindre vertical en Pyrex de 18,8 mm de diamètre pour 1 m de hauteur. Le cylindre est placé sur un système de vibration verticale, puis rempli de billes de verre de 2 mm de diamètre. Afin d’obtenir des empilements de faible densité, qui ne sont pas réalisables par vibrations, l’empilement est préparé en disposant les billes, puis en injectant de l’azote à haute pression par le fond du tube. Ce protocole permet d’obtenir une fraction volumique $\phi \approx 0,577$ proche de la

plus petite possible et qui peut être reproduite facilement, de sorte que toutes les expériences ont la même fraction volumique initiale. Les empilements si peu denses sont caractérisés par un grand nombre d’arches et voûtes, qui ne peuvent être obtenues que par dépôt collectif des billes [134]. Lorsqu’on injecte du gaz par en dessous, celui-ci se propage dans le milieu granulaire en passant entre les billes, mais aussi en les soulevant si la pression est forte, créant des bulles, comme dans un liquide, et donc des arches. Une fois l’empilement peu dense obtenu, le système est mis sous vide, afin d’empêcher toute pénétration d’humidité. Afin de mesurer la compacité, des plaques métalliques sont disposées de part et d’autre à différentes hauteurs du cylindre pour constituer des condensateurs. La capacité d’un condensateur étant fonction de la constante diélectrique du milieu inter-plaques, la mesure de la capacité permet d’obtenir la densité en plusieurs endroits de l’empilement, à savoir à la surface et au sein de l’échantillon (en bas, au milieu et en haut). La taille des plaques permet de fournir la fraction volumique moyennée sur environ 6000 billes à chaque endroit. Le dispositif est présenté sur la figure (III.1). Le cylindre est vibré par l’intermédiaire du cycle sinusoïdal représenté dans l’encart, l’intervalle de temps entre deux cycles consécutifs étant suffisant pour permettre au système de relaxer complètement dans un nouvel état métastable. Le paramètre de contrôle Γ choisi est le rapport de l’accélération maximale durant le cycle à l’accélération de la gravité. L’unité naturelle de temps est le nombre de cycles effectués depuis la préparation du système à l’instant initial, ayant pour temps $t = 1$. Du fait que $\Gamma > 1$, l’effet d’un cycle sur l’empilement est comparable à celui d’un choc appliqué au fond du tube. Nous appellerons donc “tape” un cycle de vibration.

b) Évolution de la densité

L’évolution de la fraction volumique en fonction du nombre de tapes pour une seule réalisation et pour la moyenne sur plusieurs réalisations de l’expérience sont présentées sur la figure (III.2). À très faible Γ ($\Gamma \leq 1,8$), le système se densifie très lentement, alors que pour des valeurs plus fortes de Γ , la compaction commence par être plutôt rapide, avant de devenir très lente. La première partie de la courbe de compaction s’opère en éliminant les structures les plus instables, à savoir les arches. Si la vibration est trop forte, la densité augmente rapidement au cours du temps jusqu’à ce qu’une majorité d’arches sont éliminées. Si au contraire la vibration est faible, une fraction des arches peut subsister pendant un temps beaucoup plus grand que la durée de l’expérience grâce à la friction, ce qui explique l’absence de compaction rapide initiale pour les valeurs les plus petites de Γ . La partie lente de la compaction, qui est obtenue pour toutes les amplitudes de vibration est due à des réarrangements locaux des billes sur des échelles petites devant le diamètre des billes, contrairement aux réarrangements issus de la destruction d’arches, qui correspondent à des échelles supérieures à la taille des grains. Cependant, de grandes fluctuations de fraction volumique, comme celles visibles sur la figure (III.2), peuvent subvenir du fait de l’occurrence d’événements rares de grande échelle comme des avalanches. Il est difficile d’extraire la loi de variation temporelle de la compacité lors d’une seule expérience, celle-ci étant très dépendante de l’expérience et dominée par les fluctuations. Par contre, la moyenne sur plusieurs expériences à même amplitude de

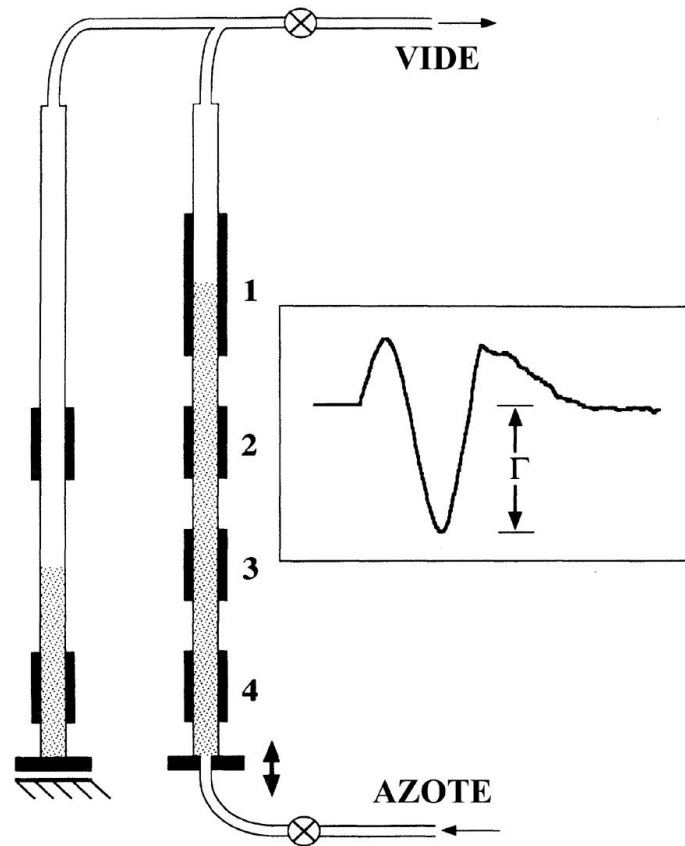


FIG. III.1 – Schéma du dispositif expérimental du groupe de Chicago. Le cylindre de gauche sert à mesurer les fluctuations du dispositif électronique (extrait de [133]). Dans l’encadré, la variation de l’altitude du cylindre durant une tape est représentée.

vibration permet d’obtenir des courbes qui fluctuent relativement peu, comme sur la figure (III.2). Certains arguments qualitatifs simples prédisent des lois différentes. Barker et Mehta ont proposé que la compaction s’opère à deux échelles, celle des grains, qui se déplacent localement dans une cage formée par leurs voisins, et celle d’amas de grains, qui se déplacent plus lentement [136, 137, 138]. Cette séparation de deux échelles de temps (et de taille) implique que la densité doit évoluer comme la superposition de deux exponentielles, ce qui est en accord avec l’évolution d’une seule réalisation, mais pas avec une évolution moyenne. Si l’on suppose que ces deux échelles de temps dépendent de la réalisation de l’expérience, ou qu’il y a plus que deux échelles de temps (par exemple si les amas compacts ont une grande variété de tailles), la moyenne obtenue peut être une évolution très lente. Knight et al. ont testé diverses lois pour décrire la compaction moyenne. La loi qui semble la plus satisfaisante est une loi de compaction logarithmique [133] :

$$\rho(t) = \rho_{\infty} - \frac{\Delta\rho}{1 + B \ln(1 + t/\tau)}. \quad (1)$$

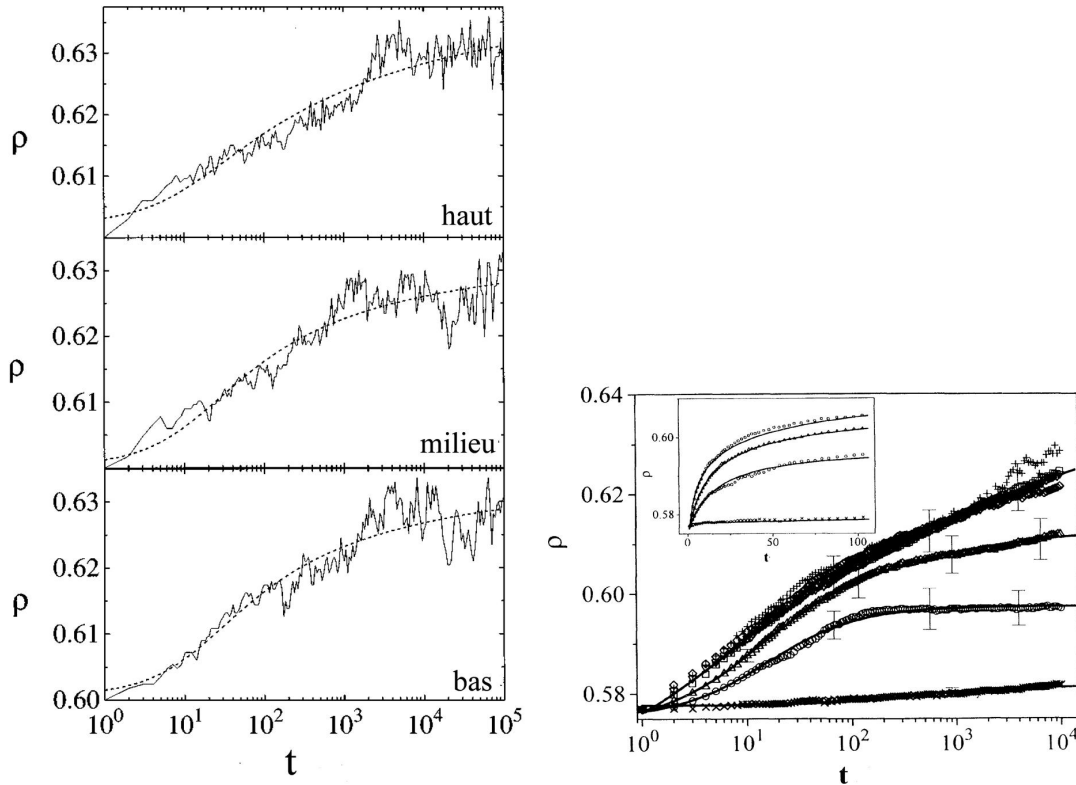


FIG. III.2 – Évolution temporelle de la fraction volumique (notée aussi ρ). À gauche : évolution à différentes hauteurs pour une seule réalisation de l'expérience et pour $\Gamma = 6, 8$ (extrait de [135]). À droite : évolution au voisinage du fond du cylindre moyennée sur 5 réalisations, pour $\Gamma = 1, 4 (\times)$, $\Gamma = 1, 8 (\circ)$, $\Gamma = 2, 3 (\triangle)$, $\Gamma = 2, 7 (\square)$, $\Gamma = 3, 1 (\nabla)$, $\Gamma = 4, 5 (\diamond)$ et $\Gamma = 5, 4 (+)$ (extrait de [133]). Les lignes sont des régressions suivant l'équation (1).

Remarquons que les paramètres d'ajustement de (1) dépendent du temps de compaction déjà écoulé ; en particulier, plus ce temps est grand, plus l'échelle de temps τ est grande [139].

Il convient d'être prudent quant-à l'interprétation de cette loi. En effet, celle-ci semble certes la meilleure lorsqu'on moyenne sur plusieurs réalisations de l'expérience, mais il est plus difficile de discriminer d'autres lois avec une seule réalisation. Un argument expliquant la loi (1) ne peut donc être discriminant que s'il ne s'applique pas qu'à une seule réalisation, mais à une moyenne. La loi de compaction logarithmique peut être obtenu dans la limite $\Gamma \rightarrow 0$, à partir de plusieurs modèles, tous basés sur un argument de volume libre utilisé pour la première fois dans le contexte des milieux granulaires par Knight et al. [140] ainsi que Bouteux et de Gennes [141]. L'argument est le suivant : lorsque Γ est très faible, la densité asymptotique ρ_m est la densité maximale possible en tapant. Donc à une densité donné ρ , l'excès de volume par grain (ou "volume libre") est donné par $v = V_g \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_m} \right)$. Le point clé est que pour que le volume total diminue de V_g , il faut que plusieurs grains se

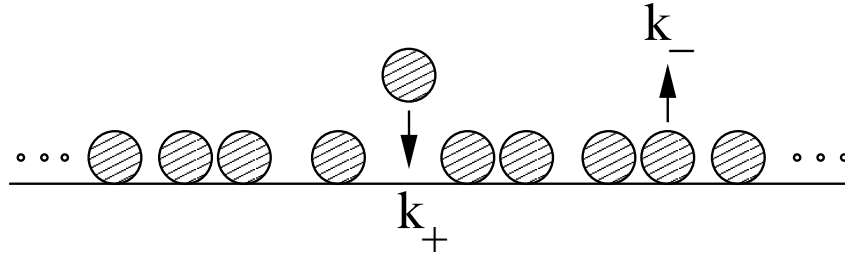


FIG. III.3 – Processus d’adsorption et désorption. L’adsorption n’a lieu que s’il y a de la place pour une nouvelle particule, alors que la désorption n’a pas de contrainte.

réarrangent collectivement pour libérer l’espace pour disposer un grain. Le nombre de grains à déplacer pour créer un volume libre au moins de la taille d’un grain est $N = \frac{V_g}{v} = \frac{\rho \rho_m}{\rho - \rho_m}$, et la probabilité que ces N grains ce réarrangent est proportionnelle à e^{-N} . La densité évolue donc selon l’équation suivante :

$$\frac{d\rho}{dt} = a(1 - \rho)e^{-\frac{\rho \rho_m}{\rho - \rho_m}}. \quad (2)$$

Dans la limite de très grands temps, $\rho \sim \rho_m$ et la solution de (2) est asymptotiquement de la forme (1). Cependant, les arguments tels que celui du volume libre sont à consommer avec modération. Le volume libre est la différence des volumes par particule dans l’état asymptotique et à l’instant t . Or ce volume libre ne représente pas le volume accessible aux particules. En effet, le volume minimum accessible par particule est la différence entre le volume obtenu en minimisant la distance entre les particules voisines, c’est-à-dire en formant des tétraèdres. Si l’on s’intéresse au volume moyen accessible, celui-ci ne peut être inférieur au volume moyen accessible dans l’empilement cubique à faces centrées, qui est le plus compact possible. Or l’empilement le plus compact obtenu dans les expériences de Chicago est de 10% moins dense que l’empilement CFC, et donc le volume accessible moyen ne tend pas vers 0 quand la densité atteint son état asymptotique. Le fait de prendre en compte le volume libre à la place du volume accessible revient à supposer la densité asymptotique est une densité de référence que le système tend à atteindre, en d’autres termes, c’est un point fixe de la dynamique. Or, dans la théorie du volume libre, la dynamique se déroule comme si la densité à atteindre était connue à priori. En particulier, celle-ci tient compte de la diminution de la densité due à des réarrangements de grande taille, mais ne tient pas compte de l’augmentation possible de celle-ci. Cependant, le fait d’obtenir un empilement moins compact que le CFC lorsque Γ tend vers 0 indique que la compaction doit être ralentie par un mécanisme d’augmentation de la fraction volumique dû aux configurations géométriques locales.

Un modèle mettant plus quantitativement en œuvre un argument de volume libre est le modèle de parcage [142, 135, 143] (“parking lot” en anglais) à une dimension, qui décrit l’évolution temporelle de la densité de voitures se garant le long d’une route sans tenir compte de la délimitation des places. Ce modèle décrit aussi l’adsorption et la désorption de particules sur un substrat [142], dans sa version bidimensionnelle.

Le système est constitué d'un axe infini sur lequel des particules de taille unité peuvent être déposés avec un taux k_+ , à condition qu'il y ait un espace de taille unité au moins pour les accueillir, et retirées avec un taux k_- (cf. figure (III.3)). Le paramètre de contrôle de la densité asymptotique est le rapport $\frac{k_+}{k_-}$. Le lien avec les milieux granulaires bidimensionnels est le suivant : si le milieu est assez compact, les grains sont grossièrement disposés selon des lignes horizontales, qui sont déformées par l'interaction avec les lignes voisines. Si l'on suppose que cette interaction entre lignes revient à un échange de grains d'une ligne à l'autre, on obtient le modèle de parage, avec des taux k_+ et k_- Γ -dépendants. Une version bidimensionnelle du modèle de parage permettrait donc de décrire la compaction d'un empilement tridimensionnel, mais n'est pas soluble analytiquement. De plus, le fait que deux couches successives interagissent par échange de grains n'est vrai que dans la limite où la dimension d'espace est très grande, c'est-à-dire quand chaque grain a un grand nombre de voisins, qui peuvent donc se réarranger pour accueillir un grain d'une couche voisine. En d'autres termes, l'étude de la compaction granulaire à l'aide de ce processus d'adsorption-désorption est une étude en champ moyen. Krapivsky et Ben-Naim [142] ont résolu la dynamique du modèle de parage, dont la densité relaxe selon l'équation de Langmuir modifiée :

$$\frac{d\rho}{dt} = k_+(1 - \rho)e^{-\frac{\rho}{1-\rho}} - k_-\rho \quad (3)$$

À ce stade, une comparaison avec l'argument de volume libre s'impose. En effet, le terme $e^{-\frac{\rho}{1-\rho}}$ est similaire au terme e^{-N} , qui donne la probabilité de créer un vide de la taille d'une particule. Or, ici, ce n'est pas le volume libre, mais le volume accessible qui est pris en compte. Ce volume accessible par particule est obtenu par référence au volume par particule de l'état le plus compact ou l'axe est entièrement rempli, dont la densité est $\rho_m = 1$. De plus, l'augmentation de la densité est contrebalancée par le terme de désorption $-k_-\rho$, et il n'existe un régime de compaction logarithmique que lorsque $\rho(\infty) \sim 1$, c'est-à-dire lorsque $k \gg 1$. Lorsque k_- n'est pas nul, la décroissance est exponentielle, avec un temps de relaxation proportionnel à $\frac{1}{k_-}$, du fait de l'équilibration entre adsorption et désorption.

Une autre amélioration de l'argument de Knight et al., permettant d'inclure l'effet de l'amplitude de vibration Γ a été introduite par Head [144, 145]. Dans ce modèle phénoménologique, la création d'un vide est identifiée au franchissement d'une barrière d'énergie par activation, de sorte que le taux de relaxation est de la forme : $W(\rho, \Gamma) \propto e^{-\frac{N\Delta E}{\eta(\Gamma)}}$, où $N = \frac{V_g}{v}$. Le modèle ainsi obtenu est similaire à un modèle de pièges, la loi de compaction étant bien décrite par la loi (1). Cette activation a également été mis en évidence dans un modèle unidimensionnel de déposition, où les particules sont autorisées à diffuser [146].

Avant de passer à la description du régime stationnaire, il est utile d'ajouter que dans le régime de compaction lente, des effets typiques des systèmes vitreux ont été observés. En vibrant avec une amplitude Γ des empilements, préparés à une fraction volumique ϕ_0 obtenue à l'aide de vibrations à des amplitudes $\Gamma_1 < \Gamma$, $\Gamma_2 = \Gamma$ et $\Gamma_3 > \Gamma$, Josserand et al. ont montré l'existence de mémoire à court terme et de rajeunissement, l'évolution à temps court de la fraction volumique dépendant de

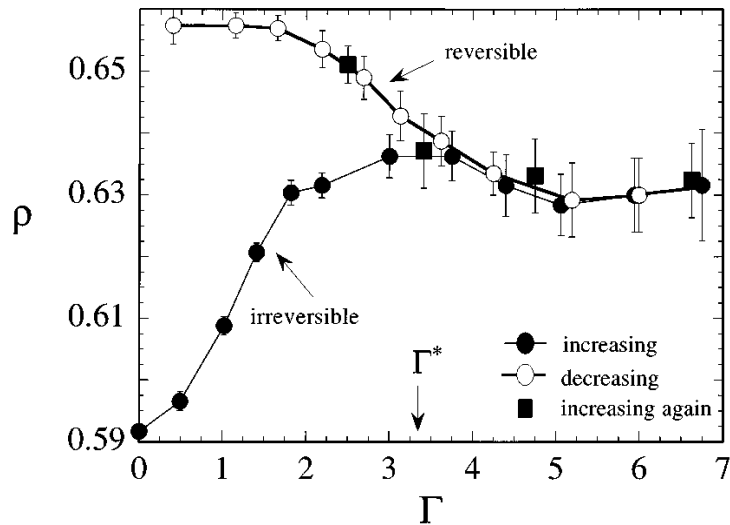


FIG. III.4 – Évolution de la fraction volumique en fonction de Γ le long d'un cycle de vibration (extrait de [135]).

l'histoire de l'échantillon [25]. Ces effets sont présents dans plusieurs modèles de compaction granulaire [147, 148], ainsi que des effets de mémoire à long terme [147].

c) Régime stationnaire

Bien que la compaction soit très lente, il est possible d'obtenir un régime asymptotique stationnaire après avoir suffisamment vibré le système. Si l'on fait varier lentement Γ en laissant le temps au système d'atteindre son régime stationnaire entre chaque changements, il est possible d'obtenir la variation de la densité $\rho(\Gamma)$ en fonction de Γ . Ce protocole a été réalisé par le groupe de Chicago. Après que le système eut été préparé dans un empilement de fraction volumique $\phi = 0,577$, celui-ci a été vibré à $\Gamma = 0,5$, puis Γ a été augmenté progressivement par sauts de $\Delta\Gamma = 0,5$. Ainsi, un cycle de vibration, décrit sur la figure (III.4) a été effectué. La courbe obtenue (figure (III.4)) possède deux parties caractéristiques. Lorsque Γ va de 0,5 à $\Gamma^* \approx 3,5$, dans la première évolution croissante, le système se décompacte de façon irréversible. Lorsque cette décompaction s'opère, des arches sont détruites, en commençant par les plus grandes, plus instables, les plus petites étant détruites à Γ^* . Le caractère irréversible de cette évolution est due au fait que les arches ne peuvent pas être créés par vibration. Une fois que Γ a atteint Γ^* , un régime réversible est atteint, le long de laquelle la fraction volumique est une fonction décroissante de Γ .

La densité atteinte dans l'état stationnaire pour chaque valeur de Γ semble être bien définie sur la courbe réversible. Cette densité est obtenue en moyennant sur un grand nombre d'états métastables obtenus au cours de l'expérience. Ayant la possibilité d'explorer un grand nombre de configurations, plusieurs questions émergent : quelles sont les caractéristiques des configurations typiques qui sont obtenues ? Quelle est la distribution de ces configurations ? Quel sont les rôles respectifs des deux phases de la dynamique (excitation et relaxation) ?

Afin de répondre en partie à ces questions, Nowak et al. ont étudié les fluctuations de la densité dans le régime stationnaire. Ils ont montré que la distribution des fluctuations de densité est Gaussienne pour des petites fluctuations, mais que celle-ci est non Gaussienne pour les larges fluctuations dans certains cas [135]. De plus, l'étude détaillée du spectre de puissance de ces fluctuations montre que celles-ci sont dues à des réarrangements à diverses échelles [149], dont les plus grands forment des avalanches. Le système reste donc très corrélé pendant de grandes périodes de temps, avant de perdre sa corrélation par des avalanches, qui amènent de grandes fluctuations de densité.

2.2 Quelques commentaires sur l'expérience de Chicago

L'expérience décrite dans les paragraphes précédents présente une très riche phénoménologie, typique de celle des milieux granulaires, dans laquelle l'histoire de l'échantillon est très importante. Dans ce paragraphe, la représentativité de cette expérience va être discutée. L'existence d'empilements riches en arches ainsi que le caractère fortement non Gaussien de certaines fluctuations de densité indique que les bord du cylindre jouent un rôle important. Les billes ont un diamètre de 2mm , alors que le diamètre du cylindre est de $18,8\text{mm}$, soit environ 9 diamètres de bille. Or, les arches, qui permettent de stabiliser des empilements peu denses obtenus par déposition séquentielle, sont elles-mêmes stabilisées par les contacts avec les parois du cylindre⁷. En effet, en ces points, les contraintes mécaniques ne sont pas exercées sur les grains inférieurs, mais sur les parois, dans le prolongement des chaînes de forces (ce qui est la raison pour laquelle le débit est constant dans un sablier). De plus, si la distance typique entre deux points de croisement des chaînes de force est de l'ordre de la largeur de la boîte, des structures très instables peuvent être obtenues en créant des voûtes de la même taille, s'appuyant sur les parois, de sorte que l'effondrement d'une de ces voûtes provoque l'effondrement de tout l'empilement situé au dessus, y compris l'effondrement d'autres voûtes. A contrario, si la boîte est large, les voûtes ne s'appuient plus sur les parois et sont donc moins stables. De plus, la brisure d'une voûte provoque des réarrangements plus locaux que dans le cas où le cylindre est étroit. On s'attend donc à obtenir certaines différences en vibrant des billes dans une boîte plus large : des fluctuations de densité plus Gaussiennes, moins dominées par les avalanches, une diminution de la valeur Γ^* où le régime irréversible disparaît, et un changement de la loi de compaction (la présence de convection facilitant l'établissement d'un régime stationnaire).

La vibration de billes de verre dans un cylindre plus large a été réalisée par Philippe et Bideau [132]. Leur dispositif a un diamètre de 10cm , pour des billes de 1mm , ce qui fait un rapport de 100. Leur résultats sont les suivants :

- les relaxations ne sont plus logarithmiques, mais bien décrites par des exponentielles étirées de la forme Kohlrausch-Williams-Watts (KWW). Le temps de re-

⁷Des études numériques ont été réalisées sur les arches dans des empilements sans parois, où des structures de grande taille ont été observées [150]. Cependant, l'utilisation de conditions aux limites périodiques, pour des tailles de boites de 8 diamètres de grains explique la stabilisation de ces larges structures.

- laxation $\tau(\Gamma)$ étant relativement bien décrit par une loi d'Arrhenius $\tau(\Gamma) \propto e^{\frac{\Gamma_0}{\Gamma}}$ au dessus de $\Gamma = 1, 2$;
- la diminution de Γ^* à la valeur $\Gamma^* \approx 1, 2$, qui est le seuil de décollage des billes. En dessous de Γ^* , la compaction s'opère beaucoup plus lentement, sans que les billes du fond ne décollent. Le temps de relaxation suit toujours une loi d'Arrhenius en dessous de Γ^* , mais avec un Γ_0 plus grand.

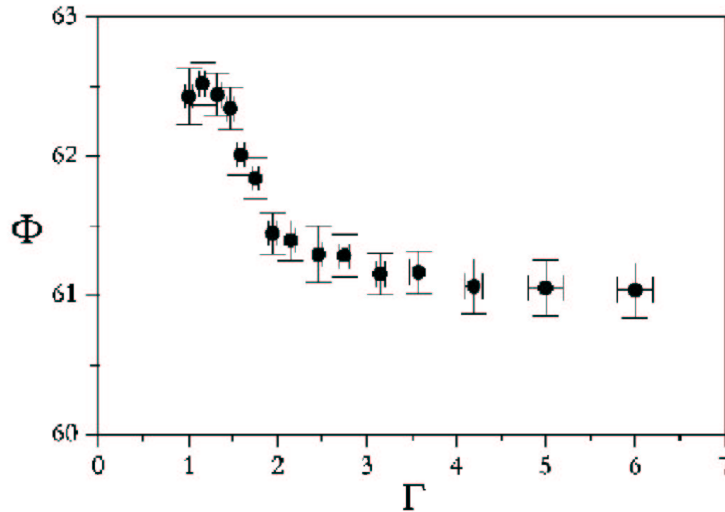


FIG. III.5 – Courbe de compaction obtenue par Philippe et Bideau (extrait de [132]).

La courbe de compaction réversible est montrée sur la figure (III.5). Les valeurs de la fraction volumique sont toujours plus petites que ϕ_{RCP} , ce qui n'est pas le cas dans l'expérience de Chicago. Cet effet peut être attribué aux parois : dans l'expérience de Chicago, une partie du poids du système est supporté par ces parois, de sorte que l'accélération maximale effectivement ressentie est en partie compensée par le poids "absorbé" par celles-ci. Ainsi, pour une valeur donnée de Γ , l'accélération qui contribue au réarrangement des grains n'est pas la même selon si le cylindre est étroit ou large. Cela peut expliquer les relaxations plus rapides et la diminution de Γ^* dans l'expérience de Philippe et Bideau, qui correspondent à des vibrations en fait beaucoup plus fortes que celles du groupe de Chicago. Il est possible que des valeurs très faibles de Γ permettent dans ce cas d'obtenir des densités dépassant 0,63. Il est donc clair que Γ n'est pas un paramètre universel pour décrire la vibration du système, puisque les densités obtenues dépendent fortement du diamètre du cylindre. En particulier, l'accélération effectivement ressentie par l'empilement n'est pas celle fournie par le module vibrant.

Une constatation similaire a été faite par D'Anna et Grémaud ; dans leurs expériences de vibration, les courbes de diffusivité en fonction de Γ dépendent de la fréquence f du cycle constituant chaque tape, mais sont superposées à petit Γ en utilisant la variable d'échelle $\tau = \frac{\sqrt{\Gamma}}{f} = \sqrt{\frac{a}{g}}$ (où a est l'amplitude du cycle sinusoïdal). Le paramètre τ représente le temps que met un grain à chuter sur une

distance a . Partant de cette observation, D'Anna et al. ont montré qu'il est possible de relier l'occurrence d'une loi VFT aux statistiques des extrêmes des longueurs de chute [151]. En particulier, pour $\Gamma < \Gamma^*$ (en dessous du seuil de décollage), la dynamique est dominée par des changements configurationnels rares de grande ampleur (avalanches), et opère par activation. Lorsque $\Gamma > \Gamma^*$, les grands changements structurels sont fréquents et la dynamique n'est plus dominée par les statistiques extrêmes. Il semble donc que Γ^* est la frontière⁸ entre un état "liquide"⁹ dans lequel la dynamique atteint rapidement un état stationnaire et un état vitreux, dans lequel la dynamique opère par activation.

Enfin un dernier commentaire, à propos de la densité maximale obtenue par le groupe de Chicago. Celle-ci est nettement inférieure à celle de l'empilement cristallin le plus compact. En effet les vibrations verticales sont transmises aux grains sous la forme d'ondes qui se propagent de bas en haut, de sorte que les mouvements des particules sont corrélés principalement sur des couches horizontales. Du fait que les positions des particules entre les couches ne sont pas corrélées, il n'y a pas de correspondance entre les espaces entre les billes dans une couche et les positions des billes dans l'autre, de sorte que celles-ci ne peuvent "s'emboîter". Pour pallier à cela, on peut soumettre le système à des vibrations horizontales. Dans ce cas, les billes se réarrangent en formant des tétraèdres (pas forcément équilatères) avec les billes des autres couches, ce qui permet d'obtenir des structures cristallines [152], comme le réseau cubique, dont la densité est plus forte que les densités obtenues par les vibrations verticales. Une autre possibilité consiste à cisailier horizontalement l'empilement [153]. Les billes sont placées dans une boîte parallélépipédique dont deux des faces verticales peuvent s'incliner en restant parallèles, selon un angle θ avec la verticale. En faisant varier θ de façon sinusoidale entre $-\Theta$ et Θ , on permet au système de se densifier, Θ étant le paramètre de contrôle. L'empilement ainsi cisailé évolue en faisant glisser et rouler les uns contre les autres, de sorte que la nucléation de cristal est favorisée. Cette nucléation est effectivement observée dans les expériences de Nicolas et al. [153], où des amas cristallins, n'ayant pas toujours des directions parallèles aux murs, sont observés dans l'empilement.

3 États métastables et hypothèse d'Edwards

Dans un système à l'équilibre thermique, la thermodynamique permet de décrire complètement le système. Dans un système à température nulle, tel un milieu granulaire, la dynamique est dominée par les états métastables. Il est alors nécessaire de fournir de l'énergie à l'échantillon pour lui permettre d'évoluer. Si la manière d'injecter l'énergie est de même nature à chaque fois, on peut espérer atteindre un

⁸La valeur de Γ^* obtenue par D'Anna et al. est proche de celle de Philippe et Bideau, car les dispositifs expérimentaux ont des géométries similaires ; il demeure que Γ^* dépend des caractéristiques géométriques.

⁹Cet état "liquide" n'est pas le même que celui dont il a déjà été question précédemment. Il s'agit d'une phase liquide dans une dynamique cependant restreinte aux états bloqués, ce qui n'est pas le cas d'un écoulement granulaire sur un plan incliné, par exemple. En anticipant un peu sur la suite, c'est un état liquide à la Edwards.

régime stationnaire dans lequel certaines grandeurs fluctuent autour de leur valeur moyenne. Les expériences de vibration qui ont été décrites permettent d’atteindre un état stationnaire, après un temps d’autant plus grand que l’amplitude de vibration est faible. Une fois l’état stationnaire atteint, la vibration permet d’échantillonner des états bloqués, de fraction volumique moyenne $\phi(\Gamma)$. Remarquons qu’il existe de nombreuses façons d’exciter un milieu granulaire, par exemple en le tapant verticalement ou horizontalement, en le vibrant, en le cisailant, ou en le dilatant (par exemple dans des simulations numériques), la liste n’étant pas exhaustive. Cependant, le rôle de l’excitation est plus simple à déterminer dans le cas où celle-ci agit de façon homogène (ou quasiment au moins), de sorte que l’effet de l’excitation est la même dans tout le système. Lorsque l’on tape sur le fond d’un cylindre vertical contenant des billes, l’énergie se déplace du bas vers le haut de l’empilement via des ondes de densité, qui se propagent le long des lignes de force, de sorte que si le choc au bas de la pile est trop faible par rapport à la hauteur totale, les couches supérieures ressentent moins la sollicitation que les couches inférieures ; la compaction est alors très hétérogène [154]. Dans les expériences de vibration, l’accélération est transmise à l’ensemble de l’empilement, mais pas simultanément. Cependant, la densité obtenue dans l’état stationnaire semble très peu dépendre de l’endroit où elle est mesurée dans l’empilement (pourvu que ce soit suffisamment loin des interfaces), ce qui indique que la vibration agit de façon homogène. On parle alors de sollicitation “extensive” du fait que l’énergie fournie au système par celle-ci est proportionnelle au nombre de grains (et donc au volume dans l’état stationnaire).

Si le régime stationnaire des systèmes à l’équilibre thermique est bien décrit par la thermodynamique de Boltzmann-Gibbs, c’est parce que la dynamique elle-même est une dynamique d’équilibre. Dans ce type de dynamique, l’évolution locale du système dans l’espace des configurations est une marche aléatoire (biaisée dans la direction du gradient d’énergie), le régime stationnaire étant obtenu en équilibrant les variations dues au gradient d’énergie et à la variation du nombre de configurations accessibles, c’est-à-dire en minimisant l’énergie libre. Du point de vue microscopique, la dynamique d’un système peut être décrite par un opérateur d’évolution \hat{W} , qui gouverne la transformation de la distribution de probabilité des degrés de liberté entre deux instants. Afin que le régime stationnaire existe, il est nécessaire qu’il existe une distribution invariante par la dynamique, c’est-à-dire un point fixe de l’opérateur d’évolution en temps discret, ou un annulateur de celui-ci en temps continu. Dans le cas d’une dynamique de Langevin, la relation d’Einstein implique que la constante de diffusion locale (ou “nue”, c’est-à-dire sans interactions) est proportionnelle à la température ; dans le cas où l’opérateur d’évolution décrit les probabilités de transition, la contrainte du bilan détaillé, ajoutée à l’ergodicité, assure l’existence d’une mesure de probabilité invariante par la dynamique. Dans les deux cas, le fait que la mesure d’équilibre soit la mesure de Boltzmann-Gibbs est traduit par le FDT. De plus, à l’équilibre thermique, le premier principe de la thermodynamique impose que l’énergie totale d’un système isolée se conserve, de sorte que deux systèmes en contact et à l’équilibre sont à la même température. Si l’on suppose que l’interaction entre les deux systèmes est linéaire (i.e. de la forme $E_{int} = \sum_{a,b} \omega_{ab} x_a y_b$ où les x_a et y_b sont les degrés de liberté respectifs des deux systèmes en contact), le FDT exprime

l'impossibilité de discerner une fluctuation spontanée d'énergie d'une dissipation (ou d'un gain) due à un échange entre les systèmes. En d'autres termes, l'énergie d'un système à l'équilibre thermique avec un thermostat évolue par des échanges d'énergie symétriques (d'où le terme "équilibre") avec celui-ci.

Dans les milieux granulaires compacts, tels que ceux étudiés dans une expérience du type de celle du groupe de Chicago, la façon dont l'énergie est insufflée à l'empilement n'est pas du tout équivalente à la façon dont les grains restituent celle-ci. En effet, l'énergie est produite par un moteur et injectée de façon mécanique par les parois. Elle est ensuite dissipée par les contacts inélastiques entre les grains et contre les parois. La majorité de l'énergie est alors dissipée dans l'air. Il est clair qu'il est impossible de considérer le système {empilement + dispositif vibrant} comme un système isolé à l'équilibre, puisqu'un des deux systèmes est consacré à céder de l'énergie à l'autre, et l'autre à la dissiper (c'est une sorte de mécénat de la part du bloc vibrant!).

3.1 Mesure d'Edwards

Afin d'utiliser les outils de la thermodynamique, Edwards [155, 156, 157, 158] a postulé que dans l'état stationnaire d'un milieu granulaire soumis à une manipulation extensive (vibrations, cisaillement, etc), la mesure obtenue dynamiquement est la mesure microcanonique, restreinte aux états bloqués. En d'autres termes, l'hypothèse d'Edwards est que dans les états stationnaires, tous les états métastables sont échantillonnés avec la même probabilité. La mesure dynamique stationnaire est donc simplement plate, et a été récemment nommée "mesure d'Edwards". Cette mesure est la plus simple que l'on puisse imaginer. Son usage revient à considérer qu'à une densité donnée tous les états métastables ayant cette densité ont le même bassin d'attraction, et donc ont la même probabilité d'être atteints. L'idée d'Edwards s'appuie sur le fait que des systèmes très frustrés comme les empilements granulaires possèdent une entropie configurationnelle extensive, qu'on appelle dans ce cas "entropie d'Edwards" :

$$S_{Edw}(\rho) = \ln(\text{Nombre de configurations bloquées de densité } \rho). \quad (4)$$

Usuellement, en thermodynamique, l'entropie est définie par

$$e^{S(E)} = \sum_{\mathcal{C}} \delta(\mathcal{H}(\mathcal{C}) - E), \quad (5)$$

où \mathcal{H} est l'hamiltonien du système. On définit donc de façon similaire l'entropie d'Edwards :

$$e^{S_{Edw}(V)} = \sum_{\mathcal{C} \text{ bloquée}} \delta(\mathcal{W}(\mathcal{C}) - V), \quad (6)$$

où \mathcal{W} est une fonction qui donne le volume¹⁰ en fonction des positions et orientations des grains de la poudre. Si la densité atteinte lors d'un processus de vibration est ρ ,

¹⁰Le volume dont il s'agit ici est $W = \frac{N}{\phi}$ où N est le nombre de grains.

la valeur moyenne d'une observable O est

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\mathcal{C} \text{ bloquée}, \rho(\mathcal{C})=\rho} O(\mathcal{C})}{\sum_{\mathcal{C} \text{ bloquée}, \rho(\mathcal{C})=\rho} 1}. \quad (7)$$

On peut alors obtenir une description canonique, c'est-à-dire en fixant le volume moyen, en introduisant un multiplicateur de Lagrange, la "compactivité" :

$$X^{-1} = \frac{\partial S_{Edw}}{\partial V}. \quad (8)$$

L'équivalent de l'énergie libre est

$$Y = V - X S_{Edw}, \quad (9)$$

de sorte que l'entropie d'Edwards vérifie

$$S_{Edw} = \frac{\partial Y}{\partial X}. \quad (10)$$

Similairement à la température, qui croît avec l'énergie moyenne, la compactivité croît avec le volume.

Quel est l'intérêt d'introduire cette compactivité? La réponse est donnée par la simplicité des calculs dans l'ensemble canonique par rapport à l'ensemble microcanonique en thermodynamique. De plus, la température est une grandeur plus "caractéristique" que l'énergie. En effet, c'est elle qui fixe le sens des flux de chaleur; en tant que grandeur intensive associée à l'énergie, elle caractérise les fluctuations locales de l'énergie, ainsi que les échanges. En particulier, si deux corps sont à l'équilibre thermique, leurs températures sont égales. De plus, selon le principe zéro de la thermodynamique (qui permet en fait de définir la température), si deux corps sont à l'équilibre thermique avec un troisième, alors ils sont à l'équilibre entre eux. Une conséquence pratique de ce principe est de pouvoir mesurer les températures à l'aide d'un thermomètre.

Pour donner l'équivalent dans les milieux granulaires, Edwards a imaginé l'expérience suivante (cf. figure (III.6)) : deux poudres A et B sont disposées dans une boîte, séparées par une membrane souple et mobile les empêchant de se mélanger, mais suffisamment peu élastique pour ne pas fausser l'interaction entre les poudres. On pose alors la question : quelle est la position de l'interface? Selon l'hypothèse d'Edwards, la réponse est obtenue en égalant les compactivités des deux poudres :

$$X_A = X_B. \quad (11)$$

Cependant, la compactivité permet de fixer le volume en moyenne, et la position de l'interface déterminée par (3.1) est la position de l'interface après avoir moyenné sur un grand nombre de configurations des deux poudres. Un moyen de réaliser cela est donc de disposer la boîte contenant ces poudres sur un lit vibrant. Dans ce cas,

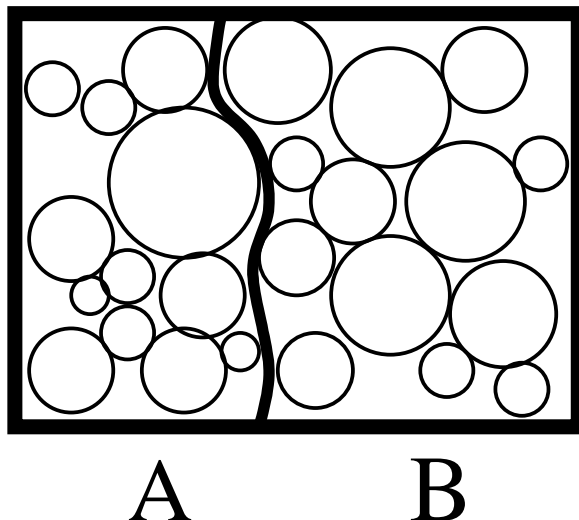


FIG. III.6 – Expérience de pensée d'Edwards. Les deux poudres A et B sont séparées par une membrane souple qui les empêche de se mélanger.

les échanges de volume entre les deux poudres ne sont plus asymétriques comme le sont les échanges d'énergie entre les poudres et le lit vibrant, et l'équilibration de ces échanges de volume conduit à l'égalité des compactivités.

La difficulté est qu'il est en pratique extrêmement difficile de calculer les fonctions Y (calcul canonique) ou S_{Edw} (calcul microcanonique) dans un milieu granulaire, même pour des cas simples de sphères dures à deux dimensions. Il est possible de calculer l'entropie pour des systèmes sur réseau très simplifiés. Monasson et Pouliquen ont calculé le nombre d'empilements possibles pour un ensemble d'hexagones sur un réseau triangulaire en forme de bande, dont la hauteur L tend vers l'infini et la largeur l est fixée [159]. Cependant, même dans le cas simple monodisperse, la limite $L \rightarrow \infty$ n'est pas bien définie et dépend de la valeur de L modulo l (compatibilité avec les conditions aux limites).

3.2 Extension de la mesure d'Edwards aux systèmes vitreux

L'hypothèse d'Edwards est la réponse la plus simple à la question suivante : dans un empilement granulaire, quels sont les rôles respectifs des différentes configurations possibles¹¹ ? Comme cela a été discuté dans le chapitre II, les minima locaux de l'énergie ralentissent considérablement la dynamique à très basse température. On peut alors se poser la question équivalente à celle posée par Edwards : quels sont les rôles respectifs des différents minima locaux de l'énergie dans la dynamique à très basse température ? Une réponse possible est celle donnée par Goldstein, c'est-à-dire que les échelles de temps lentes sont dominées par les structures inhérentes ;

¹¹Quand on parle d'empilement, il est redondant d'employer le terme métastable, puisqu'un empilement est par définition un état bloqué.

la décomposition de Stillinger et Weber ajoute que les minima locaux ont les mêmes bassins d'attraction. Ceci constitue la théorie des structures inhérentes.

À ce stade, il est instructif de discuter un exemple d'utilisation de la théorie des structures inhérentes par Crisanti et Ritort [106]. Ceux-ci ont appliqué cette théorie au ROM. Le ROM est un modèle de verre de spin complètement connecté appartenant à la classe des modèles discontinus tels le p-spin. La matrice d'interaction J_{ij} entre deux parmi les N spins d'Ising du système est une matrice symétrique, appartenant au groupe orthogonal $\mathcal{O}(N)$. Cette matrice est choisie aléatoirement (désordre gelé), la mesure de probabilité étant la mesure de Haar sur $\mathcal{O}(N)$. Crisanti et Ritort ont calculé l'entropie configurationnelle numériquement à une température $T = 0,2$ inférieure à la température de transition thermodynamique $T_S \approx 0,25$. Par des simulations Monte-carlo, ils ont également mis en évidence une violation de FDT typique des modèles 1RSB, c'est-à-dire avec deux échelles de temps bien séparées. Ils ont alors montré que dans la précision des données, la température effective est bien donnée par la dérivée partielle de l'énergie libre typique des structures inhérentes par rapport à l'entropie configurationnelle :

$$T_{Eff}^{-1} = \left. \frac{\partial s_c(f_{IS})}{\partial f_{IS}} \right|_T. \quad (12)$$

La conclusion de Crisanti et Ritort est que le fait d'avoir un nombre fini $N = 300$ de spins permet au système de franchir des barrières par activation, et que la séparation des échelles de temps est bien celle de la décomposition de Stillinger et Weber.

Ce résultat est plutôt surprenant. En effet, les études du modèle p-spin suggèrent qu'à température non nulle, ce sont les minima locaux de l'énergie libre qui jouent un rôle dominant. Il est donc étonnant que ce soient les structures inhérentes qui donnent la dynamique à grands temps. Il y a à cela une explication simple. En effet, les équations TAP s'écrivent pour le ROM [160, 161] :

$$m_i = \tanh \left[\beta \sum_j J_{ij} m_j - \beta G'(\beta(1-q)) m_i \right], \quad (13)$$

avec

$$G(x) = \frac{1}{2} \left[\sqrt{1+4x^2} - \ln \left(1 + \sqrt{1+4x^2} \right) - 1 - \ln 2 \right]. \quad (14)$$

Or, à $T = 0,2$, le paramètre d'ordre dynamique est déjà très proche de 1 : $q(T) \approx 0,99984$ et le terme $G'(\beta(1-q))$ est proche de 0,0008, alors que le terme $\sum_j J_{ij} m_j$ est d'ordre 1 dans le cas typique, donc à suffisamment basse température, le terme d'Onsager est négligeable, et les équations TAP sont approximativement les équations du champ-moyen de Weiss. De plus, les aimantations moyennes à $T = 0,2$ sont de l'ordre de $\tanh(5 \times 0,49) \approx 0,985$, donc à cette température, les états TAP ressemblent beaucoup à des structures inhérentes. En particulier, si le système reste longtemps dans un état TAP, il ressent la présence des nombreuses structures inhérentes qui sont au voisinage.

La similarité entre le scénario d'Edwards pour les granulaires d'un côté et les scénarii impliquant le paysage d'énergie ou d'énergie libre a été relevée par Kurchan

[162], qui en considérant les verres comme des systèmes athermaux a généralisé l'hypothèse d'Edwards à tous les systèmes vitreux à basse température. La différence entre des empilements de grains et des verres structuraux est que dans les premiers, les états bloqués sont des configurations dans lesquelles le système est attiré à chaque tape ; dans les verres structuraux, les minima locaux ne piègent pas le système, mais servent d'ossature à la dynamique, sur laquelle les trajectoires s'appuient. De plus, le scénario des structures inhérentes (tel que mis en œuvre par Sciortino et al. ou Crisanti et Ritort, par exemple) et le scénario "à la Edwards" sont légèrement différents. En effet, dans les simulations de Kob et al., par exemple, les structures inhérentes sont échantillonnées par des trempes à $T = 0$ depuis un temps t_w passé dans la phase vitreuse. Quand t_w est long, les minima obtenus sont ceux près desquels la trajectoire du système passe à t_w , et la taille de leur bassin d'attraction est prise en compte par la dernière trempe. Le scénario à la Edwards met tous les états bloqués sur un pied d'égalité. La description à l'aide d'une mesure plate sur tous les états bloqués possède donc comme unique information sur la dynamique le critère d'arrêt, à savoir quelles sont les caractéristiques nécessaires à une configuration bloquée pour ne plus évoluer selon la dynamique considérée, *sans information sur comment cette configuration est accédée*.

Les solutions dynamiques des modèles de verres de spins en champ moyen ont mis à jour la possibilité de définir une dynamique effective pour les degrés de liberté structuraux des systèmes vitreux. En particulier, la température effective joue le rôle d'une température dynamique ; pour deux grands temps bien séparés, la mobilité (en réponse à une petite force f) et la diffusion aléatoire d'un traceur disposé dans le fluide vérifient une relation d'Einstein

$$\langle (r(t) - r(t_w))^2 \rangle = T_{eff} \frac{\partial \langle r(t) - r(t_w) \rangle}{\partial f}. \quad (15)$$

Dans un fluide, l'addition d'un flot de cisaillement brise le bilan détaillé. Cependant, Kurchan, puis Berthier et al., ont montré en utilisant le paradigme du modèle p-spin que la température effective subsiste et possède toujours les propriétés d'une "vraie" température [17, 18, 20].

L'existence d'une température dynamique et sa relation avec les degrés de liberté lents lors de la compaction lente de particules à répulsion de cœur dur a été testée par Barrat et al. [163, 164] dans le modèle de Kob-Andersen (KA) [165], où l'existence d'une violation de FDT dans la phase vitreuse avait été constatée par Sellitto [166], et dans le modèle Tétris [167]. Dans ces modèles, la mesure de Gibbs est triviale, et la définition des états bloqués est d'origine dynamique (ou plutôt "cinétique", les mouvements locaux étant soumis à des contraintes). Barrat et al. ont étudié un modèle KA dans une boîte, en simulant la compression par le haut à l'aide d'un potentiel chimique élevé. Ils ont montré qu'une relation du type (15) est bien vérifiée. De plus, T_{eff} est différente de T et est égale à la température d'Edwards. Ils ont également comparé des fonctions de structure spatiales obtenues dynamiquement, dans l'ensemble de Gibbs et dans l'ensemble d'Edwards, pour le modèle KA et la compaction irréversible du modèle Tétris. Aux densités simulées, l'accord entre les mesures dynamiques et l'ensemble d'Edwards est bon. Ils ont aussi

comparé la mesure d'Edwards avec la mesure dynamique dans la dynamique de basse température du modèle d'Ising en champ aléatoire [168] (RFIM) à trois dimensions. Dans ce modèle, la dynamique est celle de domaines magnétiques qui croissent, leur parois étant accrochées par les champs aléatoires. Cette dynamique opère par activation et il s'ensuit une dynamique logarithmique qui ressemble à celle de la densification de poudres. Cependant, la symétrie \mathbb{Z}_2 est brisée pour la mesure d'Edwards à basse énergie, mais pas par la mesure dynamique, de sorte que l'ensemble d'Edwards est incapable de décrire la dynamique par la seule connaissance de l'énergie. Barrat et al. ont attribué cette incapacité au fait que deux copies d'un système (ayant évolué un certain temps) soumises à deux réalisations différentes du bruit restent corrélées très longtemps, alors que dans les modèles KA et Tétris, la corrélation décroît suffisamment vite vers zéro. Cette corrélation dans le RFIM est due à l'absence de brisure de symétrie par la dynamique durant les temps accessibles à la simulation. Si l'on suppose que la mesure d'Edwards du RFIM est qualitativement similaire à celle du RFIM sur les graphes aléatoires, à basse énergie, l'entropie d'Edwards $s(E, m)$ (à énergie E et aimantation m) en fonction de l'aimantation comporte deux maxima locaux à $m = -m(E)$ et $m = m(E)$, ainsi qu'un minimum à $m = 0$. Afin de tenir compte de la non brisure de symétrie, il faut donc restreindre la mesure d'Edwards à ce minimum local $m = 0$.

Colizza et al. [169, 170] ont montré l'existence de températures dynamiques lors de la compaction lente de systèmes homogènes sans gravité obtenus à partir des modèles KA et Tétris. Ils ont montré que la température dynamique peut être raisonnablement obtenue à partir de l'ensemble d'Edwards et que de plus celle-ci ne dépend pas de l'observable choisie pour la mesurer (au moins parmi les observables qu'ils ont utilisées). Ils ont également étudié le cas avec gravité, pour lequel la densité n'est plus homogène et la densification ajoute un biais dans la diffusion des particules qui rend difficile l'utilisation d'observables couplées à la direction verticale. De plus, du fait de la forte hétérogénéité de la densité, la connaissance a priori de tout le profil de densité est nécessaire pour caractériser les configurations obtenues dynamiquement [170].

Chapitre IV

Taper des verres de spins

Dans le chapitre précédent, les expériences de vibration des milieux granulaires et la description d'Edwards ont été présentées. Il est difficile de modéliser des milieux granulaires. En effet, plus la description de ceux-ci est réaliste, plus les simulations sont difficiles et longues. On peut opter pour des modèles sur réseau, qui ont pour avantage d'être plus facilement simulables, mais qui ne sont pas solubles analytiquement, sans toutefois être pleinement réalistes. Enfin, il existe des modèles phénoménologiques qui permettent d'obtenir des lois de compaction ou des diagrammes de ségrégation, mais qui ne sont pas basés sur une description microscopique. Afin de tester la validité de l'hypothèse d'Edwards, il est utile de disposer d'un modèle simple, possédant les ingrédients essentiels d'une dynamique de vibration modérée. Un tel modèle va être décrit dans ce chapitre.

1 Analogie entre les verres de spins et les milieux granulaires

La mesure d'Edwards est basée sur la croissance exponentielle du nombre d'empilements possibles d'un milieu granulaire, dont le logarithme donne l'entropie d'Edwards, qui est l'équivalent de l'entropie configurationnelle des verres structuraux. Les verres de spins possèdent également un nombre exponentiel d'états métastables, et ont pour avantage d'être des systèmes discrets. De plus, dans les systèmes à connectivité finie, il est possible de calculer le nombre d'états métastables ainsi que certaines de leur caractéristiques, par plusieurs méthodes, et de façon analytique à la limite thermodynamique. Enfin, les systèmes à connectivité finie ont pour avantage que chaque spin interagit avec petit nombre de voisins, ce nombre étant fixe, ce qui permet de simuler des systèmes de grande taille sans problèmes de mémoire dus à l'existence de sites de très grande connectivité.

Le modèle est défini par 4 paramètres : le nombre de spins N , la connectivité c , la dilution α des couplages $J = -1$ et le paramètre $p \in [0, \frac{1}{2}]$ introduit dans l'algorithme de "tapping", qui va être décrit dans le paragraphe suivant. Dans un premier temps, la dilution sera $\alpha = \frac{1}{2}$, le cas $\alpha < \frac{1}{2}$ sera étudié en détail plus loin.

1.1 Algorithme de “tapping”

L’algorithme de tapping reproduit la successions de tapes discrètes effectuées dans les expériences de vibration des groupes de Chicago et de Rennes. Ces expériences ont plusieurs phases. D’abord, l’échantillon est préparé dans une première configuration, riche en arches dans l’expérience de Knight et al.. La préparation d’un empilement aléatoire obtenu en lâchant les billes dans le cylindre suffit à l’étude de la courbe réversible, pourvu qu’on la démarre à Γ suffisamment large. Une fois l’empilement de départ obtenu, celui-ci est tapé. Les tapes sont bien séparées dans le temps, de sorte que le système a complètement relaxé au début d’un nouveau cycle excitateur. De plus, chaque tape consiste en deux étapes relativement bien distinctes ; l’excitation, puis la relaxation. Après l’excitation, le système est d’autant plus corrélé à l’état de repos qu’il a quitté que Γ est petit. Partant de l’hypothèse que cette description suffit à capter l’universalité de cette dynamique de vibration, nous allons appliquer celle-ci aux verres de spins. Même si le modèle est apparemment éloigné des milieux granulaires, la prise en compte de ces mécanismes nous permet d’introduire un nouveau paradigme pertinent pour l’étude de ces derniers, pourvu que le scénario d’Edwards soit suffisamment universel. Il s’agit d’une démarche similaire à celle qui a émergé après les travaux de Kirkpatrick et al. mettant à jour le lien formel entre les équations MCT schématiques et celles de la dynamique d’équilibre du modèle p-spin sphérique. L’algorithme est le suivant :

1. choisir au hasard une configuration parmi les 2^N possibles ;
2. faire évoluer le système à température nulle : choisir un spin au hasard, puis le retourner si cela fait diminuer strictement l’énergie, et itérer ce processus jusqu’à ne plus pouvoir le faire ;
3. “taper” le système : retourner successivement chaque spin avec probabilité p . Retourner à l’étape précédente.

Dans cet algorithme, l’étape {1. + 2.} correspond à la préparation du système dans une premier “empilement” aléatoire. Ensuite, la première itération de {3. + 2.} constitue la première tape. Une “expérience” de tapping est donc une succession du type 1., 2., 3., 2., 3., 2., 3., 2. \dots , où comme dans les expériences de vibration, l’unité de temps est égale à une tape. La paramètre p qui caractérise l’amplitude de l’excitation est l’analogie de Γ et ne change pas au cours de la simulation. Pour chaque valeur de p simulée, l’énergie $E(p, t)$ après $t - 1$ tapes a été mesurée. Remarquons que $\frac{1}{2}$ a été choisi pour valeur maximale de p , afin de tenir compte de la symétrie de renversement des spins qui a pour effet de rendre équivalent les valeurs p et $1 - p$. Remarquons que Berg et Mehta ont également utilisé les modèles de verres de spins, mais sur des hypergraphes (XOR-SAT homogène), sur lesquels ils ont repris la dynamique de tapping de façon légèrement différente [171, 172].

L’analogie avec les expériences de Chicago est résumée dans la table (IV.1).

| Empilements granulaires | Verres de spins |
|-------------------------|---------------------|
| États bloqués | États métastables |
| Chute sous gravité | Dynamique à $T = 0$ |
| Volume | Énergie |
| Γ | p |
| État le plus dense | État fondamental |

FIG. IV.1 – Analogie entre milieux granulaires et verres de spins, soumis à l’algorithme de tapping.

1.2 Dynamique de l’algorithme de tapping

a) Vers le régime stationnaire

Selon la valeur du paramètre d’excitation p , le comportement dynamique obtenu est différent. Pour $p = \frac{1}{2}$, la configuration obtenue après la phase d’excitation est totalement aléatoire, de sorte que $p = \frac{1}{2}$ est un tapping “infini”, qui correspondrait à la limite $\Gamma \gg 1$ des expériences de Chicago. Dans ce cas, le régime stationnaire est obtenu dès le début et l’histogramme des énergies obtenues donne la distribution de probabilité de l’énergie obtenue après la “chute initiale” (étape {1. + 2.} de l’algorithme de tapping). Lorsque p diminue, le temps pour atteindre le régime stationnaire (qui sera appelé “temps d’équilibration”) augmente, atteignant 10^5 à $p = 0,05$ pour $c = 3$. En dessous de $p \approx 0,05$, le régime stationnaire devient difficile à atteindre, le système étant en permanence “hors d’équilibre”. L’énergie en fonction du nombre de tapes est montré sur la figure (IV.2) pour $c = 3$ et $p = 0,001$.

Dans les cas où le temps d’équilibration est plus grand que les simulations, la loi empirique qui semble le mieux décrire l’évolution temporelle de l’énergie est la loi logarithmique utilisée par Knight et al.. Cependant ici, il ne semble pas qu’un argument du type volume libre puisse être utilisé simplement pour décrire cette évolution lente.

b) Dynamique stationnaire

Pour $c = 3$, un état stationnaire de durée assez longue peu être obtenu lorsque p est supérieur à 0,05. Pour les plus faibles valeurs de p , l’énergie doit être obtenue en faisant diminuer lentement la valeur de p de façon à atteindre le régime stationnaire pour chaque valeur. Les fonctions de corrélation $C(t, t') = \frac{1}{N} \sum_i \overline{\langle s_i(t) s_i(t') \rangle}$ permettent de s’assurer que la dynamique est bien stationnaire. Dans ce cas, elles doivent ne dépendre que de la différence $t - t'$ et tendre vers 0 quand celle-ci tend vers l’infini, ce qui est le cas pour toutes les valeurs de p pour lesquelles l’énergie dans l’état stationnaire a été mesurée.

La variation de l’énergie en fonction de p pour $c = 3$ est représentée sur la figure (IV.3). Cette énergie est une fonction monotone de p , de la même façon que $\phi(\Gamma)$. L’allure est différente du fait que ni Γ ni p ne sont des grandeurs intensives “thermodynamiques” conjuguées respectivement à ϕ et à E . Afin de représenter la variation de $E(p)$ en fonction d’une grandeur plus représentative $X(p)$, analogue de

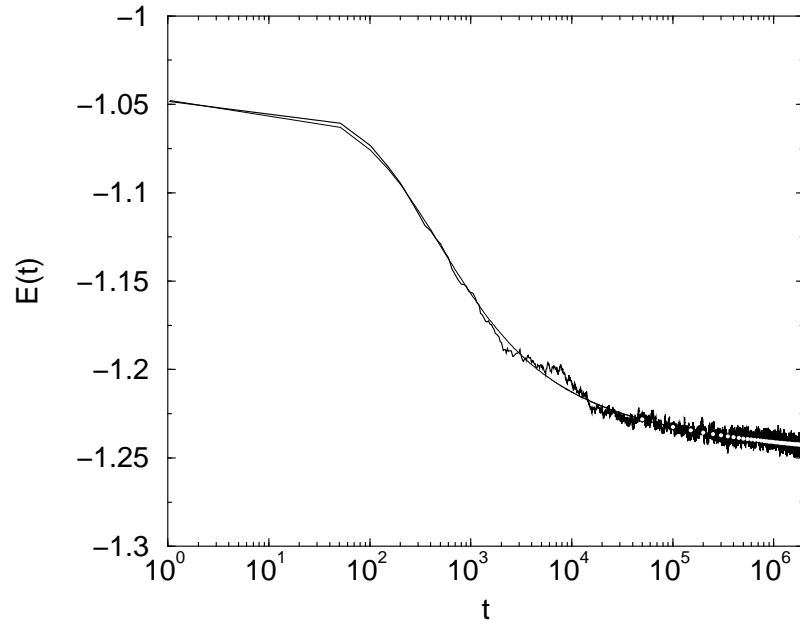


FIG. IV.2 – Évolution de l'énergie en fonction du temps en nombre de tapes, pour $c = 3$ et $p = 0,001$. Une loi d'évolution logarithmique du type (1) est représentée en comparaison (avec des symboles à grand t pour mieux la visualiser).

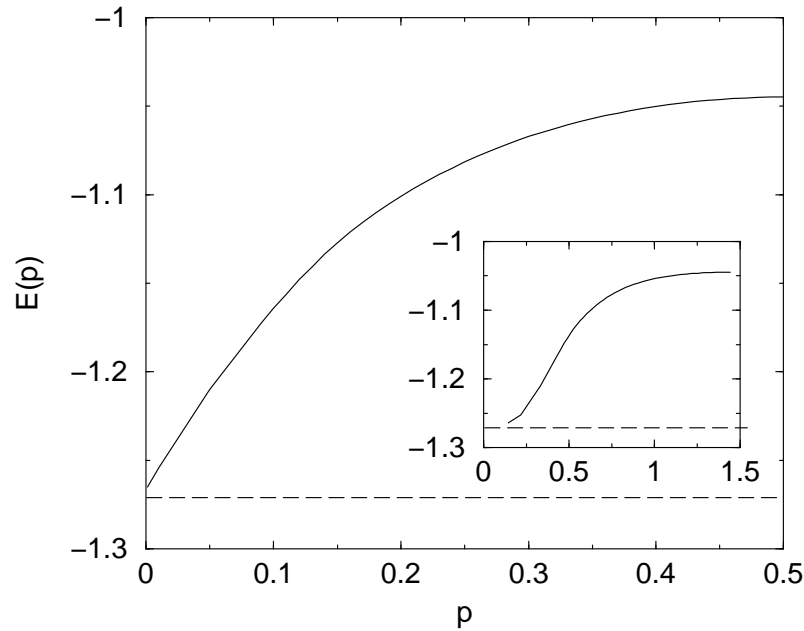


FIG. IV.3 – Énergie dans le régime stationnaire en fonction de l'intensité du tapping, pour $c = 3$. L'encadré représente la même courbe, avec en abscisse X , défini par $p = e^{-\frac{1}{X}}$. Les lignes pointillées indiquent la position de l'énergie du fondamental estimée par la brisure de symétrie des répliques à un pas.

la température, on peut estimer le temps de relaxation τ . Celui-ci varie selon une loi de puissance $\tau \sim p^{-a}$, avec $a \approx 3$ pour $c = 3$, et si l'on suppose un comportement activé $\tau \sim e^{\frac{\Delta E}{X}}$, on obtient $X(p) \propto -\frac{1}{\ln p}$. L'allure de $E(p)$ en fonction de $X(p)$ est représenté sur la figure (IV.3) et ressemble plus à celle obtenue dans les expériences de vibrations.

Dans le cadre de ce modèle, le régime stationnaire est toujours réversible. En effet, dans les milieux granulaires, la branche irréversible est obtenue grâce à la présence d'arches, ces arches étant possibles grâce à l'existence d'un seuil de friction. Ce seuil de friction impose que l'excitation fournie localement au système soit supérieure à un seuil afin de réarranger les grains. Ici, il n'y a pas de seuil de friction, un spin état retourné avec probabilité p , sans autre considération. Il est possible d'introduire un seuil de friction de façon arbitraire, par exemple en assignant à chaque spin s_i un seuil $r_i \in [0, r_m]$, où $r_m < \frac{1}{2}$ représente la friction maximale [172]. Lors de la phase d'excitation, le spin s_i n'est renversé que si $r_i < p$. L'introduction de ce seuil donne une branche irréversible située entre $p = 0$ et $p = r_m$. Cependant, la construction de cette branche irréversible est quelque peu ad-hoc, en particulier du fait que l'état initial (i.e. à $t = 0$) est l'état correspondant au tapping maximum $p = \frac{1}{2}$, alors que dans les expériences de Chicago, une déposition séquentielle est nécessaire pour créer des arches. Il ne sera donc question que du régime réversible.

Lorsque l'intensité de tapping est faible, les fluctuations d'énergie durant la dynamique stationnaire sont corrélées pendant de longues périodes de temps, comme c'est le cas dans les expériences de Chicago [149]. Dans ces expériences, les fluctuations se décorrèlent via des avalanches : favorisées par les murs, des structures peu stables sont créées par la vibration, jusqu'à ce qu'elles rompent en formant une avalanche. Ici, il n'y a pas de murs, mais certains spins appartiennent à des structures instables ; il s'agit de spins qui sont déstabilisés par le retournement d'un de leurs voisins. En particulier, lorsque la connectivité est paire, une fraction des spins ont leur champ local nul, et si l'un de leur voisin de même signe qu'eux change, ceux-ci deviennent instables. Lorsque la connectivité augmente, la probabilité que deux sites de ce type soient reliés augmente, de sorte que la probabilité qu'un voisin d'un spin qui a été retourné devienne instable augmente. Sur la figure (IV.4), le spectre de puissance des fluctuations d'énergie durant une simulation est représenté en fonction du temps pour $c = 8$, pour différents octaves pour $p = 0,001$. Ce spectre caractérise la corrélation des fluctuations durant un intervalle de temps Δt . La transformée de Fourier discrète des fluctuations de densité pendant cet intervalle de temps est

$$\widetilde{\delta E}(t, \omega) = \frac{1}{\Delta t} \sum_{t'=t-\Delta t}^t (E(t) - E(t')) e^{i\omega t'} \quad (1)$$

et le spectre de puissance est [149] $S(t, \omega) = |\widetilde{\delta E}(t, \omega)|^2$. Sur la figure (IV.4), on remarque qu'à certains instants ce spectre présente des pics, sur plusieurs décades. À ces instants, l'énergie fluctue brutalement du fait de la propagation de l'instabilité le long de chaînes de spins de champ local nul. Ce spectre est néanmoins moins corrélé que celui observé dans les expériences de Chicago, du fait de l'absence de phénomènes de parois.

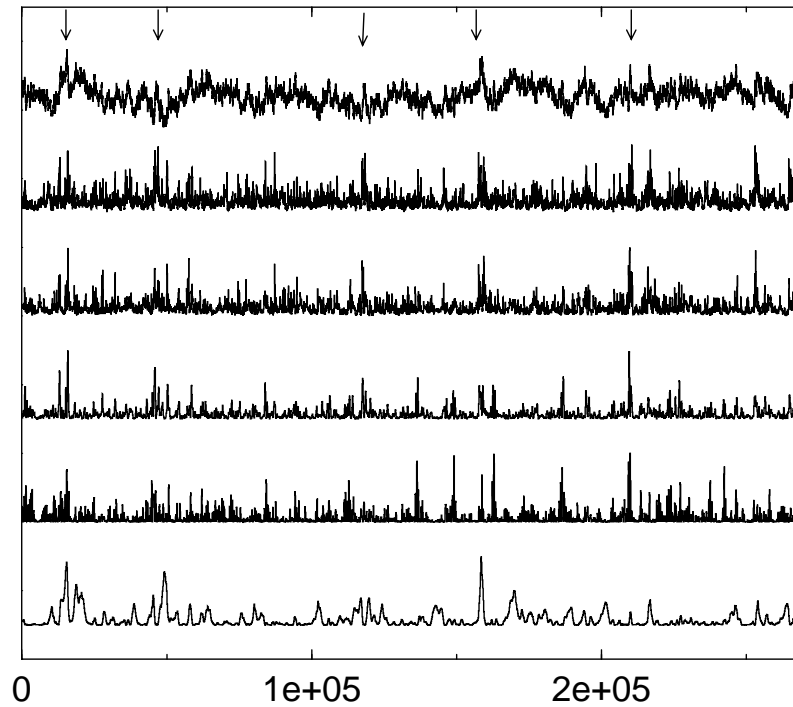


FIG. IV.4 – Spectre de puissance des fluctuations d’énergie en fonction du temps, pour $c = 8$, $p = 0,001$. L’intervale de temps est $\Delta t = 1024$, et chaque courbe est moyennée sur un octave ($1/1024 - 2/1024, \dots, 16/1024 - 31/1024$, de bas en haut), puis divisée par son maximum et décalée vers le haut pour plus de lisibilité. La courbe la plus haute donne les fluctuations de densité, les flèches indiquant les plus fortes fluctuations.

1.3 Mesure d’Edwards

Le modèle, basé sur l’algorithme de tapping est idéal pour tester l’hypothèse d’Edwards dans les milieux granulaires. Ce paragraphe va donner une description brève de la façon dont cette hypothèse peut être illustrée dans le cadre de ce modèle simple. Cette hypothèse sera mise à l’épreuve dans des paragraphes ultérieurs. Nous disposons ici de configurations bloquées, qui sont les états métastables, aux quelles est associée une entropie. Le scénario décrit par Edwards dans les milieux granulaires établit une analogie entre le rôle du volume et celui de l’énergie. L’entropie configurationnelle $s_c(E)$ sera donc appelée “entropie d’Edwards” et notée $s_{Edw}(E)$. Il est possible d’y associer une “température d’Edwards”

$$\frac{1}{T_{Edw}} = \frac{\partial s_{Edw}}{\partial E}. \quad (2)$$

Cette température d’Edwards est l’analogie dans notre modèle de la compacité. L’hypothèse d’Edwards dans ce contexte revient donc à identifier la mesure échantillonnée dans le régime stationnaire à la mesure plate sur les états métastables. En particulier, pour des grands systèmes, la mesure de l’énergie moyenne $E(p)$ dans les simulations suffit à déterminer toutes les valeurs moyennes des autres grandeurs

accessibles, par l'usage de la mesure plate, sans les mesurer lors des simulations.

Cette mesure traduit dans l'ensemble canonique l'existence d'un multiplicateur de Lagrange $\beta(p)$ fixant l'énergie moyenne à $E(p)$. La moyenne d'une observable O s'exprime alors à partir de la fonction de partition restreinte aux états métastables :

$$\begin{aligned}\langle O \rangle_{Edw} &= \frac{1}{Z_{Edw}} \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta(p)H(\mathcal{C})} O(\mathcal{C}) \\ Z_{Edw} &= \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta(p)H(\mathcal{C})}\end{aligned}\tag{3}$$

où la somme est restreinte aux configurations \mathcal{C} métastables. Puisque l'énergie est une fonction décroissante de p , on s'attend à ce que $\beta(p)$ soit une fonction strictement décroissante de p . En particulier, ce multiplicateur est relié à la température d'Edwards via

$$\frac{1}{\beta(p)} = T_{Edw}(E(p)).\tag{4}$$

Remarquons que dans le présent modèle, la nature de l'excitation fournie à chaque tape permet de généraliser l'hypothèse d'Edwards aux configurations excitées obtenues lors des tapes. En effet, si une configuration bloquée d'énergie E est tapée à l'amplitude p , l'énergie moyenne de la configuration obtenue après la phase d'excitation et avant la relaxation est $(1 - 2p)^2 E$. L'excitation étant totalement aléatoire, la distribution de l'énergie de l'état excité, moyennée sur toutes les réalisations des heuristiques utilisées pour renverser ou non chaque spin, est identique à la distribution typique dans la limite thermodynamique. La mesure correspondante est donc obtenue à partir de la mesure sur les états métastables en effectuant la substitution $E \rightarrow (1 - 2p)^2 E$; dans le cadre de la mesure d'Edwards, cette mesure est donc plate.

2 Modèles unidimensionnels

2.1 La chaîne d'Ising

Un graphe aléatoire de connectivité 2 n'a plus des boucles de taille d'ordre $\ln N$, mais est constitué d'un nombre fini de boucles de taille d'ordre N , et c'est donc un système unidimensionnel à la limite thermodynamique. Dans ce cas, les couplages étant ± 1 , ceux-ci peuvent être éliminés via des transformations de jauge locales, et le système obtenu a la même limite thermodynamique que la chaîne d'Ising décrite par l'hamiltonien $\mathcal{H} = -\sum_i s_i s_{i+1}$. Cet hamiltonien est le plus simple que l'on peut imaginer, et sa thermodynamique est triviale. Néanmoins, il est moins trivial lorsqu'il est soumis à l'algorithme de tapping. En particulier, grâce à la définition (4) des états métastables, il existe un nombre exponentiel d'états métastables. Un état métastable est une séquence de domaines de spins $+1$ et de spins -1 de longueurs au moins égales à 2 ; si un domaine est constitué d'un seul spin, celui-ci est instable. On peut décrire ces états métastables en terme de murs de domaines : $\sigma_i = \frac{1 - s_i s_{i+1}}{2}$ (un mur de domaine existe dans le cas $\sigma = 1$). L'hamiltonien est dans ces termes : $\mathcal{H} = -N + 2 \sum_i \sigma_i$. Retourner un spin est donc équivalent à faire s'annihiler les

deux murs de domaines qui lui sont adjacents, et un état métastable est donc une succession de murs de domaines isolés. Un exemple de relaxation dans cette image des murs de domaines est représenté sur la figure (IV.5)

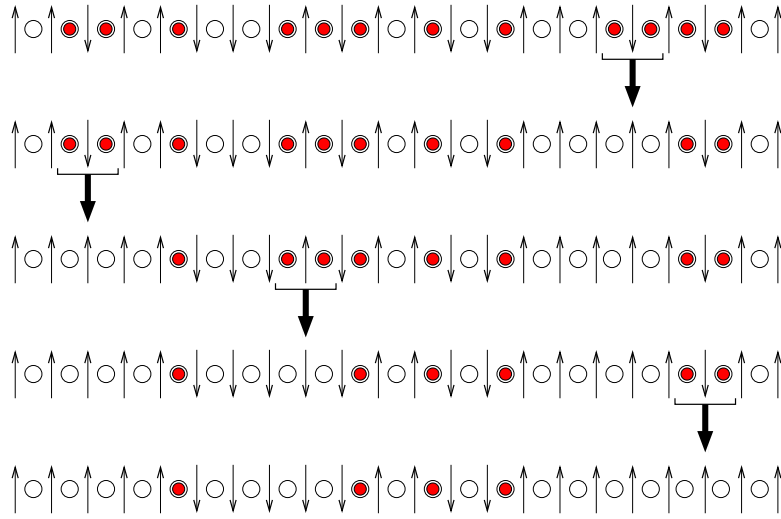


FIG. IV.5 – Exemple de relaxation vers un état métastable. Les murs de domaines sont représentés par des points plein. À chaque étape, les deux murs adjacents qui sont annihilés sont sous-lignés. Dans la configuration finale, tous les murs de domaines sont isolés.

Le nombre d'états métastables d'énergie E est donc le nombre de façons de placer q murs isolés sur N sites, avec la contrainte $NE + N = 2q$. Ce nombre est simplement :

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{MS}(E) &= 2 \binom{N - q - 1}{N - 2q - 1} \\ &\sim e^{Ns_c(E)} \end{aligned} \quad (5)$$

$$s_c(E) = \frac{1 - E}{2} \ln \left(\frac{1 - E}{2} \right) - \frac{1 + E}{2} \ln \left(\frac{1 + E}{2} \right) + E \ln(-E)$$

L'entropie configurationnelle $s_c(E)$ est convexe, et son support est $E \in [-1, 0]$. Elle atteint son maximum $s_c = \ln \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ en $E^* = -\frac{1}{\sqrt{5}}$.

a) Dynamique des murs de domaines

On définit un “domaine de murs” de taille M comme une suite de M murs adjacents, délimitée par l'absence de murs à ces deux extrémités. La connaissance de la distribution $P_N(M)$ de la longueur M des domaines dans l'état aléatoire initial (c'est-à-dire dans l'étape 1. de l'algorithme de tapping) permet de caractériser analytiquement les états métastables obtenus après la première dynamique à $T = 0$ [173, 174, 175]. En effet, lorsque deux murs adjacents sont annihilés, les dynamiques des murs situés à gauche et de ceux situés à droites sont indépendantes entre-elles.

Une configuration aléatoire initiale est une succession de domaines de murs séparés par des régions vides de murs. La distribution (l'aléatoire étant contenu dans le choix de l'ordre d'annihilation des murs) des positions des murs dans l'état métastable obtenu après blocage de la dynamique est donc le produit des distributions des distributions obtenues en prenant chaque domaine séparément. Considérons donc un domaine de M murs. Lorsqu'on annihile la première paire de murs adjacents, il reste deux domaines séparés de M_1 et $M_2 = M - 2$ murs, dont les évolutions à $T = 0$ sont maintenant décorréelées et le nombre n_M de murs isolés restant lors du blocage de la dynamique vérifie donc

$$n_M = n_{M_1} + n_{M_2}, \quad (6)$$

et les distributions de n_{M_1} et n_{M_2} sont indépendantes. Si l'on définit $\chi(M) = \langle n_M \rangle$, la contribution du domaine de longueur M dans la configuration aléatoire initiale à l'énergie est

$$E(M) = -1 + 2\chi(M). \quad (7)$$

De plus, d'après (6), $\chi(M)$ vérifie

$$\begin{aligned} \chi(0) &= 0, \\ \chi(M) &= \frac{1}{M-1} \sum_{k=1}^{M-1} (\chi(k-1) + \chi(M-k-1)), \end{aligned} \quad (8)$$

où $\frac{1}{M-1}$ est la probabilité d'annihiler une paire de murs adjacents parmi les $M-1$ paires possibles. Si l'on introduit la fonction génératrice $g(z) = \sum_M \chi(M)z^M$, celle-ci vérifie

$$\begin{aligned} g(0) &= 0, \\ z \frac{dg}{dz} &= \left(\frac{2z^2}{(1-z)^2} + \frac{1}{z} \right) g(z), \end{aligned} \quad (9)$$

ce qui donne

$$g(z) = \frac{z \exp(-2z)}{(1-z)^2}. \quad (10)$$

On peut alors calculer l'énergie obtenue dans la configuration bloquée atteinte par un système de taille N en sommant les contributions de tous les domaines séparés dans la configuration aléatoire initiale. En effet, si l'on note $I_i(M)$ la fonction indicatrice de l'existence d'un domaine de murs de taille M commençant en i (c'est-à-dire $\sigma_{i-1} = 0$, $\sigma_{i+M+1} = 0$ et $\sigma_{i+j} = 1$ pour $j \in [0, M-1]$), l'énergie initiale totale est $\mathcal{E}_0 = -N + 2 \sum_i \sum_M I_i(M)$. Supposons que la configuration initiale aléatoire ne soit pas tout à fait aléatoire, mais que l'on impose qu'un mur de domaine soit présent en un site avec probabilité $a \in [0, 1]$, et absent avec probabilité $1-a$, tous les sites étant indépendants. Le choix $a = \frac{1}{2}$ correspond à un choix totalement aléatoire, $a = 0$ correspond à tous les spins dans le même sens (configuration ferromagnétique, de plus basse énergie), et $a = 1$ correspond à tous les spins dans le sens opposé de leurs voisins (configuration antiferromagnétique, de plus haute énergie). Du fait de

l'invariance par translation, la valeur moyenne de $I_i(M)$ sur toutes les conditions initiales $K(M)$ ne dépend ni de N ni de i à la limite thermodynamique :

$$K(M) = (1 - a)^2 a^M \quad (11)$$

L'énergie moyenne des métastables ainsi obtenus est donc :

$$\begin{aligned} E_f &= -1 + 2 \sum_{M=1}^{\infty} K(M) \chi(M) \\ &= -1 + 2(1 - a)^2 g(a) \\ &= -1 + 2ae^{-2a} \end{aligned} \quad (12)$$

Il apparaît donc que :

- l'énergie E_f n'est pas une fonction monotone de a . Elle atteint son maximum $E_f \approx -0,6321$ pour $a = \frac{1}{2}$;
- quelle que soit la valeur de a , cette énergie est plus basse que l'énergie E^* pour laquelle le nombre d'états métastables est le plus grand.

La résolution (partielle, puisqu'elle ne donne que l'énergie) de la dynamique à température nulle avec des conditions initiales géométriques permet de déterminer avec une excellente précision l'énergie $E(p)$ pour toutes les valeurs de p . La contribution d'un spin s_i à l'énergie totale est $x_i = -s_i (s_{i-1} + s_{i+1})$, qui peut avoir en général les valeurs -2 , 0 et 2 , dont seulement -2 et 0 dans un état métastable. On note respectivement $u(t)$, $v(t)$ et $w(t)$ les probabilités que cette contribution vaille respectivement -2 , 0 et 2 , avant la t^e tape, et avec les mêmes lettres primées pour les probabilités correspondantes dans l'état excité dû à cette tape. Il est clair que $w(t) = 0$ et $u(t) + v(t) = 1$ pour tout t . De plus, avec $q = 1 - p$:

$$\begin{aligned} u'(t) &= (1 - 3pq)u(t) + pqv(t), \\ v'(t) &= 2pqu(t) + (1 - 2pq)v(t), \\ w'(t) &= pq. \end{aligned} \quad (13)$$

Si l'on suppose que dans les état excités par les tapes, la distribution des longueurs des domaines de murs est exponentielle, on peut de plus établir une relation entre $\{u'(t), v'(t)\}$ et $\{u(t+1), v(t+1)\}$. En effet, la probabilité qu'un domaine de murs ait une longueur n , conditionné à $n \geq 1$ est

$$\begin{aligned} P(n|n \geq 1) &= \left(\frac{P(\bullet\bullet)}{P(\bullet\circ) + P(\bullet\bullet)} \right)^{n-1} \frac{P(\bullet\circ)}{P(\bullet\circ) + P(\bullet\bullet)} \\ &= \left(\frac{w'(t)}{\frac{v'(t)}{2} + w'(t)} \right)^{n-1} \left(\frac{\frac{v'(t)}{2}}{\frac{v'(t)}{2} + w'(t)} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Et par la même méthode que celle qui mène à (12), l'énergie avant la $(t + 1)^e$ tape est obtenue :

$$\begin{aligned}
 E(t + 1) &= -1 + v(t + 1) \\
 &= -1 + 2 \sum_{n \geq 1} P(n \geq 1) P(n | n \geq 1) \chi(n) \\
 &= -1 + \frac{v^2}{2w} g \left(\frac{2w}{v + 2w} \right).
 \end{aligned} \tag{15}$$

Finalement, si on pose $U(p) = (1 - 2p)^2$, on obtient une relation de récurrence sur v :

$$v(t + 1) = (1 - U(p) + U(p)v(t)) \exp \left(-\frac{1 - U(p)}{1 - U(p) + U(p)v(t)} \right). \tag{16}$$

Remarquons que la dépendance explicite en p est contenue dans $U(p)$, ce qui reflète l'invariance par $p \rightarrow 1 - p$. Finalement, l'énergie dans le régime stationnaire à amplitude p vérifie

$$E(p) + 1 = (1 - U(p) + U(p)(E(p) + 1)) e^{-\frac{1 - U(p)}{1 - U(p) + U(p)(E(p) + 1)}}. \tag{17}$$

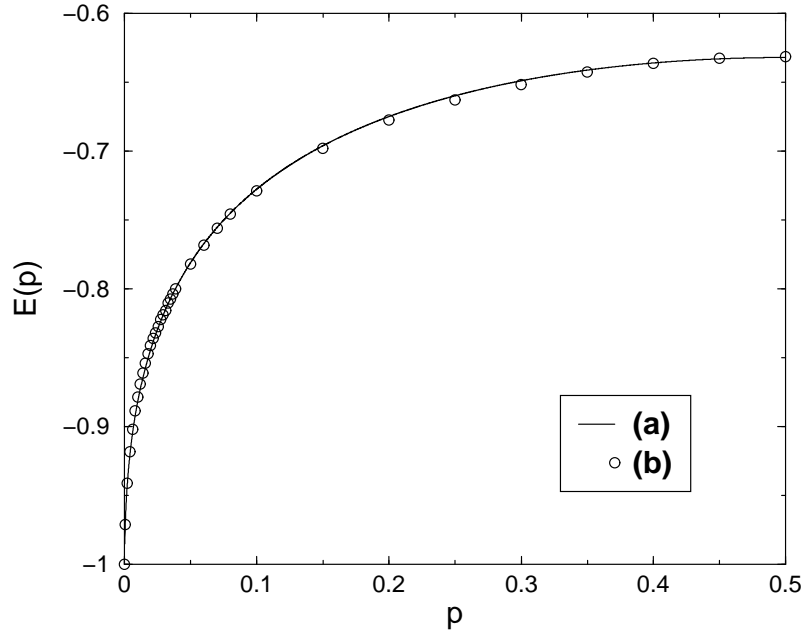


FIG. IV.6 – Comparaison entre (a) : l'énergie $E(p)$ calculée à partir de (17), et (b) : l'énergie moyenne $E(p)$ mesurée dans l'état stationnaire dans les simulations avec amplitude de tapping p , pour un système de 10^6 spins.

La comparaison entre l'énergie calculée à partir de (17) et les résultats des simulations est présentée sur la figure (IV.6) ; l'accord est excellent, mais quelques commentaires s'imposent :

- même si l'énergie de l'état stationnaire obtenue est bonne, la relation de récurrence (16) n'est pas valable dans le régime transitoire précédent le régime stationnaire, car la distribution des domaines n'y est pas du tout exponentielle, et donc cette équation ne permet pas de décrire la dynamique vers l'état stationnaire ;
- entre $p \approx 0,1$ et $p \approx 0,4$, une différence légèrement visible à l'œil nu subsiste entre le calcul analytique et les simulations. Cette différence tient au fait que la distribution des longueurs des domaines de murs n'est pas tout à fait exponentielle dans les simulations ; ceci signifie que dans ce cas, la mesure sur les états excités, donc celle sur les états bloquée aussi, n'est pas complètement plate. Cependant, l'effet de cette déviation sur $E(p)$ est très faible.
- l'énergie peut être développée au voisinage de $p = 0$: $E(p) = -1 + \sqrt{2p} + O(p)$.

L'image des murs de domaines permet également d'extraire le comportement dynamique lorsque p tend vers zéro. En effet, lorsque p est très faible, la probabilité de créer des grands domaines de murs est très faible, d'autant plus que lorsque l'énergie est basse, la distance moyenne d entre les murs est de l'ordre de $\frac{1}{E+1}$. Ainsi, si p est très petit, lors d'une excitation, les mécanismes les plus probables sont : soit deux murs adjacents sont créés dans une zone vide de murs, auquel cas ceux-ci sont annihilés à la relaxation suivante, soit deux murs sont créés à côté d'un mur existant, mais isolé, soit un mur est déplacé. Seuls les deux derniers mécanismes contribuent à changer la configuration en faisant diffuser les murs des domaines, sans changer l'énergie. Les changements d'énergie interviennent lorsque deux murs de domaines se rencontrent du fait de leur diffusion et s'annihilent. À très faible amplitude de tapping, cette dynamique est formellement identique à la croissance de domaines du modèle d'Ising à une dimension à basse température, pour laquelle l'énergie diminue comme $\frac{1}{\sqrt{t}}$ [176, 177, 178, 179]. Pour le tapping à une dimension, le régime transitoire pour les faibles valeurs de p s'accorde bien avec cette loi. De plus, la constante de diffusion effective est proportionnelle à p , et donc le temps de relaxation est de l'ordre de $\frac{1}{p}$.

b) Mesure d'Edwards

À une dimension, il est simple de calculer analytiquement les valeurs moyennes de diverses quantités dans l'ensemble d'Edwards (i.e. l'ensembles des états métastables). Nous avons calculé en particulier :

- les fluctuations de l'énergie : $c = N \langle (E^2) - \langle E \rangle^2 \rangle$;
- les fonctions de corrélation $C(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle$ et les fonctions de corrélation de lien $D(r) = \langle s_i s_{i+1} s_{i+r} s_{i+r+1} \rangle$;
- la distribution des tailles des domaines de spins.

Le calcul, exposé dans la publication 2 est effectué en utilisant la matrice de transfert [180]. L'énergie est reliée à $a = \exp(\beta)$ par :

$$E = \frac{a}{\sqrt{a^2 + 4}}. \quad (18)$$

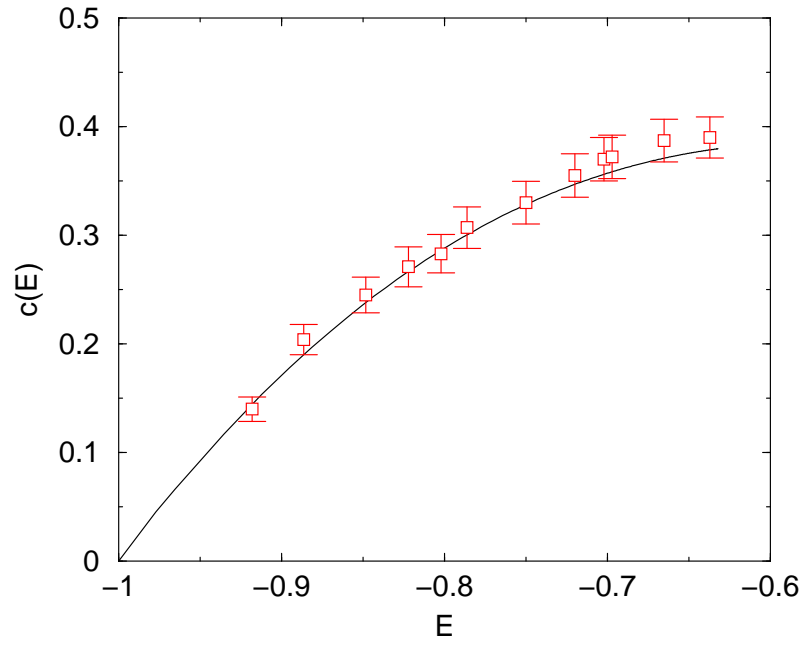


FIG. IV.7 – Fluctuations de l'énergie en fonction de l'énergie. Les carrés sont les résultats des simulations numériques, et la ligne continue le calcul à partir de la mesure d'Edwards.

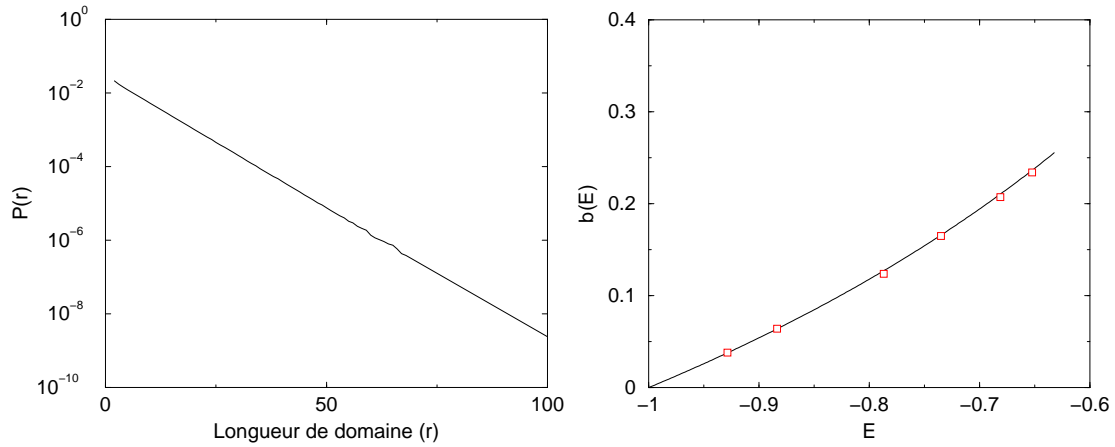


FIG. IV.8 – Distribution des longueurs de domaines. À gauche : distribution obtenue pour $p = 0, 1$. À droite : comparaison de la valeur du coefficient $b(E)$ de (22) calculé à partir des simulations (carrés) et de la mesure d'Edwards (ligne continue).

Les fluctuations de l'énergie sont alors $c = -E(1 - E^2)$. Les fonctions de corrélations sont

$$D(r) = E^2 + (1 - E^2) \left(\frac{E + 1}{E - 1} \right)^r, \quad (19)$$

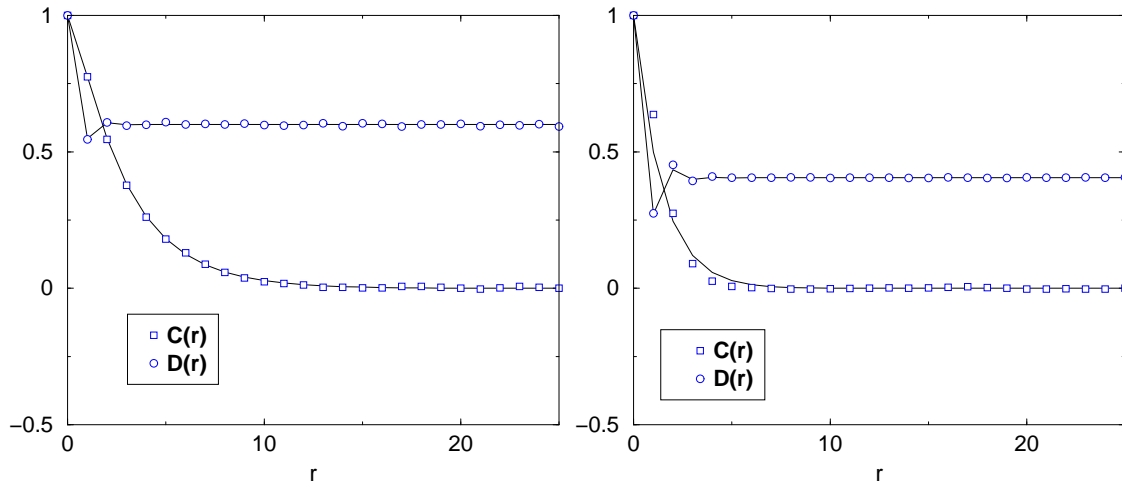


FIG. IV.9 – Comparaison entre les fonctions de corrélation $C(r)$ et $D(r)$ obtenues à partir de l'ensemble d'Edwards (ligne continue) et des simulations (symboles), pour $p = 0,06$ (à gauche) et $p = 0,4$ (à droite).

et

$$C(r) = A \left(\frac{u}{t_0} \right)^r + (1 - A) \left(\frac{1}{ut_0} \right)^r, \quad (20)$$

avec

$$\begin{aligned} t_0 &= \frac{a + \sqrt{a^2 + 4}}{2}, \\ u &= u = \frac{a + \sqrt{a^2 - 4}}{2}, \\ A &= \frac{u^2 t_0^2 - 1}{(u^2 - 1)(t_0^2 + 1)}. \end{aligned} \quad (21)$$

Enfin, la distribution des longueurs des domaines est

$$\begin{aligned} P(r) &= \left(\frac{1 + E}{1 - E} \right) \left(\frac{-2E}{1 - E} \right)^{r-2} \theta(r - 2) \\ &\equiv a(E) \exp(-b(E)r) \theta(r - 2). \end{aligned} \quad (22)$$

Afin de tester la capacité de la mesure plate à décrire les quantités stationnaires calculées ici, nous avons mesuré leurs valeurs moyennes le long de simulations de tapping. Les moyennes sont déterminées sur des systèmes de $N = 2 \times 10^5$ spins, pour des temps plus grand qu'un temps $t_s = 10000$ afin d'assurer la stationnarité, avec une durée de mesure $t_m = 10^5$. La moyenne d'une grandeur O est

$$\langle O \rangle = \frac{1}{t_m} \sum_{t=t_s+1}^{t_s+t_m} O(t). \quad (23)$$

Les temps de corrélation dans l'état stationnaire pour les amplitudes de tapping utilisées varient entre 1 ($p = 0,5$) et 50 ($p = 0,01$), de sorte que le nombre de configurations indépendantes varie entre 2000 et 100000. Les résultats des simulations sont comparés sur les figures (IV.7), (IV.8) et (IV.9).

La comparaison des résultats numériques avec ceux estimés à partir de la mesure plate sont très bons. Ceux-ci sont d'autant meilleurs que l'amplitude de tapping est faible, comme il a été observé dans d'autres modèles de compaction [181, 163], où la mesure d'Edwards a donné d'excellents résultats pour les plus grandes densités. Dans ce modèle unidimensionnel, la dynamique étant contrôlée à l'ordre p par la diffusion et l'annihilation de murs de domaines, et il est donc possible que cela instaure un bilan détaillé "effectif" à cet ordre. Dans la limite opposée $p = \frac{1}{2}$, De Smedt et al. ont calculé l'entropie dynamique en fonction de l'énergie ainsi que les fonctions de corrélations spatiales [175]. Il ont montré que la mesure d'Edwards n'est pas exacte, et qu'en particulier les fonctions de corrélations obtenues dynamiquement ne décroissent pas exponentiellement avec la distance, mais de façon beaucoup plus rapide (comme $\frac{1}{r}$). Cependant, pour ce modèle, la description donnée par la mesure d'Edwards est correcte, même pour des valeurs assez grandes de p . En particulier, dès que $p < \frac{1}{2}$, les fonctions de corrélation spin-spin décroissent exponentiellement sur une distance bien captée par la mesure d'Edwards.

2.2 Modèle de déposition

a) Modèles unidimensionnels à contraintes cinétiques

Le fait que le régime stationnaire du modèle d'Ising à une dimension soumis au tapping semble être raisonnablement bien décrit par la mesure d'Edwards peut être attribué au fait que la dynamique de tapping est dominée par les effets d'ordre p . Dans ce cas, celle-ci peut être mise en correspondance avec la dynamique du modèle d'Ising unidimensionnel à basse température, dont le régime stationnaire est dominé par les fluctuations des tailles des grands domaines. Certains modèles, comme le modèle de Fredrickson-Andersen (FA) ont une dynamique qui, à basse température, est ralentie par l'addition de contraintes cinétiques. Ces contraintes, qui interdisent certains mouvements locaux, contribuent à élargir les bassins d'attraction de certains minima, au détriment d'autres. Cet effet a été exploité par Crisanti et Ritort pour tester la théorie des structures inhérentes sur ces modèles [108, 110]. Le modèle FA à une dimension est défini de la façon suivante : des particules sont déposées sur un réseau unidimensionnel. Le nombre d'occupation n_i du site i vaut 0 ou 1, selon que ce site est vide ou occupé par une particule. L'hamiltonien ne comporte pas d'interactions : $\mathcal{H} = -\sum_i n_i$, et l'état fondamental est donc l'état dans lequel chaque site est occupé par une particule. Le système est préparé dans un état aléatoire, par exemple en mettant une particule dans chaque site avec probabilité $\frac{1}{2}$. La dynamique qui suit est une dynamique de Metropolis, avec des contraintes cinétiques, définies par le taux d'acceptation A du retrait ou du dépôt d'une particule. La probabilité de transition en un site est de la forme $W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = A \min(1, e^{-\beta\Delta E})$, où $\Delta E = 2n_i - 1$, et $A = 1 - an_{i-1} - (1 - a)n_{i+1}$, où $a \in [0, 1]$. Le mouvement n'est autorisé que si l'un des sites voisins est vide, et le paramètre a apporte une asymétrie dans le

rôle des deux voisins. Le cas $a = \frac{1}{2}$ est souvent appelé SCIC (pour “Symmetrically Constrained Ising Chain”), alors que le cas $a = 0$, où seule l’occupation du site $i - 1$ compte est appelé “modèle de l’Est”. Dans ces modèles, les configurations typiques de basse température sont principalement composées de domaines de sites occupés adjacents, séparés par des défauts, c’est-à-dire des sites inoccupés isolés. La dynamique se déroule en faisant diffuser des défauts voisins, jusqu’à obtenir des sites occupés encadrés par deux défauts ; en effet, le seul moyen de diminuer l’énergie est de disposer de trois vides consécutifs, avant de les réoccuper. Les structures inhérentes correspondent précisément aux configurations où tous les défauts sont isolés, et sont les mêmes pour toutes les valeurs de l’asymétrie a . Cependant, la dynamique du modèle de l’Est est différente de celle du SCIC, puisqu’elle n’autorise la diffusion des défauts que vers la droite (vers l’Est). Une telle différence dans la dynamique locale peut avoir pour effet de modifier les poids relatifs des différents minima locaux. Crisanti et Ritort ont montré que la croissance des domaines n’est pas la même dans les deux modèles [108, 110] et donc que dans ceux-ci le rôle des structures inhérentes dépend de la dynamique locale. Berg et al. [182] ont mis à profit cette défaillance de la décomposition de Stillinger et Weber pour tenter de mettre en défaut l’hypothèse d’Edwards. Pour cela, ils ont soumis ces modèles à deux types de tapping différents, “thermique” et aléatoire, et ont mis en évidence des déviations significatives entre la mesure dynamique et la mesure d’Edwards. Ils ont également argumenté que ces déviations sont moins importantes si l’excitation est de nature “thermique”. L’objet de cette section sera l’étude (qui est le sujet de la publication 6) de la mesure d’Edwards dans le régime stationnaire du modèle SCIC, afin de clarifier le rôle des grandes et petites échelles de longueur dans la réussite (à basse énergie) ou l’échec (à haute énergie) de cette mesure.

b) Description du modèle et des simulations

La dynamique relaxationnelle considérée ici est légèrement différente de celle du SCIC : alors que dans le SCIC, un site vide dont un seul des deux voisins est occupé devient occupé avec probabilité $\frac{1}{2}$, dans le modèle considéré ici, cette probabilité vaut 1. La dynamique relaxationnelle consiste donc à ajouter l’une après l’autre des particules sur des sites qui sont adjacents d’autres sites vides. Les états bloqués sont toujours les configurations où les défauts sont isolés. Si l’on fait la correspondance entre les défauts et les murs de domaines dans le modèle d’Ising, on constate que l’entropie d’Edwards est exactement la même, à condition de remplacer le nombre de murs par le nombre de défauts. Du fait que $\mathcal{N} = \sum_i n_i$ ne contient pas d’interactions, mais représente le nombre de particules, on peut introduire la densité $\rho = \frac{\mathcal{N}}{N}$. On peut également introduire une énergie $E = \frac{\mathcal{E}}{N}$ telle que la dynamique relaxationnelle avec contraintes cinétiques soit la dynamique de minimisation stricte de \mathcal{E} :

$$E = \frac{1}{N} \sum_i ((1 - n_i)(1 - n_{i-1}n_{i+1}) - n_{i-1}n_{i+1}). \quad (24)$$

La contribution d’un site i à cette énergie est :

- -1 , si $i - 1$ et $i + 1$ sont occupés ;
- 0 , si i est occupé et, $i - 1$ ou $i + 1$ est vide ;

- 1, si i est vide et, $i - 1$ ou $i + 1$ est vide.

Le modèle ainsi obtenu est une version unidimensionnelle simplifiée d'un milieu granulaire, où les contraintes cinétiques rappellent l'exclusion de cœur dur entre les grains, ρ est la fraction volumique, et E l'énergie potentielle; le fait de ne pas autoriser des mouvements qui laissent invariant l'énergie peut être vu comme de la friction. Dans ce cas, la mesure d'Edwards peut être appliquée dans sa formulation originale, c'est-à-dire en fixant la densité moyenne dans le régime stationnaire. La comparaison avec les simulations est faite de la même façon que pour la chaîne d'Ising sous tapping. Ici, les quantités mesurées sont :

- l'énergie E et la densité ρ ;
- les fluctuations de l'énergie et de la densité : $c_E = N(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$, $c_\rho = N(\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2)$;
- la distribution $P(l)$ des tailles des domaines de particules adjacentes.

De plus, quatre types différents de tapping ont été introduits pour ce modèle, dont un correspond au tapping aléatoire utilisé depuis le début de ce chapitre, dont les phases d'excitation sont définies de la façon suivante :

- (RU) (pour "Random Unconstrained") : l'occupation de chaque site est changée avec probabilité $p \in [0, 1]$. Ici, il n'y a pas de symétrie \mathbb{Z}_2 , donc p peut dépasser $\frac{1}{2}$;
- (RC) (pour "Random Constrained") : un pas Monte-Carlo est effectué, durant lequel l'occupation de chaque site choisi est changée avec probabilité $p \in [0, 1]$, à condition que l'un de ses voisins soit vide;
- (TU) (pour "Thermal Unconstrained") : un pas Monte-Carlo est effectué avec la probabilité de Métropolis $p(n_i \rightarrow 1 - n_i) = \min\left(1, e^{\frac{1-2n_i}{T_\rho}}\right)$. Le paramètre T_ρ représente l'amplitude ajustable du tapping;
- (TC) (pour "Thermal Constrained") : un pas Monte-Carlo est effectué avec la probabilité de Métropolis $p(n_i \rightarrow 1 - n_i) = (1 - n_{i-1}n_{i+1}) \min\left(1, e^{\frac{1-2n_i}{T_\rho}}\right)$.

Les mécanismes (RU) et (TC) sont ceux comparés par Berg et al. [182]. Dans la publication 6, les résultats des simulations pour les quatre mécanismes ont été présentés, pour des systèmes de $N = 10^6$ spins, les mesures ayant été prises sur 10^6 tapes dans l'état stationnaire. Remarquons que la densité moyenne obtenue après la première séquence de déposition à partir d'un état aléatoire est $\rho = \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{\sqrt{e}}) \approx 0,697$, ce qui est plus faible que la densité des états métastables les plus probables $\rho_m \approx 0,724$. Dans ce modèle, il est donc possible d'obtenir des compactivités négatives.

c) Mesure d'Edwards généralisée

À haute densité, la mesure d'Edwards ne permet pas de prédire les valeurs correctes des fluctuations de densité ou d'énergie, ni la distribution des longueurs de domaines. De plus, pour une même valeur de ρ , ces quantités semblent dépendre très légèrement du mécanisme d'excitation utilisé, ce qui suggère que la densité ne suffit pas à déterminer toutes les autres grandeurs. La même chose est observée dans des modèles sur réseau de compaction, comme le modèle de Tétris, où la connaissance du profil de densité (c'est-à-dire la variation de la densité avec la hauteur dans

l'empilement) est nécessaire pour obtenir les grandeurs dynamiques [170]. Dans la publication 6, une généralisation simple de la mesure d'Edwards a été utilisée, afin de caractériser l'écart de la mesure plate à la mesure dynamique réelle. Cette mesure généralisée d'ordre n , notée M_n (M_1 est donc la mesure d'Edwards), est la restriction de la mesure plate à la variété définie par ($x_1 = \text{constante}, \dots, x_n = \text{constante}$), où x_1, \dots, x_n sont n grandeurs choisies au départ. Plus le nombre de grandeurs ainsi fixées devient grand, plus cette mesure généralisée décrit bien la dynamique, puisque plus d'information connue avec certitude y est intégrée. Cependant, il est instructif de déterminer le nombre de grandeurs minimum à fixer (i.e. l'ordre de la mesure) nécessaire pour reproduire les quantités dynamiques étant donné l'incertitude. En se restreignant à $n \leq 3$, les mesures quantités suivantes ont été fixées :

- $M_1 : \rho$;
- $M_2 : \rho, E$;
- $M_3 : \rho, E, P(l < 3)$. Ceci est équivalent à fixer $\rho, P(l = 1)$ et $P(l = 2)$.

L'utilisation de E et $P(l < 3)$ comme grandeurs supplémentaires est motivée par la nature locale de la dynamique relaxationnelle. Ce sont les contraintes cinétiques locales qui réduisent les bassins d'attraction de certains états métastables au profit d'autres, et il est donc naturel de supposer que c'est aux petites échelles que les différences entre la mesure d'Edwards et la mesure dynamique doivent être les plus importantes. En passant de M_1 à M_2 , puis de M_2 à M_3 , on fixe des échelles de plus en plus grandes.

Sur la figure (IV.10), les fluctuations de la densité obtenues soit à partir des simulations, soit à partir des mesures M_1, M_2 et M_3 sont représentées. Sur la figure (IV.11), ce sont les distributions des tailles des domaines qui sont représentées. On constate dans tous les cas que la mesure M_1 est précise à haute densité, puis qu'à densité intermédiaire, M_2 est nécessaire pour améliorer la précision, puis M_3 à basse densité.

Les fluctuations des tailles des domaines sont de natures différentes pour des petits et des grands domaines. Elles dépendent aussi de la nature du tapping. En effet, si l'excitation permet de rompre des grands domaines en y créant des vides, comme c'est le cas pour (RU) et (TU), les petits domaines sont favorisés, car un vide isolé créé au sein d'un grand domaine est instable. Dans ce cas, même si la probabilité de retirer une particule lors de l'excitation est très faible, l'effet cumulatif de ces retraits au cours des tapes permet d'évaluer la densité moyenne maximale possible pour une excitation sans contrainte. Par exemple, supposons que l'on utilise (RU), avec $p \ll 1$. La taille moyenne des domaines $\langle l \rangle = \sum_l lP(l)$ est petite devant $\frac{1}{p}$. Or, si l'on s'intéresse à un domaine de longueur $\langle l \rangle$ d'une configuration métastable, la probabilité qu'une particule soit retirée ou ajoutée à un des bouts de ce domaine ou en son sein est $p(\langle l \rangle + 1)$. La variation de la densité entre chaque tapes est donc : $\Delta\rho = \frac{p}{N}(3 - \langle l \rangle) = \frac{p}{N} \frac{3-4\rho}{1-\rho}$. Ainsi, si $\rho > \rho^* = \frac{3}{4}$, la dynamique s'opère en cassant des domaines, alors que si $\rho < \rho^*$, elle s'opère en comblant les vides, et donc la densité maximale moyenne possible, qui est celle atteinte pour $p \rightarrow 0$ est $\frac{3}{4}$. Lorsque l'excitation respecte les contraintes cinétiques ((RC) et (TC)), les principaux mécanismes (lors de l'excitation) sont l'élimination des domaines de taille 1 et la diffusion des défauts. L'interdiction de casser des domaines permet donc à faible amplitude d'exci-

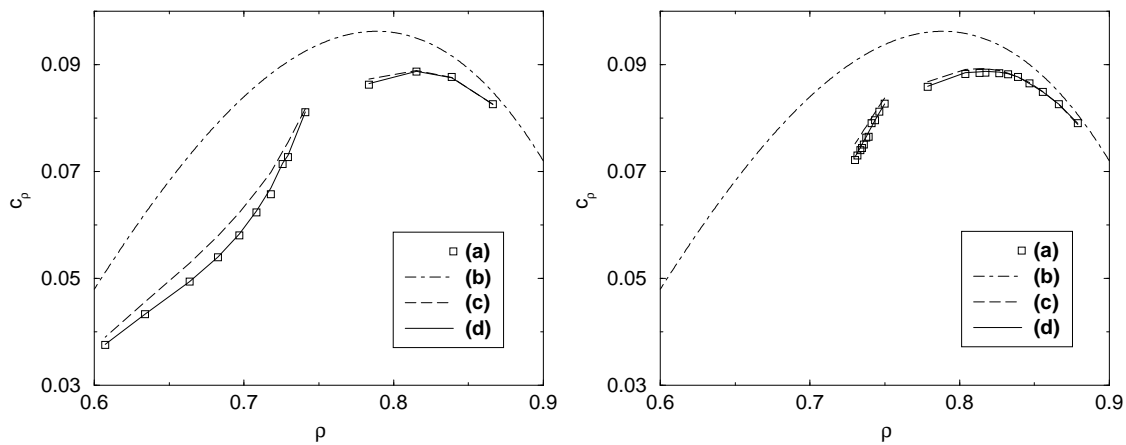


FIG. IV.10 – Fluctuations de la densité en fonction de celle-ci pour les différents mécanismes d’excitation. À gauche : (RU) et (RC) ; à droite : (TU) et (TC). Les carrés (a) sont les résultats des simulations numériques et les lignes (b), (c) et (d) représentent respectivement les résultats estimés à partir de M_1 , M_2 et M_3 . Sur chaque figure, la partie basse densité est obtenu avec une excitation sans contrainte (U), celle de haute énergie avec contrainte (C).

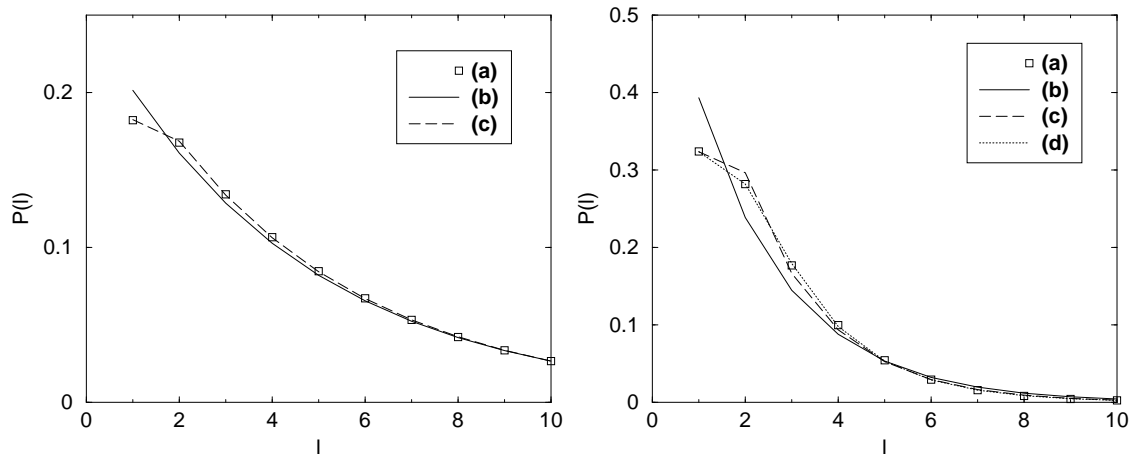


FIG. IV.11 – Distribution des longueurs de domaines, pour deux excitations différentes (même légende que pour la figure (IV.10)). À gauche : (TC), avec $T_\rho = 1, 3$; à droite : (RU), avec $p = 0, 4$.

tation d’atteindre la densité $\rho = 1$. Cependant, la précision de la mesure d’Edwards ou de ses généralisations ne dépend du type d’excitation utilisée qu’à travers la densité atteinte, c’est-à-dire que pour une même densité moyenne, tous les types de tapping sont décrits par la mesure d’Edwards (ou ses généralisations) avec la même précision. En effet, dans les quatre mécanismes de tapping utilisés, l’excitation favorise la restauration de l’ergodicité, alors que la dynamique relaxationnelle est la seule responsable des différences de taille entre les bassins d’attraction des états

métastables. Seule la dynamique relaxationnelle peut être responsable de la faillite de la mesure plate, pourvu que les déplacements interdits lors de l'excitation soient les mêmes que ceux interdits lors de la relaxation.

La comparaison des résultats des différentes mesures utilisées, pour les quatre façons de taper, montre que la précision de chacune de ces mesures augmente avec la densité. De plus, plus l'échelle sur laquelle le système est connu a priori est grande, plus la précision est bonne. En particulier, dans la précision des simulations, la distribution des longueurs des grands domaines est fixée par celle des petits domaines. Ceci peut se comprendre par le fait que la taille des bassins d'attraction est principalement déterminée par la probabilité d'occurrence des petits domaines. Ainsi, fixer cette probabilité d'occurrence revient à fixer la taille des bassins d'attraction. La taille de ces bassins fluctue entre les états métastables d'autant plus que les défauts sont rapprochés. Au contraire, lorsque la densité est proche de 1, les défauts sont bien séparés et interagissent rarement, de sorte que les bassins des états métastables typique à la densité choisie sont sensiblement de même taille. Le même type d'observation peut être fait dans les modèles étudiés par Barrat et al. [163, 164], où la densité de particules mobiles est très faible. Les milieux granulaires réels impliquent des degrés de liberté continus, dont les variations à faible vibration sont également faibles. Dans l'image de Mehta et Barker où la compaction a lieu principalement aux frontières de blocs rigides, les défauts correspondent justement à des régions où la densité est légèrement plus faible que la moyenne. Ces régions sont bien séparées spatialement, et de temps en temps coalescent, ce qui permet de diminuer le volume libre. Dans le régime stationnaire, les défauts sont créés spontanément par des faibles fluctuations de densité, de sorte qu'il est raisonnable de penser que l'hypothèse d'Edwards peut s'appliquer.

2.3 Conclusion sur les modèles unidimensionnels

L'étude de ces deux modèles a permis de soumettre la mesure d'Edwards à de nombreux tests. En particulier, il a été vérifié que la mesure d'Edwards permet de déterminer avec une bonne précision des grandeurs dynamiques, y compris pour des valeurs intermédiaires du paramètre de tapping. La présence de contraintes cinétiques rendant les déviations entre la mesure d'Edwards et la mesure dynamique plus flagrantes a permis de montrer que la violation du bilan détaillé aux petites échelles décroît très vite lorsqu'on augmente l'échelle [183]. En particulier, la validité de la mesure d'Edwards aux fortes densités a été attribuée à la quasi disparition des petites échelles.

3 Transitions de phase et mesure d'Edwards

Le modèle d'Ising à une dimension, qui correspond à $c = 2$ est un cas particulier pour lequel certaines quantités peuvent être calculées analytiquement, de sorte qu'il est possible d'étudier assez précisément le rôle des états métastables. Nous allons maintenant nous intéresser à des systèmes de connectivité finie supérieure, pour lesquels le paramètre de dilution α des couplages antiferromagnétiques joue un rôle

important.

3.1 Dynamique de liens

Pour la chaîne d'Ising, il a été possible de calculer l'énergie obtenue à la fin d'une relaxation vers un état métastable, en partant d'une configuration aléatoire. Il est possible de calculer cette énergie E_f pour les systèmes de connectivité $c > 2$ en utilisant une approximation recuite, qui ne tient pas compte des boucles. L'utilisation de ce type d'approximation semble raisonnable au vu des résultats numériques. En effet, le calcul de E_f pour diverses valeurs de α et c montre que E_f ne dépend pas de α . De plus, $E_f > E_F$, E_F étant l'énergie au-dessus de laquelle le calcul recuit de l'entropie d'Edwards est exacte. L'énergie finale E_f est donc située dans une gamme d'énergie où les boucles ne jouent pas de rôle apparent. Nous nous concentrons donc sur une dynamique de liens, en éliminant les variables S_i à l'aide d'une transformation de jauge locale. La contribution à l'énergie du site i du réseau est la moitié de la différence entre le nombre de liens satisfaits et le nombre de liens insatisfaits ; nous noterons cette différence x_i . De plus, en supposant le système homogène, nous désignerons par $P(x, k)$ la probabilité que x_i vaille x après k tentatives de retourner un spin dans l'algorithme décrit précédemment, x prenant les valeurs de même parité que c , entre $-c$ et c . On définit f_+ (resp. f_-) la probabilité qu'un spin *voisin* S_j d'un site considéré i soit retourné sachant que le lien J_{ij} est satisfait (resp. insatisfait). Alors :

$$f_{\pm} = \frac{\sum_{x>0} P(x)(c \pm x)}{\sum_x P(x)(c \pm x)} \quad (25)$$

Les possibilités de changement pour $x = x_i$ sont :

- $x > 0$. Le spin au site i peut changer : x devient $-x$;
- un site voisin du site i n'est pas dans le sens de son champs local et peut donc être retourné. Dans ce cas, x devient $x + 2$ ou $x - 2$.

On peut aussi choisir de tenter de retourner un site qui n'est ni le site i ni un de ses voisins, et dans ce cas x reste inchangé.

Si l'on suppose que les x_i sont des variables indépendantes, dans la limite où le nombre de sites tend vers l'infini, on peut introduire un temps continu $\tau = k/N$ et on obtient l'équation d'évolution :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, \tau)}{\partial \tau} &= \theta(-x)P(-x, \tau) + \theta(x)P(x, \tau) - (c + 1)P(x, \tau) \\ &+ P(x, \tau) \left(\frac{c+x}{2}(1-f_+) + \frac{c-x}{2}(1-f_-) \right) \\ &+ P(x+2, \tau) \frac{c+x+2}{2} f_+ + P(x-2, \tau) \frac{c-x+2}{2} f_- . \end{aligned} \quad (26)$$

Remarquons que la condition de stationnarité¹ $\frac{\partial P(x, \tau)}{\partial \tau} = 0$ implique dans (26) que $\theta(x)P(x, \tau) = 0$, ce qui signifie qu'il ne reste plus de x_i positifs à $\tau \rightarrow \infty$. L'énergie

¹Les variations de l'énergie totale sont des multiples de 2, donc le nombre k_e de renversements effectués avant que le système se bloque est inférieur à Nc . Le temps réduit correspondant $\tau_e = \frac{k_e}{N}$ est donc borné par c . Le temps utilisé dans (26) tient compte également des tentatives infructueuses de renversement de spins, et n'est pas borné, car plus le nombre de spins encore opposés à leur

par site moyenne est donné par $E(\tau) = \frac{1}{2} \sum_x xP(x, \tau)$ et l'équation (26) respecte l'identité exacte :

$$\frac{dE(\tau)}{d\tau} = -2 \sum_{x>0} xP(x, \tau). \quad (27)$$

L'équation (26) peut être résolue numériquement, à l'aide de conditions initiales binomiales, où chaque lien est satisfait avec probabilité $\frac{1}{2}$. La valeur de E_f qui en résulte est montrée dans le tableau (IV.1). Cette valeur est supérieure à celle obtenue par le tapping à $p = \frac{1}{2}$. Cependant, la différence semble diminuer lorsque la connectivité croît (si l'on fixe la parité de c). On peut comme dans le cas unidimensionnel utiliser cette solution approchée de la dynamique relaxationnelle pour donner une solution approchée de la dynamique de tapping. Le résultat est représenté sur la figure (IV.12) pour $c = 3$ et $c = 4$. L'absence des boucles permet, en utilisant (26), d'atteindre l'énergie du fondamental.

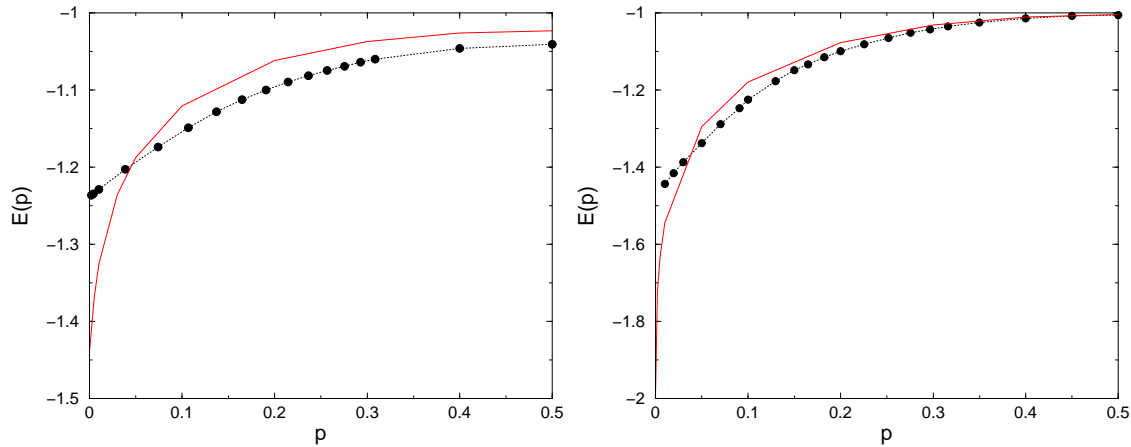


FIG. IV.12 – Comparaison entre l'énergie donnée par la solution approchée de la dynamique de tapping (trait plein) et celle mesurée dans les simulations, pour $c = 3$ (à gauche) et $c = 4$ (à droite).

Remarquons qu'un calcul similaire a été utilisé pour résoudre le problème XOR-SAT aléatoire sans répliques. Celui-ci est basé sur un algorithme de suppressions de feuilles. Cet algorithme est basé sur le principe suivant : sur un graphe (ou un hypergraphe) à connectivité fluctuante, certains sites contribuent au plus à un terme d'interaction, et ne contribuent donc pas à la frustration, qui est due aux boucles (ou hyperboucles). L'algorithme de suppression des feuilles supprime séquentiellement toutes les interactions contenant des sites de ce type, jusqu'à ce qu'il n'en reste plus. L'évolution de la connectivité des nœuds du graphe peut être décrite par des équations du même type que (26), qui dans ce cas est exacte, car la distribution de probabilité d'occurrence de chaque connectivité est auto-moyennante à chaque temps, du fait que l'algorithme de suppression des feuilles ne s'applique qu'aux

champ local est petit, plus la probabilité de choisir l'un de ceux-ci est faible. Il faut tenir compte de cette remarque pour simuler efficacement la dynamique de tapping, sans quoi les temps pour tomber dans un état métastable peut croître exponentiellement avec N , au lieu de linéairement.

parties non frustrantes du graphe. Dans le cas présent, les spins sont retournés dans un ordre aléatoire, ne tenant pas compte de leur appartenance à des boucles frustrées, ce qui explique pourquoi (26) n'est pas exacte. Remarquons cependant que pour $c = 2$ où les boucles frustrants sont absentes, (26) donne le résultat exact $E_f = -1 + e^{-1}$. Un moyen de déterminer plus précisément E_f pourrait être d'écrire une équation portant sur la distribution $\mathcal{P}(p, \tau) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(p(x, s) - \langle \delta_{x, x_i(\tau)} \delta_{s, s_i(\tau)} \rangle)$. En effet, la dynamique relaxationnelle rend le système hétérogène à chaque instant τ , et il est nécessaire de prendre en compte les fluctuations de site-à-site.

3.2 Transitions de phase

Nous venons de voir que l'énergie du premier état métastable obtenu par une dynamique relaxationnelle partant d'un état initial aléatoire ne permet pas de distinguer des systèmes ne différant que par leurs nombres moyens de liens antiferromagnétiques. Une façon de les distinguer est d'exciter les états métastables obtenus afin de permettre aux systèmes de franchir des barrières. En particulier, lorsqu'aucun lien antiferromagnétique n'existe, on s'attend à tomber dans le bassin d'attraction d'un des deux états fondamentaux, sous certaines conditions. Cette remarque est à l'origine de l'algorithme de tapping introduit plus haut.

a) Cas purement ferromagnétique

L'énergie dans l'état stationnaire est représentée en fonction p sur la figure (IV.13), pour $c = 3$. Le comportement observé pour $c > 2$ est caractérisé par l'existence d'une valeur $p_c(c)$ de p telle que :

- pour $p > p_c(c)$, $E(p)$ est identique à l'énergie $E_{SG}(p)$ obtenue pour $\alpha = \frac{1}{2}$;
- pour $p < p_c(c)$, $E(p) = E_{GS} = -\frac{c}{2}$.

Ainsi, le modèle purement ferromagnétique est sujet à une transition de phase discontinue à p_c . D'un point de vue dynamique, et pour des grands systèmes, cette transition s'opère de la façon suivante (cf. figure (IV.14)) : pendant τ tapes, les énergies $E_F(p, t)$ et $E_{SG}(p, t)$ sont très proches, puis l'énergie $E_F(p, t)$ tombe en quelques tapes sur l'énergie de l'état fondamental. Plus précisément, l'échelle de temps τ durant laquelle E_F et E_{SG} sont proches dépend de l'histoire de la dynamique de tapping, c'est-à-dire de la configuration initiale choisie, de l'ordre des renversements de spins lors des relaxations, et des spins qui sont retournés à chaque tape. L'histogramme correspondant des temps τ est assez étalé. Cependant, la valeur moyenne $\tau(p)$ ainsi que sa valeur la plus probable croissent lorsque p tend vers p_c^- en croissant, où ils divergent. En particulier, pour une simulation donnée, τ peut être défini de façon précise lorsque p est proche de p_c , car la différence $E_{SG} - E_F$ est bien décrite par une loi du type $E_{SG}(p, t) - E_F(p, t) = E_0 \exp(\lambda(t - \tau))$. Le temps τ croît également avec N . En effet, la chute exponentielle vers le fondamental dans le cas purement ferromagnétique est facilitée par la brisure de la symétrie \mathbb{Z}_2 . Lorsque cette symétrie est brisée, par exemple par l'acquisition d'une aimantation $M = Nm > 0$, les spins opposés à cette aimantation ont une probabilité plus grande d'être opposés à leur champ local et sont donc plus nombreux à être renversés lors de la dynamique relaxationnelle. L'augmentation au cours des tapes du nombre de spins dans le sens

de M provoque une “explosion” exponentielle de la probabilité pour un spin d’être opposé à son champ local sachant que ce spin est opposé à M , de sorte que les spins opposés à M disparaissent rapidement dès lors que cette explosion a eu lieu. Or, la brisure de la symétrie \mathbb{Z}_2 est facilitée par de grandes fluctuations. Lorsque la taille du système est très grande, les fluctuations de l’aimantation sont plus faibles, et le système met donc plus de temps à accrocher une aimantation que lorsque la taille est petite.

L’étude des effets de taille finie permet d’estimer raisonnablement p_c . En effet, la variation avec N de l’énergie $E_F(N, p)$ au voisinage de p_c , dans le cas purement ferromagnétique est bien décrite par une loi de la forme $E_F(N, p) \propto f(N(p - p_c))$, avec $p_c \approx 0,25$. Cependant, quand la taille est suffisante pour que l’énergie soit proche de la limite thermodynamique, le temps de transition entre $E(p_c^-)$ et $E(p_c^+)$ est très grand, et il est difficile de dire, au voisinage de p_c^- si une simulation va tomber dans l’état fondamental ou non. On peut donc obtenir une borne inférieure pour p_c , pour $N = 10^6$: $p_c^{(inf)} = 0,259$, qui donne pour borne inférieure de l’énergie de transition : $E(p_c^+)^{(inf)} = -1,079$. On peut également obtenir une borne supérieure en tapant un système préparé dans l’état fondamental ; pour $N = 10^6$, on obtient $p_c^{(sup)} = 0,265$ et $E(p_c^+)^{(sup)} = -1,076$.

Lorsqu’une transition de phase du premier ordre est observée, il est intéressant d’effectuer des cycles de variations lentes du paramètre de contrôle, ici l’amplitude du tapping p , afin de sonder les effets de métastabilité présents. Ici, on peut faire décroître lentement p depuis $p = \frac{1}{2}$, jusqu’à $p = 0$, puis faire croître p dans le sens inverse. Dans les deux cas, si N est suffisamment grand, la courbe obtenue est celle de la figure (IV.13).

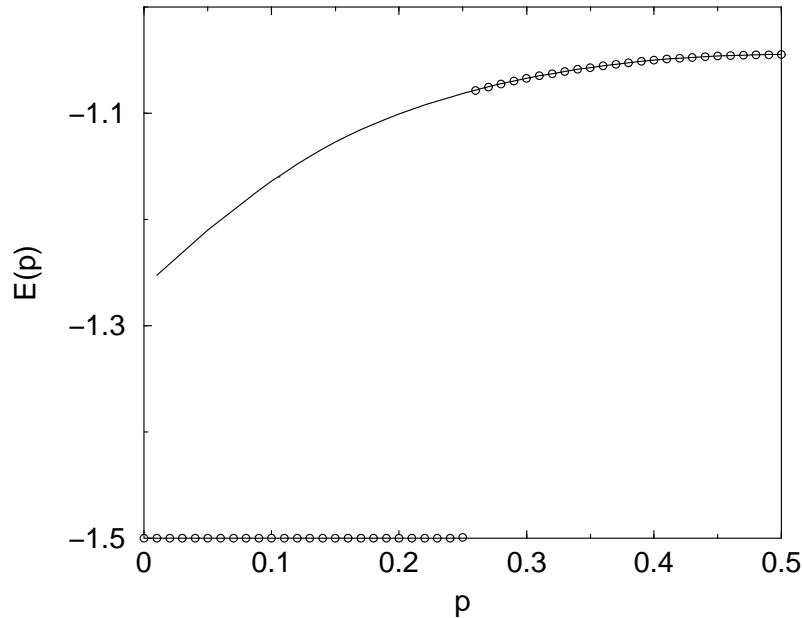


FIG. IV.13 – Comparaison entre l’énergie asymptotique obtenue pour $\alpha = 0$ (cercles) et celle obtenue pour $\alpha = \frac{1}{2}$ (ligne) en fonction de p , pour $c = 3$.

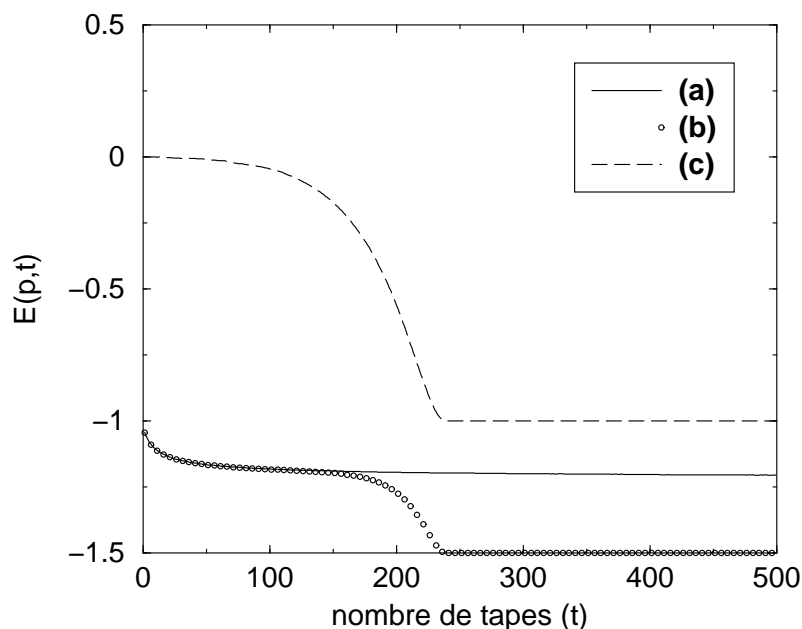


FIG. IV.14 – Comparaison entre les variations temporelles de l'énergie pour $\alpha = \frac{1}{2}$ (a) et $\alpha = 0$ (b), pour une même valeur de p ($p = 0,05$). L'aimantation du système ayant $\alpha = 0$ est également représentée (c).

| c | p_c | $E(p_c^+)$ | E^* | E_f | E_f^{ann} |
|-----|-------------------|--------------------|------------------|----------|-------------|
| 3 | $0,25 \pm 0,005$ | $-1.076 \pm 0,005$ | $-1,0714$ | $-1,045$ | $-1,023$ |
| 4 | $0,255 \pm 0,005$ | $-1.07 \pm 0,005$ | $-1,07 \pm 0,01$ | $-1,01$ | $-1,005$ |
| 5 | $0,45 \pm 0,01$ | $-1.4 \pm 0,005$ | $-1,4 \pm 0,01$ | $-1,396$ | $-1,368$ |

TAB. IV.1 – Récapitulatif des valeurs de p_c , et des diverses énergies caractéristiques intervenant, pour plusieurs connectivités. Les valeurs de p_c et $E(p_c^+)$ sont celles obtenues par les estimations de taille finie, E_f^{ann} est l'énergie de la chute initiale calculée en utilisant l'approximation recuite, et E^* est l'énergie en dessous de laquelle les états métastables sont aimantés.

Pour les quelques valeurs de la connectivité examinées en détail, l'énergie de transition est proche de l'énergie E^* où la symétrie \mathbb{Z}_2 se brise pour les états métastables. De plus, au-dessus de cette énergie la complexité des états métastables, ainsi que l'énergie $E(p)$ dans l'état stationnaire, sont identiques pour les cas $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{1}{2}$. Il est alors naturel de demander si cette transition peut être décrite à l'aide de la seule mesure d'Edwards, ce qui fait l'objet de la section suivante.

b) Transitions de phase et mesure d'Edwards

Afin de préciser la coïncidence entre la transition de phase observée dans le cas $\alpha = 0$ et la mesure d'Edwards, il est utile de revenir à la forme de l'entropie d'Edwards des modèles intermédiaires (tels que $0 < \alpha < \frac{1}{2}$) dans l'ensemble microcanonique. Ceci fait l'objet de la publication 5.

I. DESCRIPTION MICROCANONIQUE

L'approximation recuite de l'entropie d'Edwards a été discutée au chapitre II ; elle permet d'accéder à l'ensemble d'Edwards microcanonique. Rappelons qu'il existe une valeur critique α_c (estimé à $\alpha_c^{ann} \approx 0,07$ dans l'approximation recuite) en dessous de laquelle l'entropie d'Edwards n'est pas une fonction concave de l'énergie.

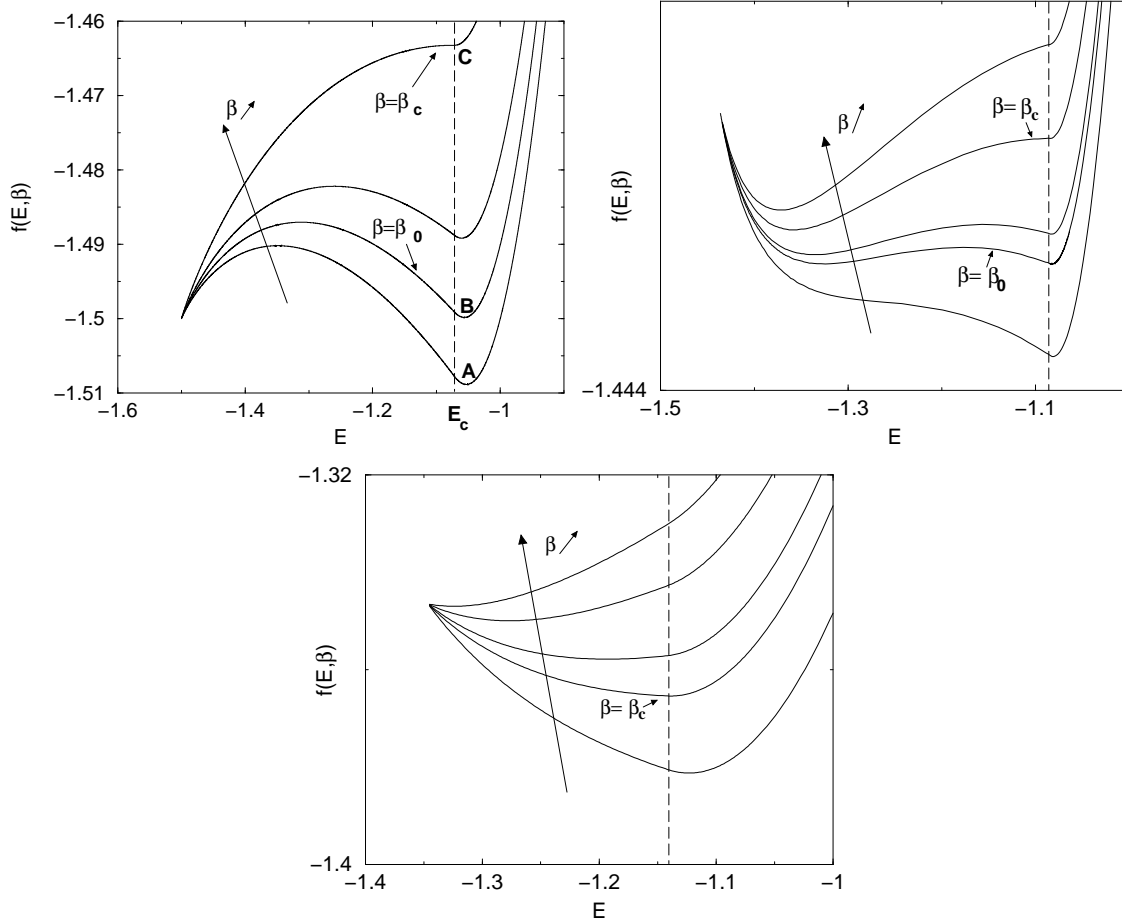


FIG. IV.15 – Variation de $f(E, \beta)$ en fonction de E pour plusieurs valeurs de β , pour $\alpha = 0$ (à gauche), $\alpha = 0,04 < \alpha_c^{ann}$ (à droite) et $\alpha = 0,12 > \alpha_c^{ann}$ (en bas). Entre les points A et B, le point stationnaire est un minimum global ; entre B et C, il n'est minimum que localement ; au dessus de C, ce n'est plus un minimum. Les températures d'Edwards inverses β_0 et β_c correspondent respectivement au point de coexistence et au point spinodal.

La forme de l'énergie libre dans l'ensemble d'Edwards dépend fortement de α et de la température d'Edwards T . Pour des grands systèmes, celle-ci est obtenue en minimisant l'énergie libre $f(E, \beta)$ définie de la façon suivante :

$$-\beta f(E, \beta) = s_{Edw}(E) - \beta E \quad (28)$$

La variation de cette énergie libre est représentée sur la figure (IV.15) pour trois

valeurs de α . On peut extraire trois comportements typiques de l'énergie libre, selon la valeur de α :

- $\alpha = 0$: à $\beta_c = \frac{1}{2} \ln \frac{8}{3}$, l'état fondamental est le seul minimum local de $f(E, \beta)$, et le système subit la transition discontinue décrite dans la section précédente ;
- $0 < \alpha < \alpha_c^{ann}$: la forme de l'énergie libre est typique de celle d'un système présentant une transition de phase du premier ordre, dont le point spinodal est situé à $\beta_c(\alpha) = \left. \frac{\partial s_{Edw}(E)}{\partial E} \right|_{E=E^*(\alpha)}$.
- $\alpha_c^{ann} < \alpha < \frac{1}{2}$: la forme de l'énergie libre est typique de celle d'un système présentant une transition de phase du second ordre. Le point critique est à $\beta_c = \left. \frac{\partial s_{Edw}(E)}{\partial E} \right|_{E=E^*(\alpha)}$.

Le calcul recuit permet également de calculer l'entropie d'Edwards $s_{Edw}(E, m)$, restreinte aux configurations d'aimantation m et énergie E fixées. À l'énergie E , cette entropie est maximale en $m(E)$ et $m(E)$. Lorsque $E > E^*(\alpha)$, l'aimantation typique $m(E)$ est nulle, alors que lorsque $E < E^*(\alpha)$, $m(E)$ est non nulle. De plus, il est possible d'améliorer la précision des valeurs numériques en utilisant des schémas de calcul plus complexes, comme ceux présentés au chapitre II

II. COMPARAISON AVEC LES SIMULATIONS NUMÉRIQUES

Un modèle dans lequel existent plusieurs types de transitions de phase - que l'on peut décrire de façon précise - dans l'ensemble d'Edwards fournit un terrain favorable pour tester la capacité "prédictive" de l'ensemble d'Edwards. Des simulations numériques ont donc été réalisées pour diverses valeurs de α , certaines en dessous de α_c (0,002 et 0,005) et d'autres au-dessus de α_c (0,02 et 0,05). Si la mesure d'Edwards décrit bien l'état stationnaire, on s'attend à observer pour chaque valeur de α les points suivants :

- l'énergie $E(p)$ est indépendante de α pour les grandes valeurs de p , plus précisément jusqu'à $E(p) = E^*(\alpha)$;
- si $\alpha > \alpha_c$, l'énergie $E(p)$ doit quitter continuellement en dessous de $E(p) = E^*(\alpha)$ l'énergie $E_{SG}(p)$ correspondant à $\alpha = \frac{1}{2}$, et si $\alpha < \alpha_c$, l'énergie $E(p)$ doit quitter discontinuellement en dessous de $E(p) = E^*(\alpha)$ l'énergie $E_{SG}(p)$ correspondant à $\alpha = \frac{1}{2}$.

L'énergie $E(p)$ dans l'état asymptotique est représentée sur la figure (IV.16). La transition est bien continue pour $\alpha > \alpha_c$ et discontinue pour $\alpha < \alpha_c$. De plus, toutes les courbes coïncident à haute énergie.

Pour toutes les petites valeurs de α , la remontée de $E(p)$ au voisinage de p_c^- est très raide, ce qui rend nécessaire une étude plus précise au voisinage de p_c . La figure (IV.17) montre une série d'histogrammes d'énergie pour $\alpha = 0,002$, autour de p_c . Ceux-ci sont typiques d'une transition du premier ordre. La dissymétrie de ces histogrammes autour du pic de droite, ainsi que l'étalement de celui de gauche est en accord avec les courbures correspondantes de l'énergie libre $f(E, \beta)$ au voisinage du point spinodal. Le fait que le minimum local de haute énergie subsiste jusqu'au point spinodal suggère que la connaissance des minima locaux doit être associée à une information concernant la dynamique afin de déterminer quel minimum est sélectionné par la dynamique. En particulier, il semble ici que les bassins d'attraction

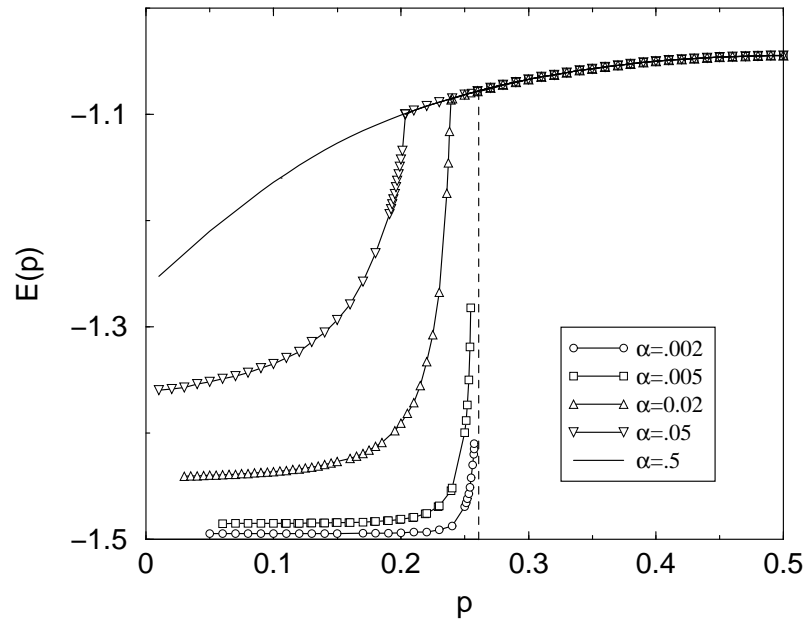


FIG. IV.16 – Énergie mesurée dans l'état stationnaire de systèmes de taille $N = 10^6$ pour plusieurs valeurs de α . La ligne pointillée verticale indique l'énergie de la transition discontinue pour $\alpha = 0$.

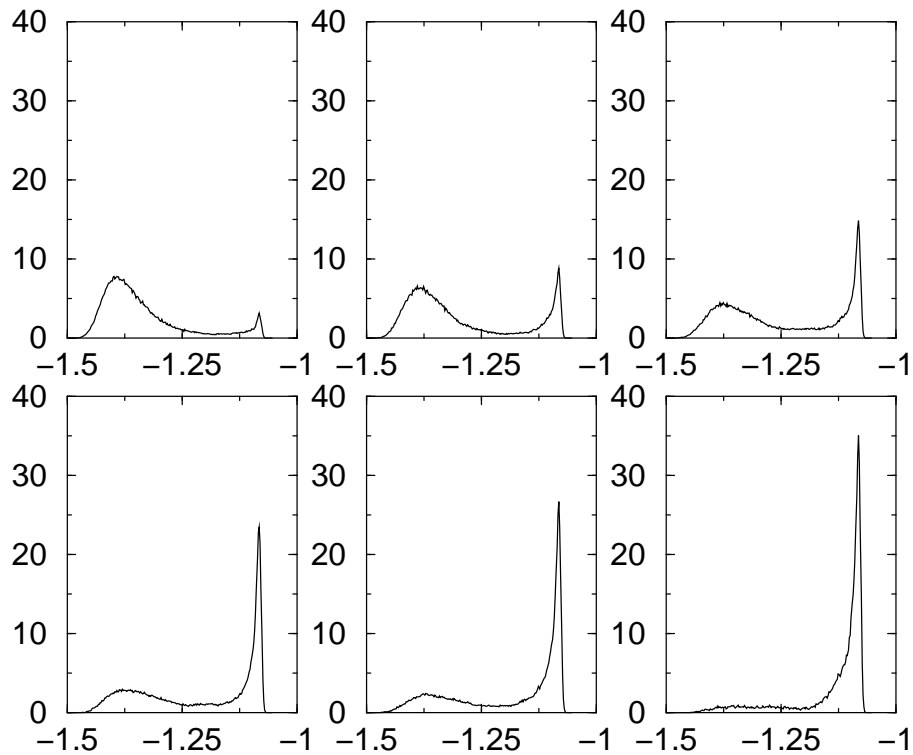


FIG. IV.17 – Histogrammes des énergies obtenues en tappant un système de $N = 25000$ spins, avec $\alpha = 0,002$, durant 10^5 tapes. De gauche à droite et de haut en bas : $p = 0,2584$, $p = 0,2585$, $p = 0,2586$, $p = 0,2587$, $p = 0,2588$, $p = 0,2589$.

jouent un rôle prépondérant pour sélectionner le minimum métastable.

La mesure d'Edwards a donc permis de prévoir l'existence d'une transition de phase, et de prévoir² également son ordre. Afin de voir si l'accord entre les simulations de tapping et les résultats de la mesure d'Edwards est quantitativement bon, l'aimantation typique $m(\beta)$ et l'énergie typique $E(\beta)$ des états métastables a été calculée à la fois numériquement par la méthode de l'hamiltonien auxiliaire et analytiquement par l'approximation RS, pour une température d'Edwards β . Les valeurs obtenues par les deux méthodes sont indiscernables dans la limite de leurs barres d'erreur, ce qui n'est pas inattendu, puisque pour des valeurs si faibles de α , le nombre de boucles frustrées est très faible. Dans les simulations numériques, en plus de l'énergie $E(p)$, l'aimantation $m(p)$ a été mesurée. Si la description par l'ensemble d'Edwards est correcte, les courbes $m(E)$ paramétrées par β et p doivent coïncider. Lorsque la transition est discontinue, la comparaison est difficile, car le modèle auxiliaire étant très imprécis au voisinage de la transition, la gamme d'énergie accessible est restreinte. Dans cette gamme, l'accord est cependant bon. Lorsque la transition est continue, comme dans l'exemple de la figure (IV.18), la coïncidence des courbes $m(E)$ est excellente.

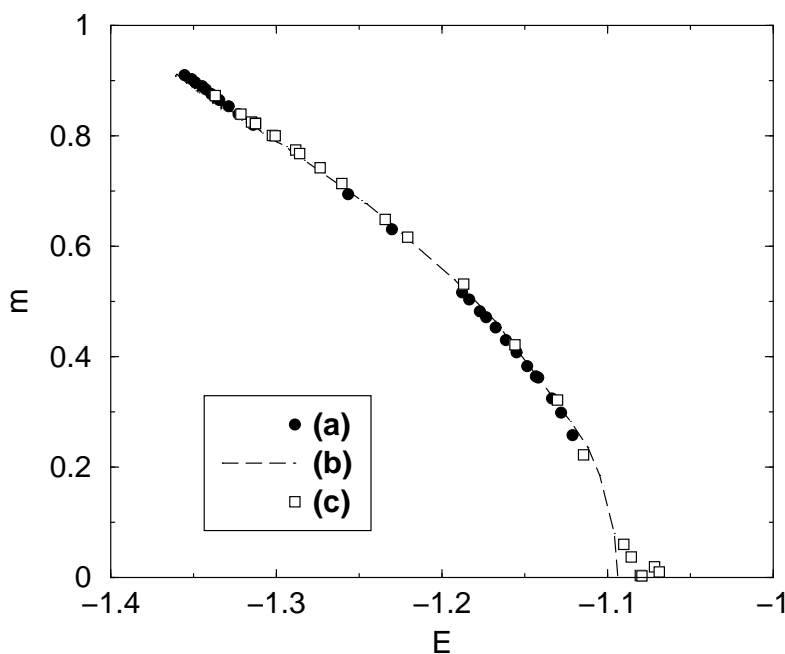


FIG. IV.18 – Comparaison entre l'aimantation $m(E)$ mesurée dans les simulations dynamiques (a) et celle calculée en utilisant la mesure d'Edwards analytiquement (b) et par la méthode de l'hamiltonien auxiliaire (c).

²il s'agit bien de "prévoir", puisque chronologiquement, les simulations de tapping ont été réalisées sur ces systèmes parceque l'ensemble d'Edwards décrivait toute cette phénoménologie.

c) Conclusion sur les transitions de phase

L'algorithme de tapping appliqué à des systèmes sur des graphes aléatoires a révélé l'existence d'une transition de phase qui a été bien décrite par la mesure d'Edwards. La possibilité de décrire des transitions de phase dans des systèmes granulaires (ou qui s'en approchent, comme ici) est importante. Un exemple pratique est celui de la ségrégation de taille. Considérons un mélange binaire de grains, c'est-à-dire un mélange aléatoire de "gros" et "petits" grains. Si l'on vibre verticalement ce mélange, on peut observer un effet de ségrégation ; les gros grains migrent vers le haut, et les petits vers le bas. Cet effet est bien connu des vendeurs de noix cajou, car il est difficile de mélanger celles-ci aux arachides. Ce problème de ségrégation, qui apparaît pour des distributions de tailles plus complexes, survient plus généralement lors du mélange d'un ensemble polydisperse, par exemple lors de la vibration de bétons. Récemment un effet de ségrégation inverse, où les gros grains migrent vers le bas, a été observé [184]. Les effets de ségrégations dépendent de plusieurs paramètres comme les masses des grains et leur rayons. Des mécanismes dynamiques ont été invoqués pour décrire la ségrégation, comme le mécanisme de percolation, où la percolation du réseau formé par les gros grains crée des vides suffisamment grand pour que les petits grains s'y engouffrent [185, 186]. La compétition entre cet effet de ségrégation et la condensation de sphères dures a récemment été invoquée pour expliquer conjointement les problèmes de ségrégation et de ségrégation inverse [187]. Cependant, les paramètres pertinents pour décrire les diagrammes de phases ne sont pas encore bien connus, et une étude purement "statique" pourrait s'avérer plus simple qu'une approche basée uniquement sur les processus dynamiques. L'utilisation de la mesure d'Edwards pourrait être utile afin de déterminer d'un point de vue qualitatif l'allure du diagramme de phase, comme tendent à le montrer des études préliminaires sur des modèles sur réseau [188, 189].

4 Comment tester la mesure d'Edwards ?

Dans les modèles décrits dans ce chapitre, le fait de pouvoir calculer de façon explicite la mesure d'Edwards a permis de tester celle-ci assez précisément. Hélas, dans le cas de modèles plus réalistes de milieux granulaires, ou d'empilements expérimentaux, le calcul de quantités dans l'ensemble d'Edwards est très complexe, souvent même impossible. Il est donc utile de dégager de l'étude de systèmes simples des méthodes plus générales pour tester la validité de la mesure d'Edwards. Plusieurs de ces méthodes vont être présentées ici, dont l'une est l'objet de la publication 9.

4.1 Mesures dynamiques locales

Un premier test semblant accessible directement par l'expérience a été décrit par Makse et Kurchan [190] sur les bases de résultats numériques. Le système étudié est un modèle de sphères élastiques, qui est fréquemment utilisé pour décrire les émulsions denses et les mousses. Ces sphères, dont le comportement dynamique est simulé par méthode Monte Carlo, sont soumises à un flot de cisaillement lent, et à des forces extérieures de faible amplitude. Pour des particules sans friction ni

forces tangentielles, le tracé de la diffusivité dans l'état stationnaire en fonction de la mobilité induite par les forces externes est constitué de droites de même pente, ce qui met en évidence l'existence d'une température effective bien définie. De plus, la possibilité de mesurer l'énergie élastique totale en fonction de la température d'Edwards à l'aide d'un modèle auxiliaire permet de tester directement le lien entre la température d'Edwards et la température effective. Dans les simulations de Makse et Kurchan, ces deux températures sont égales (dans la précision numérique). En présence de forces tangentielles (interactions élastiques et friction), la façon dont les grains se bloquent peut dépendre de la dynamique, et l'ensemble d'Edwards est mal défini. Il semble cependant (la température effective est la même pour les deux types de particules) que les concepts issus de la thermodynamique puissent s'appliquer dans ce cas, à condition de généraliser la mesure d'Edwards de sorte à tenir compte de la friction. Ce protocole, qui peut raisonnablement être réalisé expérimentalement pourrait mettre en évidence l'existence d'un ensemble "thermodynamique" sous-jacent grâce à l'existence de températures effectives indépendantes de l'observable calculée. De plus, le fait que dans les simulations numériques cette température effective est proche de la température d'Edwards permet de penser que tel pourrait être le cas dans les systèmes expérimentaux correspondants. Cependant, la réalisation expérimentale semble difficile, par exemple à cause de la formation possible de bandes de cisaillement ou d'effets de ségrégation, qui rendraient le système très hétérogène. De plus, il est difficile d'appliquer une force externe sur certaines des particules sans agir sur les autres ou perturber le système étudié. Remarquons que des tests similaires ont été proposés par Colizza et al. [170], dans le cas de milieux granulaires vibrés verticalement. Dans ce cas, la réalisation de tracés FDT (c'est-à-dire la diffusivité en fonction de la mobilité induite) pour diverses observables non couplées à la direction de compaction permettrait également de mettre en évidence de façon indirecte l'existence d'un principe de maximisation d'entropie sous-jacent. Ceci demeure pour le moment un test purement théorique, étant donné qu'aucune mesure de fonction de réponse à une force appliquée n'a été effectuée jusqu'à présent dans des milieux granulaires.

4.2 Mesures statiques

L'une des difficultés majeures pour tester l'ensemble d'Edwards par des mesures dynamiques est la nécessité d'effectuer des mesures locales, comme celle de la diffusivité des particules, par exemple. Un moyen de s'affranchir de ces difficultés est de s'intéresser à des grandeurs "statiques" que l'on peut moyennner sur des parties du système, comme les fluctuations de densité par exemple.

a) Dynamique de tapping du modèle SK

Ici, le paradigme des verres de spins soumis à l'algorithme de tapping sera utilisé, le modèle étant cette fois le modèle SK [191]. L'intérêt de ce modèle est que les états métastables, qui ont une complexité assez élevée (0,1992 pour le modèle SK), sont nombreux même pour des valeurs faibles du nombre de spins. En particulier, des systèmes de taille $N = 15$ par exemple permettent déjà d'avoir un aperçu de la limite thermodynamique. Or, pour des systèmes finis de petite taille, l'énergie est

beaucoup moins piquée autours de sa valeur moyenne que pour des grands systèmes, et il est alors possible de d'étudier la distribution de ses fluctuations sur des gammes d'énergie assez larges. En effet, dans l'ensemble canonique d'Edwards, la probabilité d'occurrence de l'énergie E est

$$\begin{aligned}\rho_{Edw}(E, \beta, N) &= \frac{1}{Z} \mathcal{N}_{MS}(E, N) e^{-N\beta E} \\ &= \frac{1}{Z} e^{N s_{Edw}(E) - N\beta E}.\end{aligned}\tag{29}$$

Dans l'ensemble d'Edwards, les fluctuations de l'énergie autour de sa valeur moyenne sont de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{N}}$; c'est également le cas dans les mesures dynamiques. Si la description de l'état stationnaire par la mesure d'Edwards est valide, la distribution de probabilité $\mathcal{N}_D(E, p, N)$ de l'énergie dans l'état stationnaire doit être de la forme (29). En particulier, on peut calculer le rapport

$$R(E, p, N) = \ln \left(\frac{\mathcal{N}_D(E, p, N)}{\mathcal{N}_{MS}(E, N)} \right),\tag{30}$$

et l'hypothèse d'Edwards implique :

$$R(E, p, N) = -N\beta(p)E + C(\beta, N).\tag{31}$$

Pour des systèmes de tailles allant jusqu'à trente, il est possible d'échantillonner tous les états métastables par énumération exacte, et donc d'étudier la façon dont $\beta(p)$ varie d'une réalisation du désordre à l'autre. En particulier, il apparaît que $\beta(p)$ devient auto-moyennant lorsqu'on augmente la taille du système.

Pour des tailles plus grandes, où aucune énumération exacte n'est possible, il est possible d'utiliser l'expression analytique de l'entropie d'Edwards. Pour des grands systèmes, la quantité $R(E, p, N)$ est auto-moyennante et sa densité $r(E, p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{R(E, p, N)}{N}$ est

$$r(E, p) = \mathbb{E} [s_D(E, p)] - \mathbb{E} [s_{Edw}(E)],\tag{32}$$

où $s_D(E, p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{N}_D(E, p, N)}{N}$ est supposé auto-moyennant. Comme pour les systèmes à connectivité finie, l'expression exacte de la complexité des états métastables n'est pas connue, et l'on peut recourir à l'approximation recuite, qui est ici exacte [116, 117] dès que $E > E_{RSB} = -0,672$, et est donnée par

$$s_a(E) = \min_z \left\{ \frac{z^2}{2} - E^2 + \ln \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z + 2E}{\sqrt{2}} \right) \right] \right\}.\tag{33}$$

De plus, le calcul RS de l'entropie d'Edwards s'éloigne peu du calcul recuit [192], de sorte que ce dernier peut être considéré comme une bonne approximation aux énergies considérées. Ainsi, $r(E, p)$ peut être raisonnablement bien approché par sa valeur recuite :

$$r_a(E, p) = \mathbb{E} [s_D(E, p)] - s_a(E).\tag{34}$$

Enfin, une façon de tester si la distribution d'énergie dans l'état stationnaire est de la forme de Boltzmann (29), est de comparer les histogrammes dynamiques pour deux amplitudes p et p' différentes, où l'on doit alors avoir

$$\begin{aligned} c(E, p, p', N) &= \ln \left(\frac{\mathcal{N}_D(E, p, N)}{\mathcal{N}_D(E, p', N)} \right) \\ &= -(\beta(p) - \beta(p')) E + f(p, p', N). \end{aligned} \quad (35)$$

b) Un test pour la forme canonique de la mesure d'Edwards

I. COMPARAISON ENTRE DISTRIBUTIONS DYNAMIQUE ET D'EDWARDS

La dynamique de tapping du modèle SK est longue à simuler du fait que le système est entièrement connecté. Cependant, il a été remarqué par Parisi qu'une dynamique relaxationnelle séquentielle (où l'ordre de renversement des spins est toujours le même) aboutit à la même énergie qu'une dynamique relaxationnelle aléatoire. Une dynamique relaxationnelle séquentielle permettant d'accélérer notablement la vitesse de blocage, nous avons vérifié qu'en utilisant une telle dynamique, les histogrammes obtenus sont les mêmes que ceux obtenus par une dynamique relaxationnelle aléatoire (les déviations sont très faibles). De ce fait, les courbes présentées ici sont obtenues avec la dynamique séquentielle, qui permet d'effectuer beaucoup plus de tapes.

Sur la figure (IV.19), la variation de $R(E, p, N)$ en fonction de E , pour des valeurs de $N = 15$ à $N = 30$ présente une forme affine de mieux en mieux définie au fur et à mesure que la taille augmente ; ce comportement est observé pour toutes les valeurs de $p \in [0, \frac{1}{2}]$. De plus, le fait que les points forment un nuage de moins en moins diffus indique que la seule condition pour que les états métastables visités par la dynamique aient une distribution de Boltzmann est que la taille soit grande. De plus, cette forme de Boltzmann semble assez robuste, puisqu'elle semble bien s'appliquer pour des systèmes de taille $N = 30$, pour lesquels le nombre total d'états métastables est environ 400.

La valeur de $r_a(E, p)$ obtenue pour $N = 200$ est représentée sur la figure (IV.20). Dans la partie $E > E_{RSB}$, où l'approximation recuite est exacte, la variation est clairement linéaire. De plus, dans la partie $E < E_{RSB}$, où l'approximation RS corrige peu l'approximation recuite, la dépendance est presque linéaire³.

Enfin, sur la figure (IV.21), les valeurs de $c(E, p, p', N)$ obtenues pour $N = 200$ sont représentées. L'accord avec des lignes droites est assez bon. Ici, $N = 200$ permet à la fois d'avoir une taille assez grande pour que l'on puisse calculer r_a en utilisant les résultats $N \rightarrow \infty$ et quand même assez petite pour que les fluctuations d'énergie dans le régime stationnaires soient assez larges. En effet, de grandes fluctuations sont nécessaires pour tenir compte de l'entropie sur une large gamme d'énergie (qui est une fonction de grandes déviations) et pour que les gammes d'énergie obtenues avec des amplitudes différentes aient un recouvrement de taille suffisante.

³Remarquons que le calcul recuit sous-estime la valeur réelle de r_a , et donc une amélioration légère du calcul de la complexité aurait pour effet de diminuer la légère concavité apparente à basse énergie

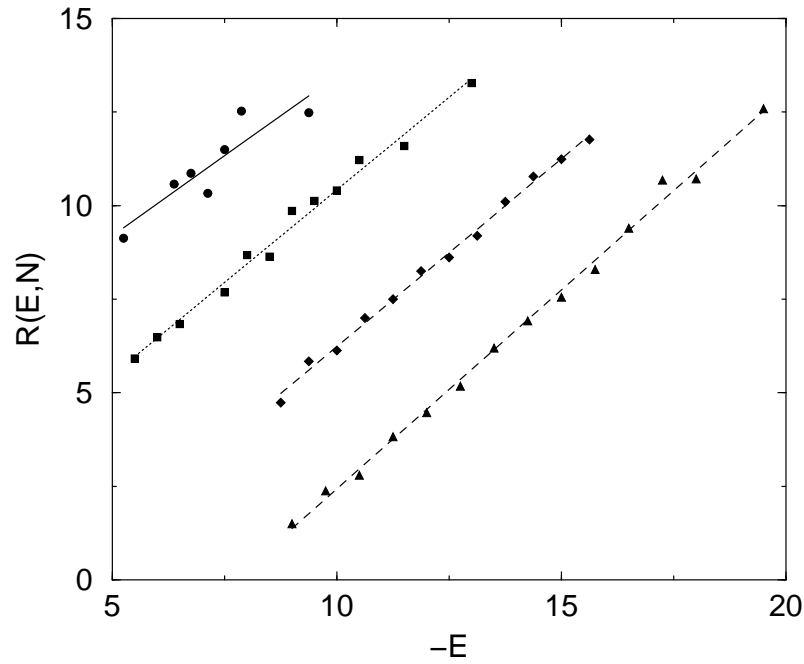


FIG. IV.19 – Valeurs de $R(E, p, N)$ pour $p = 0,3$ et $N = 15$ (cercles), $N = 20$ (carrés), $N = 25$ (losanges) et $N = 30$ (triangles). Les histogrammes ont été obtenus en tapant 10^6 fois, avec une précision d’histogramme de $0,025N$

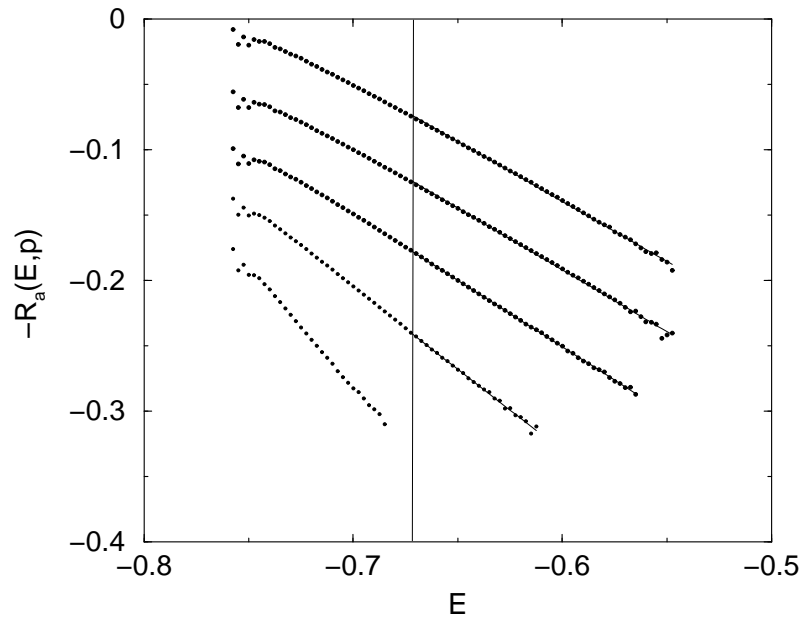


FIG. IV.20 – Valeurs de $r_a(E, p)$ calculées pour un système de $N = 200$ spins. De haut en bas : $p = 0, 1, \dots, 0,5$, les courbes ayant été décalées verticalement pour une meilleure lisibilité. Les régressions linéaires sont indiqués dans la région $E > E_{RSB}$, indiquée par la ligne verticale.

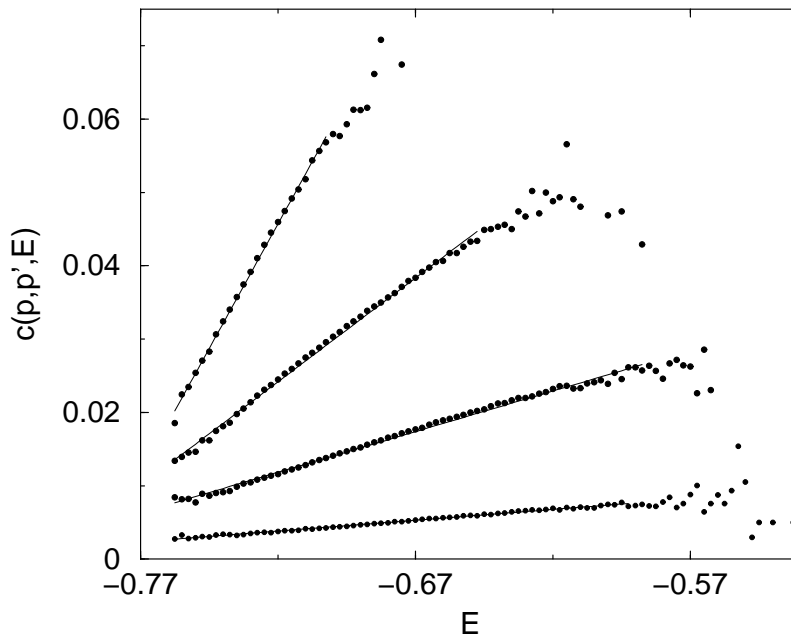


FIG. IV.21 – Valeurs de $c(E, p, p', N)$ calculées pour $N = 200$ spins pendant $5 \cdot 10^6$ tapes. De haut en bas $(p; p')$: $(0,2;0,1)$, $(0,3;0,2)$, $(0,4;0,3)$, $(0,5;0,4)$.

II. UN TEST GÉNÉRAL

Sur le modèle SK, plusieurs tests de la version canonique de la mesure d'Edwards ont été effectués. L'un de ces tests, basé sur l'équation (35), ne fait pas intervenir la connaissance a priori de l'entropie d'Edwards, et il est raisonnable de penser qu'il peut donc être appliqué dans un contexte plus général. En particulier, si l'on revient à la forme originale de la mesure d'Edwards, la distribution dynamique du volumique V est de la forme

$$\rho_{DYN}(V, \Gamma) \propto \exp\left(-\frac{V}{X(\Gamma)} + S_{Edw}(V)\right), \quad (36)$$

où $X(\Gamma)$ est la compactivité. Si (36) est correct, le tracé de $\ln(\rho_{DYN}(V, \Gamma)) - \ln(\rho_{DYN}(V, \Gamma'))$ en fonction de V pour plusieurs valeurs de Γ et Γ' devrait donner des droites, dont la mesure des pentes donnerait la compactivité à une constante additive près. Cependant, la réalisation expérimental de ce test peut s'avérer difficile, car dans les expériences de vibrations, il n'est pas simple de mesurer les fluctuations de densité. Or le test proposé ici met en jeu l'annihilation des courbures des deux histogrammes comparés, ce qui nécessite une bonne précision sur les données.

De plus, tout comme le test proposé par Makse et Kurchan, le test de la mesure d'Edwards est indirect et partiel. En effet, même si des lignes droites sont obtenues, rien n'indique que la fonction de grandes déviations est réellement l'entropie d'Edwards. Dans le cas du modèle SK, la possibilité de calculer cette entropie apporte de l'information supplémentaire. Cependant, même dans ce cas, le test demeure "faible", puisque la forme (29) ne donne pas les poids des configurations, mais la

distribution de probabilité de l'énergie.

Afin de voir quelle information est réellement apportée par ce type de test, il est instructif de l'appliquer à un modèle pour lequel la mesure d'Edwards n'est pas toujours correcte. Un bon exemple est le SCIC, étudié dans une section précédente. Sur la figure (IV.22) sont représentées les fonctions $c(\phi, T, T', N)$ obtenues en tapant des systèmes de $N = 10^5$ spins à l'aide du tapping (TU)⁴. On constate que la dépendance en ϕ est linéaire, alors que la distribution canonique d'Edwards ne décrit pas bien la dynamique. Ce qui se passe dans le SCIC pourrait être le scénario le plus général. Le fait d'obtenir des droites pour $c(\phi, T, T', N)$ signifie que la distribution dynamique à tapping de température T est de la forme

$$\rho_{DYN}(\phi, T, N) \propto e^{-N\gamma(T)\phi + Ns_{DYN}(\phi)}. \quad (37)$$

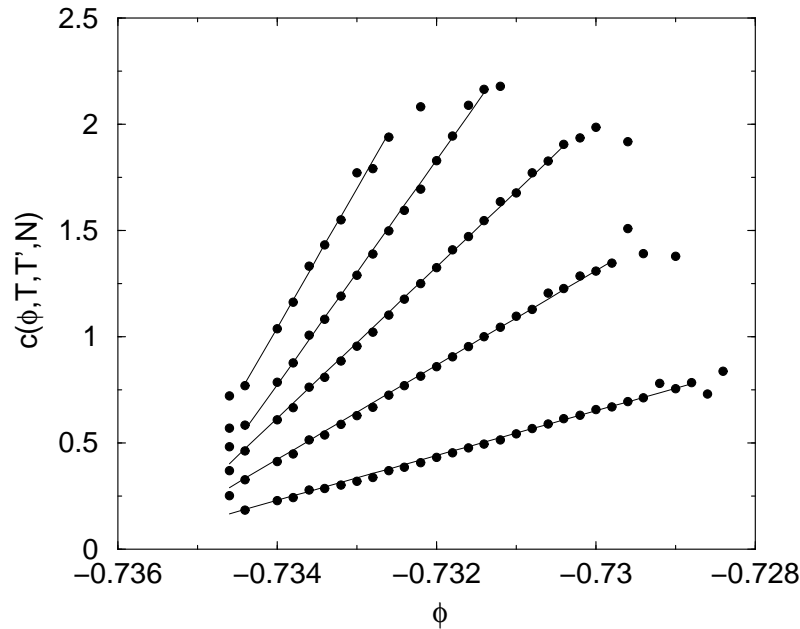


FIG. IV.22 – Valeurs de $c(\phi, T, T', N)$ obtenues à partir d'un tapping (TU) appliqué au SCIC, pour $N = 10^5$ et mesurées pendant 10^5 tapes. De haut en bas $(T; T')$: $(1,9;1,8)$, $(1,9;1,7)$, $(1,9;1,6)$, $(1,9;1,5)$, $(1,9;1,4)$.

Si l'on pose $\gamma(\infty) = 0$, l'équation (37) est trivialement vérifiée si l'entropie dynamique $s_{DYN}(\phi)$ est l'entropie calculée par De Smedt et al. [175]. Cette entropie tient compte des bassins d'attraction des états métastables. L'information importante contenue dans (37) est que le poids de chaque état métastable est indépendant de la façon dont il est accédé. En d'autres termes, un état métastable sera atteint avec la même probabilité (conditionnée par la valeur de la densité moyenne) si l'état excité duquel le système part est complètement aléatoire (grand tapping) ou au

⁴Afin d'éviter la confusion des notations, la densité introduite dans la section sur le SCIC sera notée ϕ .

contraire proche d'un état métastable (faible tapping). Le fait que pour le SCIC la mesure d'Edwards devienne de plus en plus correcte au fur et à mesure que la densité augmente signifie que les courbures des entropies dynamique et d'Edwards se rapprochent à haute densité. Or, la région de haute densité est précisément celle où les états métastables dans lesquels les défauts sont très séparés dominant.

Conclusion

Durant cette thèse, nous nous sommes intéressés au rôle des états métastables dans les systèmes vitreux. En particulier, dans les milieux granulaires, la notion non ambiguë de configuration bloquée a remplacé celle d'état métastable.

Dans le chapitre II, le lien entre la dynamique des verres de spins et la prolifération exponentielle de vallées séparées par des barrières infinies a été discuté. L'accent a été porté sur les configurations stables par renversement de k spins, et plusieurs méthodes pour calculer la complexité Σ_1 ont été exposées. En particulier, il a été montré comment la méthode de la cavité permet d'écrire simplement les équations de col permettant d'obtenir cette complexité. Une extension naturelle de ce calcul est de calculer la complexité Σ_k pour tout k fini, en généralisant de façon systématique la méthode exposée pour le calcul de Σ_1 ; la difficulté réside dans généralisation systématique de la méthode de la cavité au cas où l'on n'ajoute pas un ou deux spins au système, mais une portion d'arbre comportant $k + 1$ spins⁵. Ce calcul de Σ_k devrait fournir des éclaircissements sur la structure des états pertinents à basse température.

Dans le chapitre IV, un algorithme de "tapping" a été introduit, permettant de manipuler de façon aisée un système soumis à une séquence discrète de tapes. Cette dynamique a été utilisée durant cette thèse en vue de modéliser de manière paradigmatique les milieux granulaires. Cependant, ses applications possibles ne se limitent pas à cela. En particulier, cette dynamique permettant de passer d'un état bloqué à un autre, la combiner avec une méthode d'exploration de l'espace des configurations du type de celle introduite par Wang et Landau [193, 194] pourrait être une méthode efficace pour échantillonner l'entropie microcanonique d'Edwards. En ce qui concerne la mesure d'Edwards, qui a été soumise à de nombreux tests à l'aide de l'algorithme de tapping, celle-ci s'est montrée efficace pour décrire l'état stationnaire des systèmes étudiés sous tapping, et nous avons pu dégager de façon concrète les raisons de son efficacité à haute densité; de plus, l'étude d'une classe de modèles sur des graphes aléatoires a permis de montrer que cette mesure permet de déterminer des diagrammes de phase, avec une précision proche de celle de la thermodynamique. Nous avons également décrits des tests a priori réalisables expérimentalement. Ces tests peuvent être réalisés dans plusieurs types de matériaux, incluant les empilements granulaires, les émulsions denses ou les mousses. Les expériences impliquant ces matériaux présentant des difficultés différentes, on peut raisonnablement sup-

⁵la valeur de k se trouve naturellement limitée par le fait que le nombre de paramètres intervenant dans la dynamique de population est $2^k - 1$

poser que l'une d'elles au moins permettra bientôt de confirmer ou d'infirmier la validité de l'approche à la Edwards dans des systèmes réels. De plus, afin de pouvoir utiliser cette approche pour déterminer des diagrammes de phase, il est important d'y incorporer le rôle de paramètres physiques tels la friction ou la masse volumique des grains. D'un point de vue plus formel, mais non moins essentiel, le lien entre les états métastables dans les verres de spins en champ moyen et la dynamique à grands temps reste à être établi rigoureusement, afin de permettre une description quasi-thermodynamique de la dynamique lente des systèmes vitreux.

Enfin, nous avons vu qu'il existe de nombreuses analogies entre les empilements granulaires et les verres structuraux. L'étude de propriétés qui semblent fondamentales dans la compréhension de ces derniers pourrait donner des informations importantes sur la dynamique des milieux granulaires vibrés. En particulier, la dynamique y est fortement hétérogène, et l'étude temporelle des corrélations spatiales des fluctuations locales de densité au voisinage de Γ^* et en dessous devrait permettre de pousser plus loin l'analogie. De plus, le scénario à la Edwards nécessite pour être pertinent qu'il existe une certaine universalité. La recherche de classes d'universalité dans les expériences de manipulations d'empilements granulaires, telles que vibration verticale, vibration horizontale ou cisaillement semble une étape nécessaire à mener pour pousser plus en avant des scénarii tel que celui proposé par Edwards.

Bibliographie

- [1] A. J. Liu et S. R. Nagel, “Jamming is not just cool any more”, *Nature* **396**, 21 (1998).
- [2] I. Gutzow et J. Schmelzer, *The Vitreous State (Thermodynamics, structure, rheology, and crystallization)*, Springer (1995).
- [3] U. Bengtzelius, W. Gotze et A. Sjolander, “Dynamics of supercooled liquids and the glass transition”, *J. Phys. C* **17**, 5915 (1984).
- [4] E. Leutheusser, “Dynamical model for the liquid-glass transition”, *Phys. Rev. A* **29**, 2765 (1984).
- [5] C. A. Angell, “Formation of glasses from liquids and biopolymers”, *Science* **267**, 1924 (1995).
- [6] W. Kauzmann, “The nature of the glassy state and the behavior of liquids at low temperatures”, *Chem. Rev.* **43**, 219 (1948).
- [7] F. H. Stillinger, “Supercooled liquids, glass transitions, and the Kauzmann paradox”, *J. Chem. Phys.* **88**, 7818 (1988).
- [8] J. H. Gibbs et E. A. D. Marzio, “Nature of the glass transition and the glassy state”, *J. Comp. Phys.* **28**, 373 (1958).
- [9] G. Adam et J. H. Gibbs, “The temperature dependence of cooperative relaxation properties in glass-forming liquids”, *J. Comp. Phys.* **43**, (1965, pages=139).
- [10] S. F. Edwards et P. W. Anderson, “Theory of spin glasses”, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).
- [11] J.-P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan et M. Mézard, “Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems”, dans *Spin glasses and random fields* (A. P. Young, éd.), World Scientific (1998).
- [12] L. F. Cugliandolo et J. Kurchan, “Analytical solution of the off-equilibrium dynamics of a long range spin-glass model”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 173 (1993).
- [13] L. F. Cugliandolo et J. Kurchan, “Aging and effective temperatures in the low temperature mode-coupling equations”, *Progress in Theor. Phys.* **126**, 407 (1997).
- [14] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan et L. Peliti, “Energy flow, partial equilibration, and effective temperatures in systems with slow dynamics”, *Phys. Rev. E* **55**, 3898 (1997).

- [15] D. Sherrington et S. Kirkpatrick, “Solvable model of a spin glass”, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [16] J.-L. Barrat et W. Kob, “Fluctuation-dissipation ratio in an aging Lennard-Jones glass”, *Europhys. Lett.* **46**, 637 (1999).
- [17] L. Berthier, J.-L. Barrat et J. Kurchan, “A two-time-scale, two-temperature scenario for nonlinear rheology”, *Phys. Rev. E* **61**, 5464 (2000).
- [18] L. Berthier et J.-L. Barrat, “Fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid”, *Phys. Rev. E* **63**, 012503 (2000).
- [19] L. Berthier et J.-L. Barrat, “Shearing a glassy material : numerical tests of nonequilibrium mode-coupling approaches and experimental proposals”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 095702 (2002).
- [20] L. Berthier et J.-L. Barrat, “Nonequilibrium dynamics and fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid”, *J. Chem. Phys.* **116**, 6228 (2002).
- [21] A. J. Kovacs, “Glass transition in amorphous polymers : a phenomenological study”, *Adv. Polym. Sci.* **3**, 394 (1963).
- [22] A. J. Kovacs, “Isobaric volume and enthalpy recovery of glasses. II A transparent multiparameter theory”, *J. Polym. Sci.* **17**, 1097 (1979).
- [23] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J.-P. Bouchaud et P. Nordblå, “Memory and chaos effects in spin glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3243 (1998).
- [24] E. Vincent, F. Alet, M. Alba, J. Hammann, M. Ocio et J.-P. Bouchaud, “Aging phenomena in spin glasses and frustrated ferromagnets”, *Physica B* **280**, 260 (2000).
- [25] C. Jossierand, A. V. Tkachenko, D. M. Mueth et H. M. Jaeger, “Memory effects in granular materials”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3632 (2000).
- [26] L. Bellon, S. Ciliberto et C. Laroche, “Memory in the aging of a polymer glass”, *Europhys. Lett.* **51**, 551 (2000).
- [27] V. Viasnoff et F. Lequeux, “Rejuvenation and overaging in a colloidal glass under shear”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 065701 (2002).
- [28] J.-P. Bouchaud, V. Dupuis, J. Hammann et E. Vincent, “Separation of time and length scales in spin glasses : temperature as a microscope”, *Phys. Rev. B* **65**, 024439 (2002).
- [29] M. Sasaki, V. Dupuis, J.-P. Bouchaud et E. Vincent, “Deviations from perfect memory in spin glass temperature cycling experiments”, *Eur. Phys. J B* **29**, 469 (2002).
- [30] K. H. Fischer et J. A. Hertz, *Spin Glasses*, Cambridge University Press (1991).
- [31] M. Mézard, G. Parisi et M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*, Singapore, World Scientific (1987).
- [32] G. Toulouse, “Theory of the frustration effect in spin glasses”, *Comm. Phys.* **2**, 965 (1977).
- [33] G. Parisi, “Infinite number of order parameters for spin-glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).

-
- [34] D. S. Fisher et D. A. Huse, “Ordered phase of short-range Ising spin-glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
- [35] A. J. Bray et M. A. Moore, “Chaotic nature of the spin-glass phase”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 57 (1987).
- [36] C. de Dominicis et I. Kondor, “Eigenvalues of the stability matrix for Parisi solution of the long-range spin-glass”, *Phys. Rev.* **27**, 606 (1982).
- [37] M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas et G. T. and, “On the nature of the spin-glass phase”, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1156 (1984).
- [38] A. Billoire et E. Marinari, “Correlation timescales in the Sherrington-Kirkpatrick model”, *J. Phys. A* **34**, L727 (2001).
- [39] D. J. Thouless, P. W. Anderson et R. G. Palmer, “Solution of a solvable model of spin-glass”, *Phil. Mag.* **35**, 593 (1977).
- [40] C. de Dominicis, M. Gabay, T. Garel et H. Orland, “White and weighted averages over solutions of Thouless Anderson Palmer equations for the Sherrington Kirkpatrick spin glass”, *J. Physique I (France)* **41**, 923 (1980).
- [41] A. Crisanti et H. J. Sommers, “The spherical p-spin interaction spin glass model : the statics”, *Z. f. Physik B* **87**, 341 (1992).
- [42] A. Crisanti et H. J. Sommers, “On the TAP approach to the spherical p-spin spin glass model”, *J. Physique I (France)* **5**, 805 (1995).
- [43] R. Monasson, “Structural glass transition and the entropy of the metastable states”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2847 (1995).
- [44] A. Cavagna, I. Giardinia et G. Parisi, “Stationary points of the Thouless-Anderson-Palmer free energy”, *Phys. Rev. B* **57**, 11251 (1998).
- [45] A. Cavagna, I. Giardinia et G. Parisi, “Role of saddles in mean-field dynamics above the glass transition”, *J. Phys. A* **34**, 5317 (2001).
- [46] J. Kurchan et L. Laloux, “Phase-space geometry and slow dynamics”, *J. Phys. A* **29**, 1929 (1996).
- [47] G. Biroli, “Dynamical TAP approach to mean field glassy systems”, *J. Phys. A* **32**, 8365 (1999).
- [48] T. R. Kirkpatrick et D. Thirumalai, “p-spin interactions spin glass models : connections with the structural glass problem”, *Phys. Rev. B* **36**, 5388 (1987).
- [49] T. R. Kirkpatrick et P. G. Wolynes, “Connection between some kinetic and equilibrium theories of the glass transition”, *Phys. Rev. A* **35**, 3072 (1987).
- [50] T. R. Kirkpatrick et D. Thirumalai, “Random solutions from a regular density functional Hamiltonian : a static and dynamical theory for the structural glass transition”, *J. Phys. A* **22**, L149 (1989).
- [51] T. S. Grigera, A. Cavagna, I. Giardinia et G. Parisi, “Geometric approach to the dynamic glass transition”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 055502 (2002).
- [52] K. Broderix, K. K. Bhattacharya, A. Cavagna, A. Zippelius et I. Giardinia, “Energy landscape of a Lennard-Jones liquid : statistics of stationary points”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5360 (2000).

- [53] S. Sastry et P. G. Debenedetti, “Signatures of distinct dynamical regimes in the energy landscape of a glass-forming liquid”, *Nature* **393**, 554 (1998).
- [54] S. Sastry, “The relationship between fragility, configurational entropy and the potential energy landscape of glass-forming liquids”, *Nature* **409**, 164 (2001).
- [55] L. Viana et A. J. Bray, “Phase diagrams for dilute spin glasses”, *J. Phys. C* **18**, 3037 (1985).
- [56] I. Kanter et H. Sompolinsky, “Mean-field theory of spin-glasses with finite connectivity number”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 164 (87).
- [57] P. Mottishaw et C. de Dominicis, “On the stability of randomly frustrated systems with finite connectivity”, *J. Phys. A* **20**, L375 (1987).
- [58] P. Mottishaw, “Replica symmetry breaking and the spin-glass on a Bethe lattice”, *Europhys. Lett.* **3**, 333 (1988).
- [59] R. Monasson, “Optimization problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin glasses”, *J. Phys. A* **31**, 513 (1998).
- [60] C. de Dominicis et Y. Goldschmidt, “Replica symmetry breaking in finite connectivity systems : a large connectivity expansion at finite and zero temperature”, *J. Phys. A* **22**, L775 (1985).
- [61] Y. Goldschmidt et C. de Dominicis, “Replica symmetry breaking in the spin-glass model on lattices with finite connectivity : application to graph partitioning”, *Phys. Rev. B* **41**, 2184 (1990).
- [62] D. R. Bowman et K. Levin, “Spin-glass theory in the Bethe approximation : insights and problems”, *Phys. Rev. B* **25**, 3438 (1982).
- [63] D. J. Thouless, “Spin-glass on a Bethe lattice”, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1082 (1986).
- [64] J. M. Carlson, J. T. Chayes, L. Chayes, J. P. Sethna et D. J. Thouless, “Critical behavior of the Bethe lattice spin glass”, *Europhys. Lett.* **5**, 255 (1998).
- [65] M. Mézard et G. Parisi, “The Bethe lattice spin glass revisited”, *Eur. Phys. J B* **20**, 217 (2001).
- [66] S. A. Cook, “The complexity of theorem-proving procedures”, *Proc. 3rd Ac. Symp. on Theor. of Computing* page 151 (1971).
- [67] M. Agrawal, N. Kayal et N. Saxena Disponible sur le site internet : <http://www.cse.iitk.ac.in/news/primalty.pdf>
- [68] M. Davis et H. Putnam, “A computing procedure for quantification theory”, *J. Assoc. Comput. Mach.* **7**, 201 (1960).
- [69] R. Monasson et R. Zecchina, “Entropy of the k-satisfiability problem”, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3881 (1996).
- [70] R. Monasson et R. Zecchina, “Statistical mechanics of the k-satisfiability model”, *Phys. Rev. E* **56**, 1357 (1997).
- [71] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman et L. Troyansky, “Determining computational complexity from characteristic “phase transitions””, *Nature* **400**, 133 (1999).

- [72] G. Biroli, R. Monasson et M. Weigt, “A variational description of the ground state structure in random satisfiability problems”, *Eur. Phys. J B* **14**, 551 (2000).
- [73] M. Mézard, G. Parisi et R. Zecchina, “Analytic and algorithmic solutions of random satisfiability problems”, *Science* **297**, 812 (2002).
- [74] M. Mézard et R. Zecchina, “The random K-satisfiability problem : from an analytic solution to an efficient algorithm”, *Phys. Rev. E* **66**, 056126 (2002).
- [75] F. R. Tersenghi, M. Weigt et R. Zecchina, “Simplest random K-satisfiability problem”, *Phys. Rev. E* **63**, 026702 (2001).
- [76] S. Franz, M. Leone, F. Ricci-Tersenghi et R. Zecchina, “Exact solutions for diluted spin glasses and optimization problems”, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 127209 (2001).
- [77] S. Cocco, O. Dubois, J. Mandler et R. Monasson, “Rigorous decimation-based construction of ground pure states for spin-glass models on random lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047205 (2003).
- [78] M. Mézard, F. R. Tersenghi et R. Zecchina, “Two solutions to diluted p-spin models and XORSAT problems”, *J. Stat. Phys.* **111**, 505 (2003).
- [79] S. Franz, M. Leone, A. Montanari et F. R. Tersenghi, “Dynamic phase transition for decoding algorithms”, *Phys. Rev. E* **66**, 046120 (2002).
- [80] R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt et R. Zecchina, “Coloring random graphs”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 268701 (2002).
- [81] H. Rieger et T. R. Kirkpatrick, “Disordered p-spin interaction models on Husimi trees”, *Phys. Rev. B* **45**, 9772 (1992).
- [82] C. Bachas, C. de Calan et P. Petropoulos, “Quenched random graphs”, *J. Phys. A* **27**, 6121 (1994).
- [83] A. K. Hartmann et M. Weigt, “Statistical mechanics perspective on the phase transition in vertex covering of finite-connectivity”, *Theoretical Comput. Sci.* **265**, 199 (2001).
- [84] C. F. Baillie, W. Janke, D. A. Johnston et P. Plehac, “Spin glasses on thin graphs”, *Nucl. Phys. B* **450**, 730 (1995).
- [85] D. A. Johnston et P. Plehac, “Equivalence of ferromagnetic spin models on trees and random graphs”, *J. Phys. A* **31**, 475 (1998).
- [86] W. Janke et D. A. Johnston, “Ising and Potts models on quenched random gravity graphs”, *Nucl. Phys. B* **578**, 681 (2000).
- [87] J.-P. Bouchaud, “Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems”, *J. Physique I (France)* **2**, 1705 (1992).
- [88] J.-P. Bouchaud et D. S. Dean, “Aging in Parisi’s Tree”, *J. Physique I (France)* **5**, 265 (1995).
- [89] A. Barrat et M. Mézard, “Phase space diffusion and low temperature aging”, *J. Physique I (France)* **5**, 941 (1995).

- [90] V. Desoutter et N. Destainville, “Slow dynamics due to entropic barriers in the one-dimensional “descent model””, *Cond-mat* page 0302185 (2003).
- [91] S. Franz et F. Ritort, “Dynamical solution of a model without energy barriers”, *Europhys. Lett.* **31**, 507 (1995).
- [92] S. Franz et F. Ritort, “Glassy mean-field dynamics of the Backgammon model”, *J. Stat. Phys.* **85**, 131 (1996).
- [93] S. Franz et F. Ritort, “Relaxational processes and entropic traps in the Backgammon model”, *J. Phys. A* **30**, L357 (1997).
- [94] G. Biroli et R. Monasson, “From inherent structures to pure states : Some simple remarks and examples”, *Europhys. Lett.* **50**, 155 (2000).
- [95] A. Cavagna, I. Giardina, G. Parisi et M. Mézard, “On the formal equivalence of the TAP and thermodynamic methods in the SK model”, *J. Phys. A* **36**, 1175 (2003).
- [96] J. R. L. de Almeida et D. J. Thouless, “Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model”, *J. Phys. A* **11**, 983 (1978).
- [97] D. S. Dean, “On the metastable states of the zero-temperature SK model”, *J. Phys. A* **27**, L899 (1994).
- [98] G. Biroli et J. Kurchan, “Metastable states in glassy systems”, *Phys. Rev. E* **64**, 016101 (2001).
- [99] S. Franz et M. A. Virasoro, “Quasi-equilibrium interpretation of aging dynamics”, *J. Phys. A* **33**, 891 (2000).
- [100] A. Barrat, S. Franz et G. Parisi, “Temperature evolution and bifurcations of metastable states in mean-field spin glasses, with connections with structural glasses”, *J. Phys. A* **30**, 5593 (1997).
- [101] A. Cavagna, I. Giardina et T. S. Grigera, “Relaxational dynamics in a single saddle”, *Cond-mat* page 0212438 (2002).
- [102] L. F. Cugliandolo et J. Kurchan, “On the out of equilibrium relaxation of the Sherrington-Kirkpatrick model”, *J. Phys. A* **27**, 5749 (1994).
- [103] M. Goldstein, “Viscous liquids and the glass transition : a potential energy barrier picture”, *J. Chem. Phys.* **51**, 3728 (1969).
- [104] F. H. Stillinger et T. A. Weber, “Hidden structure in liquids”, *Phys. Rev. A* **25**, 978 (1982).
- [105] F. Sciortino, W. Kob et P. Tartaglia, “Inherent structure entropy of supercooled liquids”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3214 (1999).
- [106] A. Crisanti et F. Ritort, “Activated processes and Inherent Structure dynamics of finite-size mean-field models for glasses”, *Europhys. Lett.* **52**, 640 (2000).
- [107] A. Crisanti et F. Ritort, “Potential energy landscape of finite-size mean-field models for glasses”, *Europhys. Lett.* **51**, 147 (2000).
- [108] A. Crisanti, F. Ritort, A. Rocco et M. Sellitto, “Inherent structures and nonequilibrium dynamics of one-dimensional constrained kinetic models : a comparison study”, *J. Chem. Phys.* **113**, 10615 (2000).

-
- [109] F. Sciortino et P. Tartaglia, “Extension of the fluctuation-dissipation theorem to the physical aging of a model glass-forming liquid”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 107 (2001).
- [110] A. Crisanti, F. Ritort, A. Rocco et M. Sellitto, “Is the Stillinger and Weber decomposition relevant for coarsening models?”, *J. Phys. Cond. Matt.* **14**, 1523 (2002).
- [111] T. Li, “Structure of metastable states in a random Ising chain”, *Phys. Rev. B* **24**, 6579 (1981).
- [112] R. Ettelaie et M. Moore, “Residual entropy and simulated annealing”, *J. Physique Lett.* **46**, 893 (1985).
- [113] b Derrida et E. Gardner, “Metastable states of a spin glass chain at zero temperature”, *J. Physique I (France)* **47**, 959 (1986).
- [114] A. Lefèvre et D. S. Dean, “Metastable states of a ferromagnet on random thin graphs”, *Eur. Phys. J B* **21**, 121 (2001).
- [115] A. Lefèvre et D. S. Dean, “Phase transitions in the steady state behavior of mechanically perturbed spin glasses and ferromagnets”, *Phys. Rev. B* **65(R)**, 220403 (2002).
- [116] A. J. Bray et M. A. Moore, “Metastable states in spin glasses”, *J. Phys. C* **13**, L469 (1980).
- [117] A. J. Bray et M. A. Moore, “Metastable states in spin glasses with short-ranged interactions”, *J. Phys. C* **14**, 1313 (1981).
- [118] R. Cherrier, D. S. Dean et A. Lefèvre, “The number of metastable states in the generalized random orthogonal model”, *J. Phys. A* **36**, 3935 (2003).
- [119] D. S. Dean, “Metastable states of spin glasses on random thin graphs”, *Eur. Phys. J B* **15**, 493 (2000).
- [120] J. Berg et M. Sellitto, “Metastable configurations of spin models on random graphs”, *Phys. Rev. E* **65**, 016115 (2002).
- [121] A. Pagnani, G. Parisi et M. Ratiéville, “Metastable configurations on the Bethe lattice”, *Phys. Rev. E* **67**, 026116 (2003).
- [122] H. M. Jaeger et S. R. Nagel, “La physique de l’état granulaire”, *La Recherche* **249**, 1380 (1992).
- [123] G. Y. Onoda et E. G. Liniger, “Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset”, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2727 (1990).
- [124] F. Rouyer et N. Menon, “Velocity fluctuations in a homogeneous 2D granular gas in steady state”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3679 (2000).
- [125] Y. Forterre et O. Pouliquen, “Longitudinal vortices in granular flows”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2001 (5886).
- [126] W. V. Megeen et S. M. Underwood, “Glass transition in colloidal hard spheres : measurement and mode-coupling-theory analysis of the coherent intermediate scattering function”, *Phys. Rev. E* **49**, 4206 (1994).

- [127] E. R. Weeks et D. A. Weitz, “Properties of cage rearrangements observed near the colloidal glass transition”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 095704 (2002).
- [128] M. E. cates, J. P. Wittmer, J.-P. Bouchaud et P. Claudin, “Jamming, force chains, and fragile matter”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1841 (1998).
- [129] G. D’Anna et G. Gremaud, “Vibration-induced jamming transition in granular media”, *Phys. Rev. E* **64**, 011306 (2001).
- [130] G. D’Anna et G. Gremaud, “Activated-like hopping transition in weakly vibrated granular media”, *Europhys. Lett.* **54**, 599 (2001).
- [131] G. D’Anna et G. Gremaud, “The jamming route to the glassy state in weakly perturbed granular media”, *Nature* **413**, 407 (2001).
- [132] P. Philippe et D. Bideau, “Compaction dynamics of a granular medium under vertical tapping”, *Europhys. Lett.* **60**, 677 (2002).
- [133] J. B. Knight, C. Fandrich, C. N. Lau, H. M. Jaeger et S. R. Nagel, “Density relaxation in vibrated granular materials”, *Phys. Rev. E* **51**, 3957 (1995).
- [134] L. A. Pugnaloni, G. C. Barker et A. Mehta, “Multi-particle structures in non-sequentially reorganized hard sphere deposits”, *Adv. in Compl. Sys.* **4**, 289 (2001).
- [135] E. R. Nowak, J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger et S. R. Nagel, “Density fluctuations in vibrated granular materials”, *Phys. Rev. E* **57**, 1971 (1998).
- [136] G. C. Barker et A. Mehta, “Vibrated powders : structure, correlations, and dynamics”, *Phys. Rev. A* **45**, 3435 (1992).
- [137] G. C. Barker et A. Mehta, “Transient phenomena, self-diffusion, and orientational effects in vibrated powders”, *Phys. Rev. E* **47**, 184 (1993).
- [138] A. Mehta et G. C. Barker, “Glassy dynamics in granular compaction”, *J. Phys. Cond. Matt.* **12**, 6619 (2000).
- [139] A. Barrat et V. Loreto, “Response properties in a model for granular matter”, *J. Phys. A* **33**, 4401 (2000).
- [140] E. Ben-Naim, J. B. Knight, E. R. Nowak, H. R. Jaeger et S. R. Nagel, “Slow relaxation in granular compaction”, *Physica D* **123**, 380 (1998).
- [141] T. Boutreux et P. G. de Gennes, “Compaction of granular mixtures : a free volume model”, *Physica A* **244**, 59 (1997).
- [142] P. L. Krapivsky et E. Ben-Naim, “Collective properties of adsorption-desorption processes”, *J. Chem. Phys.* **100**, 6778 (1994).
- [143] A. J. Kolan, E. R. Nowak et A. V. Tkachenko, “Glassy behavior of the parking lot model”, *Phys. Rev. E* **59**, 3094 (1999).
- [144] D. A. Head et G. J. Rodgers, “A coarse-grained model for granular compaction and relaxation”, *J. Phys. A* **31**, 107 (1998).
- [145] D. A. Head, “Phenomenological glass model for vibratory granular compaction”, *Phys. Rev. E* **62**, 2439 (2000).
- [146] R. Stinchcombe et M. Depken, “Marginal scaling scenario and analytic results for a glassy compaction model”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 125701 (2002).

- [147] A. Barrat et V. Loreto, “Memory in aged granular media”, *Europhys. Lett.* **53**, 297 (2001).
- [148] J. J. Brey et A. Prados, “Linear response of vibrated granular systems to sudden changes in the vibration intensity”, *Phys. Rev. E* **63**, 061301 (2001).
- [149] E. R. Nowak, A. Grushin et A. C. B. Barnum, “Density-noise power fluctuations in vibrated granular media”, *Phys. Rev. E* **63**, 020301 (2001).
- [150] A. Mehta et G. C. Barker, “Vibrated powders : a microscopic approach”, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 394 (1991).
- [151] G. D’Anna, P. Mayor, G. Gremaud, A. Barrat et V. Loreto, “Extreme events-driven glassy behaviour in granular media”, *Europhys. Lett.* **61**, 60 (2003).
- [152] O. Pouliquen, M. Nicolas et P. D. Weidman, “Crystallization of non-Brownian spheres under horizontal shaking”, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 3640 (1997).
- [153] M. Nicolas, P. Duru et O. Pouliquen, “Compaction of a granular material under cyclic shear”, *Eur. Phys. J. E* **3**, 309 (2000).
- [154] G. C. Barker et A. Mehta, “Inhomogeneous relaxation in vibrated granular media : consolidation waves”, *Phase Transit.* **75**, 519 (2002).
- [155] S. F. Edwards et R. B. S. Oakeshott, “Theory of powders”, *Physica A* **157**, 1080 (1989).
- [156] A. Mehta et S. F. Edwards, “Statistical mechanics of powder mixtures”, *Physica A* **157**, 1091 (1989).
- [157] S. F. Edwards, “The role of entropy in the specification of a powder”, dans *Granular Media : An Interdisciplinary Approach* (A. Mehta, éd.), Springer-Verlag, New York (1994).
- [158] R. B. S. Oakeshott et S. F. Edwards, “Perturbative theory of the packing of mixtures and of nonspherical particles”, *Physica A* **202**, 482 (1994).
- [159] R. Monasson et O. Pouliquen, “Entropy of particle packings : an illustration on a toy model”, *Physica A* **236**, 395 (1997).
- [160] M. Potters et G. Parisi, “Mean-field equations for spin models with orthogonal interaction matrices”, *J. Phys. A* **28**, 5267 (1995).
- [161] R. Cherrier, D. S. Dean et A. Lefèvre, “The role of the interaction matrix in mean field spin glasses”, *Phys. Rev. E* **67**, 046112 (2002).
- [162] J. Kurchan, “Emergence of macroscopic temperatures in systems that are not thermodynamical microscopically : towards a thermodynamical description of slow granular rheology”, *J. Phys. Cond. Matt.* **12**, 6611 (2000).
- [163] A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto et M. Sellito, “Edwards’ Measures for Powders and Glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5034 (2000).
- [164] A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto et M. Sellito, “Edwards’ measures : a thermodynamic construction for dense granular media and glasses”, *Phys. Rev. E* **63**, 051301 (2001).

- [165] W. Kob et H. C. Andersen, “Kinetic lattice-gas model of cage effects in high-density liquids and a test of mode-coupling theory of the ideal-glass transition”, *Phys. Rev. E* **48**, 4364 (1993).
- [166] M. Sellitto, “Fluctuation-dissipation ratio of lattice-gas models with kinetic constraints”, *Eur. Phys. J B* **4**, 135 (1998).
- [167] E. Caglioti, V. Loreto, H. J. Herrmann et M. Nicodemi, “A ”Tetris-like” model for the compaction of dry granular media”, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1575 (1997).
- [168] T. Nattermann, “Theory of the random field Ising model”, dans *Spin glasses and random fields* (A. P. Young, éd.), World Scientific (1998).
- [169] V. Colizza, A. Barrat et V. Loreto, “Definition of temperature in dense granular media”, *Phys. Rev. E* **65**, 050301 (2002).
- [170] V. Colizza, A. Barrat et V. Loreto, “Fluctuation-dissipation ratio for compacting granular media”, *Phys. Rev. E* **66**, 011310 (2002).
- [171] J. Berg et A. Mehta, “On random graphs and the statistical mechanics of granular matter”, *Europhys. Lett.* **56**, 784 (2001).
- [172] J. Berg et A. Mehta, “Glassy dynamics in granular compaction : sand on random graphs”, *Phys. Rev. E* **65**, 031305 (2002).
- [173] D. S. Dean et A. Lefèvre, “Tapping spin glasses and ferromagnets on random graphs”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5639 (2001).
- [174] D. S. Dean et A. Lefèvre, “Steady state behavior of mechanically perturbed spin glasses and ferromagnets”, *Phys. Rev. E* **64**, 046110 (2001).
- [175] D. de Smedt, D. Godreche et J.-M. Luck, “Jamming, freezing and metastability in one-dimensional spin systems”, *Eur. Phys. J B* **27**, 363 (2002).
- [176] R. J. Glauber, “Time-dependent statistics of the Ising model”, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [177] V. Privman, “Exact solution of a phase separation model with conserved order parameter dynamics”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3686 (1992).
- [178] B. Derrida et R. Zeitak, “Distribution of domain sizes in the zero temperature Glauber dynamics of the 1d Potts model”, *Phys. Rev. E* **54**, 2513 (1996).
- [179] T. Masser et D. ben Avraham, “Kinetics of coalescence, annihilation, and the q-state Potts model in one dimension”, *Phys. Lett. A* **275**, 382 (2000).
- [180] A. Lefèvre et D. S. Dean, “Tapping thermodynamics of the one dimensional Ising model”, *J. Phys. A* **34**, L213 (2001).
- [181] J. J. Brey, A. Prados et B. S. Ray, “Thermodynamic description in a simple model for granular compaction”, *Physica A* **275**, 310 (2000).
- [182] J. Berg, S. Franz et M. Sellitto, “Testing the Edwards hypothesis in spin systems under tapping dynamics”, *Eur. Phys. J B* **26**, 349 (2002).
- [183] A. Lefèvre, “Edwards measure and the steady state regime of a model with kinetic constraints under tapping”, *J. Phys. A* **35**, 9037 (2002).
- [184] D. Brone et F. J. Muzzio, “Size segregation in vibrated granular systems : a reversible process”, *Phys. Rev. E* **56**, 1059 (1997).

-
- [185] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz et R. H. Swendsen, “Why the Brazil nuts are on top : size segregation of particulate matter by shaking”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1038 (1987).
- [186] R. Jullien, P. Meakin et A. Pavlovitch, “Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 640 (1992).
- [187] D. C. Hong, P. V. Quinn et S. Luding, “Reverse Brazil nut problem : competition between percolation and condensation”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3423 (2001).
- [188] A. Fierro, M. Nicodemi et A. Coniglio, “Thermodynamics and statistical mechanics of frozen systems in inherent states”, *Phys. Rev. E* **66**, 061301 (2002).
- [189] M. Nicodemi, A. Fierro et A. Coniglio, “Segregation in hard-sphere mixtures under gravity. An extension of Edwards approach with two thermodynamical parameters”, *Europhys. Lett.* **60**, 2002 (684).
- [190] H. Makse et J. Kurchan, “Testing the thermodynamic approach to dense granular matter with a numerical model of a decisive experiment”, *Nature* **415**, 614 (2002).
- [191] D. S. Dean et A. Lefèvre, “A possible test of the thermodynamic approach to granular media”, *Phys. Rev. Lett.* (2003)., In press
- [192] S. A. Roberts, “Metastable states and innocent replica theory in an Ising spin glass”, *J. Phys. C* **14**, 3015 (1981).
- [193] F. G. Wang et D. P. Landau, “Determining the density of states for classical statistical models : a random walk algorithm to produce a flat histogram”, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
- [194] F. G. Wang et D. P. Landau, “Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).

Publications

Revue à comité de lecture

1. A. Lefèvre et D. S. Dean, *Metastable states of a ferromagnet on random thin graphs*, Eur. Phys. J. B **21**, 121-128 (2001).
2. A. Lefèvre et D. S. Dean, *Tapping thermodynamics of the one dimensional Ising model*, J. Phys. A **34**, L213-L220 (2001).
3. D. S. Dean et A. Lefèvre, *Tapping spin glasses and ferromagnets on random graphs*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5639-5642 (2001).
4. D. S. Dean et A. Lefèvre, *Steady state behavior of mechanically perturbed spin glasses and ferromagnets*, Phys. Rev. E. **64**, 046110 (2001).
5. A. Lefèvre et D. S. Dean, *Phase transitions in the steady state behavior of mechanically perturbed spin glasses and ferromagnets*, Phys. Rev. B **65**, 220403(R) (2002).
6. A. Lefèvre, *Edwards measure and the steady state regime of a model with kinetic constraints under tapping*, J. Phys. A **35**, 9037 (2002).
7. R. Cherrier, D. S. Dean et A. Lefèvre, *The role of the interaction matrix in mean field spin glasses*, Phys. Rev. E **67**, 046112 (2002).
8. R. Cherrier, D. S. Dean et A. Lefèvre, *The number of metastable states in the random orthogonal model*, J. Phys. A **36**, 3935 (2003).
9. D. S. Dean et A. Lefèvre, *Possible test of the thermodynamic approach to granular media*, Phys. Rev. Lett. **90**, 198301 (2003).

Annales de conférences

1. D. S. Dean et A. Lefèvre, *Steady State Behavior of the Tapped Ising Model*, Adv. Comp. Sys., **4** (4), 333-343 (2001), compte-rendu pour la conférence *Challenges in Granular Physics*, 7-11 August 2001.

États métastables dans les systèmes vitreux : des verres de spins aux milieux granulaires

Les matériaux vitreux sont caractérisés par l'existence d'un grand nombre d'états métastables. Parmi ceux-ci, les verres de spins sont les systèmes les plus étudiés et les mieux connus. À l'opposé, l'appartenance des empilements granulaires à la classe des systèmes vitreux est récente, et le rôle des états métastables n'y est pas encore bien compris. Dans cette thèse, les connaissances acquises sur les verres de spins sont mises à profit pour étudier la dynamique stationnaire des milieux granulaires vibrés.

Dans une première partie, les propriétés dynamiques essentielles des modèles de verres de spins en champ-moyen sont passées en revues. La notion d'état métastable est ensuite discutée, ainsi que le lien avec la perte d'ergodicité dans la phase vitreuse. Enfin, plusieurs méthodes numériques et analytiques permettant de calculer l'entropie configurationnelle sont exposées en détail.

La seconde partie traite des états métastables dans les milieux granulaires. Un algorithme de "tapping" y est introduit, permettant d'obtenir un modèle paradigmatique pour l'étude des systèmes granulaires vibrés, partiellement accessible analytiquement. Le scénario proposé par Edwards selon lequel dans l'état stationnaire tous les états métastables sont visités avec la même probabilité est testée sur plusieurs modèles. L'étude de modèles unidimensionnels permet de comprendre la validité de cette approche aux grandes densités, alors que l'étude de modèles sur des graphes aléatoires montre que la mesure d'Edwards permet de décrire de façon précise des phénomènes non triviaux comme des transitions de phase. Enfin, des tests permettant de vérifier expérimentalement cette approche sont proposés.

Metastable states in glassy systems : from spin glasses to granular media

Glassy materials are characterised by the existence of a large number of metastable states. Amongst these systems spin glasses are the most studied and understood. However dense granular media have recently been shown to be glassy systems, and the role of metastable states here is not yet well understood. In this thesis results and analogies with spin glasses are exploited to study the stationary regime of vibrated granular media.

In the first part of the thesis, the principal properties of the dynamics of mean-field spin glasses are reviewed. The concept of metastable states is discussed along with their role in ergodicity breaking in the glassy phase. Finally several techniques, both analytic and numeric, to calculate the entropy of metastable states are presented in detail.

The second part of the thesis treats metastable states in granular systems. A tapping dynamics is introduced leading to a, partially analytically tractable, model which serves as a paradigm for vibrated granular media. The scenario proposed by Edwards, where in the stationary state all metastable states are visited with the same probability, is tested on several models. The study of certain one-dimensional models permits one to understand the validity of this approach at high densities, while the study of models on random graphs demonstrates that the Edwards measure allows a description of non-trivial phenomena such as phase transitions. Finally, various tests to verify this approach on experimental systems are proposed.