



HAL
open science

Vers une physique statistique du pliage et du froissage de structures élastiques

Laurent Boué

► **To cite this version:**

Laurent Boué. Vers une physique statistique du pliage et du froissage de structures élastiques. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2008. Français. NNT: . tel-00391409

HAL Id: tel-00391409

<https://theses.hal.science/tel-00391409>

Submitted on 4 Jun 2009

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.

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
Département de Physique
Laboratoire de Physique Statistique



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI

Présentée par

Laurent Boué

pour obtenir le titre de Docteur de l'Université Paris VI

Spécialité : Constituants élémentaires - systèmes complexes

**Vers une physique statistique du pliage
et du froissage de structures élastiques**

Soutenance prévue le 21 novembre 2008 devant le jury composé de :

| | |
|---------------------------------|------------|
| Mokhtar Adda-Bedia | Invité |
| Lydéric Bocquet | Examineur |
| Arezki Boudaoud | Directeur |
| Françoise Brochard-Wyart | Examineur |
| Enrique Cerda | Rapporteur |
| David Dean | Rapporteur |
| Chaouqi Misbah | Examineur |

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Confinement : tour d’horizon | 5 |
| 1.1 | Empilement de sphères dures | 5 |
| 1.1.1 | Une question qui traverse les siècles | 5 |
| 1.1.2 | Espaces de dimensions élevées | 8 |
| 1.1.3 | Polydispersité | 9 |
| 1.2 | Empilements désordonnés et “jamming” | 10 |
| 1.3 | Structures élastiques mécaniquement contraintes | 11 |
| 1.3.1 | Confinement et morphogénèse biologique | 11 |
| 1.3.2 | Confinement et variétés élastiques | 14 |
| 1.3.3 | Surfaces élastiques | 16 |
| 1.3.4 | Tiges élastiques | 19 |
| 1.4 | Plan de la thèse | 20 |
| 2 | Physique Statistique - Tiges élastiques | 23 |
| 2.1 | Physique statistique - Fondements | 24 |
| 2.1.1 | Équation de Liouville | 24 |
| 2.1.2 | Notion d’ensemble statistique | 26 |
| 2.1.3 | L’ensemble canonique | 27 |
| 2.2 | Structures inhérentes - Systèmes athermaux | 28 |
| 2.2.1 | Systèmes vitreux | 28 |
| 2.2.2 | Tige élastique confinée en 2D | 29 |
| 2.2.3 | Milieux granulaires | 30 |
| 2.3 | Tiges élastiques - Fondements | 31 |
| 2.3.1 | Géométrie différentielle des courbes | 32 |
| 2.3.2 | Mécanique - Équations de Kirchhoff | 34 |
| 2.4 | Tiges élastiques en 2D | 35 |
| 3 | Formation des Premiers Plis | 39 |
| 3.1 | Présentation générale | 40 |
| 3.1.1 | Définition de la géométrie | 40 |
| 3.1.2 | Équation d’équilibre | 41 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.2 | Dissection de la tige en plusieurs morceaux | 42 |
| 3.2.1 | Problème à frontières libres | 42 |
| 3.2.2 | Conditions aux bords | 43 |
| 3.2.3 | Méthode du tir | 47 |
| 3.3 | Une cascade de bifurcations | 48 |
| 3.4 | Propriétés mécaniques | 54 |
| 3.5 | Bilan | 55 |
| 4 | Émergence de la Complexité | 63 |
| 4.1 | Description de l'expérience associée | 64 |
| 4.2 | Une "expérience" numérique | 65 |
| 4.2.1 | Introduction | 65 |
| 4.2.2 | Énergie de la tige confinée | 65 |
| 4.2.3 | Discrétisation | 67 |
| 4.2.4 | Configurations initiales | 67 |
| 4.2.5 | La question des auto-intersections | 68 |
| 4.2.6 | Minimisation de l'énergie | 70 |
| 4.3 | Analyse statistique des configurations | 72 |
| 4.3.1 | Premières observations | 73 |
| 4.3.2 | L'élément "branche" | 74 |
| 4.4 | Comparaison avec l'expérience associée - Bilan | 77 |
| 5 | Une théorie statistique | 81 |
| 5.1 | Introduction | 82 |
| 5.2 | Ingrédients minimaux | 82 |
| 5.2.1 | Représentation en abscisse curviligne | 82 |
| 5.2.2 | Flexion | 82 |
| 5.2.3 | Auto-évitement | 83 |
| 5.2.4 | Confinement | 87 |
| 5.3 | Fonction de partition | 88 |
| 5.3.1 | Évaluation des différents termes - Champ moyen | 89 |
| 5.3.2 | Approximation point col | 93 |
| 5.4 | Article reproduit - Bilan | 93 |
| 6 | Conclusion | 103 |
| 7 | Appendices | 107 |
| 7.1 | Instabilité de flambage | 107 |
| 7.2 | Géométrie statistique | 109 |
| 7.3 | Transformée de Fourier généralisée | 112 |
| 7.4 | Configurations Yin-Yang | 113 |
| 7.5 | Communications scientifiques | 115 |

Confinement : tour d'horizon

1.1 Empilement de sphères dures

1.1.1 Une question qui traverse les siècles

La petite histoire veut que la question portant sur l'empilement optimal de sphères dures ait été formulée, de manière scientifique, à bord du “*Tyger*” pendant l'été 1585. Sir Walter Raleigh est à la tête d'une expédition qui vient de partir de Plymouth pour explorer le Nouveau Continent et y établir des colonies Britanniques. Soucieux de gagner du temps en cas d'une attaque des Conquistadors, Sir Raleigh pose une question pratique à son conseiller scientifique, le mathématicien Thomas Harriot. Peut-on estimer le nombre total de boulets de canons N présents dans une pile (voir figure 1.1), sans avoir à les compter un par un ? Les boulets étant arrangés selon une forme pyramidale dont les côtés de la base (dans ce cas carrée) comportent n projectiles, la réponse est immédiatement :

$$N = \sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}.$$

Cette formule permet un gain de temps considérable par rapport à un comptage manuel du nombre de boulets. Par exemple, il suffit de remarquer que la base de la pile de munitions présentée dans la figure 1.1 contient $n = 5$ boulets pour en déduire qu'il y a, en fait, $N = 55$ projectiles dans la pile entière.

Cette question de dénombrement de munitions est rapidement résolue par Harriot et le pousse vers un problème mathématique plus général. Quelle est la densité maximale d'un empilement de sphères dures (pas d'interpénétration), toutes identiques, dans l'espace habituel à trois dimensions ? Supposons que la boîte (de taille linéaire typique notée a), à l'intérieur de laquelle nos N sphères sont enfermées, soit très grande comparé au rayon des sphères noté r . Cette approximation permet de simplifier la discussion en négligeant les questions difficiles de frustration géométrique engendrées par la présence de bords. On peut alors définir la densité, ϕ , comme le taux d'occupation de l'empilement par rapport au volume disponible :

$$0 < \phi = \frac{\text{volume occupé par les sphères}}{\text{volume de la boîte}} = N \left(\frac{r}{a}\right)^3 < 1.$$

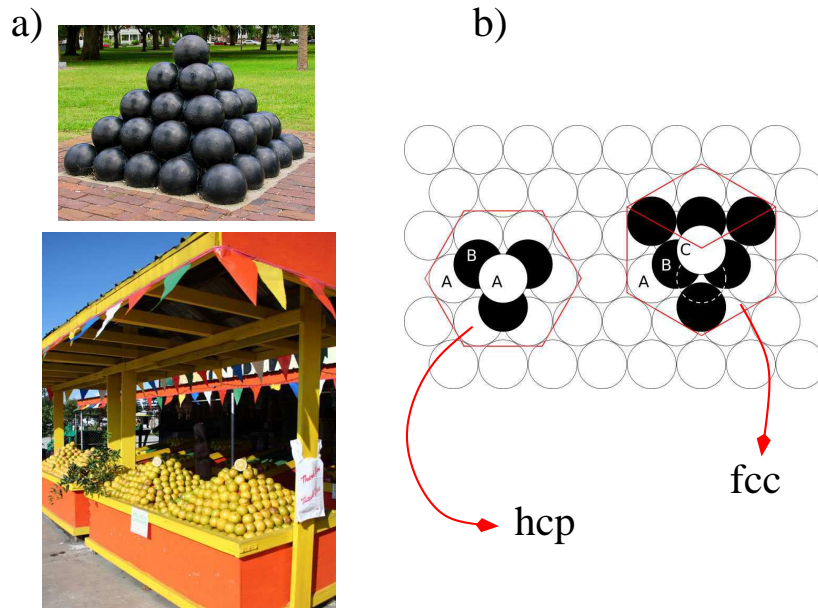


FIG. 1.1 – **a)** Empilement pyramidal de boulets de canon. La même stratégie d’empilement se retrouve aussi dans les étalages de fruits. **b)** Illustration de la différence entre l’arrangement hexagonal compact (hcp) et l’arrangement cubique à faces centrées (fcc). Les deux empilements aboutissent au même taux d’occupation $\phi \approx 74\%$ ce qui fait d’eux les empilements optimaux.

Le but de la question posée par Harriot est d’identifier l’arrangement qui permet de maximiser la densité ϕ . Après avoir cherché lui-même une solution à cette énigme (qui paraît pourtant si simple et naturelle), Harriot mentionne le problème à Johannes Kepler. Cette lettre, datée de 1606, marque le début d’une histoire qui ne s’achèvera qu’à la fin des années 1990. La construction de l’arrangement optimal de sphères dures cache en fait un problème très difficile de géométrie discrète. Dans les articles de vulgarisation, cette question est souvent présentée sous la forme de comment optimiser le stockage d’oranges (les sphères dures) de telle manière que l’on puisse en empiler une quantité maximale. Imaginons que nous disposons de 100 oranges qui doivent être rangées dans un panier. Le nombre d’assemblages possibles grandit de manière astronomique au fur et à mesure que le nombre d’oranges augmente. Considérons une possibilité assez intuitive. On peut commencer, par exemple, par former un réseau carré de 10×10 oranges au fond du panier puis rajouter une nouvelle épaisseur directement par dessus la première. Il s’agit, dans ce cas, du réseau cubique simple. En supposant que les oranges ne roulent pas les unes sur les autres et détruisent ainsi la pile, la densité atteinte est seulement $\phi = \pi/6 \approx 52\%$. Il y a donc autant d’air que d’oranges ! De plus, le fait que l’on s’attende à ce que cette pile soit instable est déjà, en soi, une indication que cette solution est métastable et qu’un meilleur arrangement doit exister. Kepler comprend qu’il est utile de se ramener à une situation plus simple pour commencer : l’empilement de disques dans le plan. Dans cette situation, l’assemblage le plus dense est connu depuis l’antiquité : c’est la structure hexagonale, parfois appelée “penny packing” par analogie avec le rangement de pièces de monnaie sur une table. Ce motif permet aux disques d’occuper $\phi = \pi/2\sqrt{3}$, soit à peu

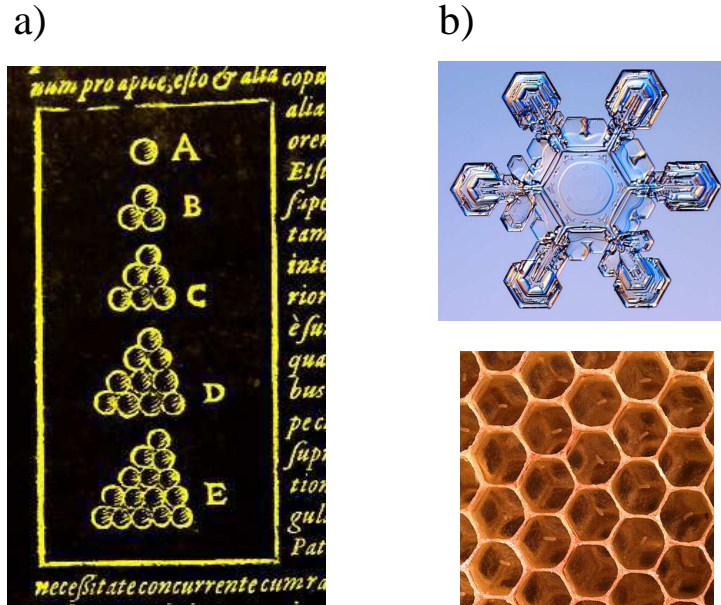


FIG. 1.2 – a) Illustration par Kepler [1] de l'arrangement hexagonal de disques durs empilés dans le plan. b) Photo d'un vrai flocon de neige (K. G. Libbrecht, Caltech) où l'on voit clairement la symétrie hexagonale. On retrouve ce pavage hexagonal aussi dans les alvéoles des nids d'abeilles.

près 91% de l'espace disponible. Kepler fait le rapprochement entre les cristaux de neige et les nids d'abeille qui présentent naturellement cette structure hexagonale [1] et fait hypothèse que cela est certainement dû à un principe de minimisation. Se pose maintenant la question de comment généraliser ce résultat au cas de l'empilement de sphères ? Tout d'abord, il faut remplacer la base carrée de la pyramide par une base hexagonale. La première épaisseur est donc optimale par construction. Il y a ensuite deux possibilités de déposer les boules sur une deuxième épaisseur, voir figure 1.1. Selon la stratégie choisie, il est possible d'obtenir l'assemblage hexagonal compact (noté hcp pour "Hexagonal Close Packing") ou le réseau cubique faces centrées (noté fcc pour "Face Centered Cubic"). Les deux arrangements conduisent à la même valeur $\phi = \pi/3\sqrt{2}$ soit environ 74% de l'espace disponible. Toutefois, on retrouve sans surprise presque le même empilement que celui déjà envisagé pour les boulets de canons à bord du "Tyger". C'est un raisonnement de ce type qui pousse Kepler à conjecturer en 1611 qu'il est impossible de faire mieux que le réseau cubique à faces centrées.

Nous comprenons la conjecture de Kepler par un raisonnement purement intuitif, en se laissant guider par le motif hexagonal bien connu. Est-il possible que le fait de commencer avec une première épaisseur plane (image mentale des oranges disposées sur une table) nous ait mené vers une branche de solutions (l'arrangement cristallin fcc ou hexagonal hcp) qui, bien qu'efficaces, ne sont pas optimales ? Des arrangements désordonnés permettraient-ils une meilleure occupation de l'espace ? Confirmant l'extrême difficulté de ce problème, il a fallu attendre 1998 pour montrer avec certitude que le réseau cristallin fcc est bel et bien l'arrangement optimal en trois dimensions [2]. La démonstration (elle même publiée quelques années plus tard) se base, en partie, sur une résolution numérique d'un problème d'optimisation non-linéaire de dimension gigantesque.

1.1.2 Espaces de dimensions élevées

Les problèmes d’empilement de sphères dures ne se limitent pas qu’aux cas d’espaces bidimensionnels ou tridimensionnels. En fait, bien que les empilements présentés dans la partie précédente soient attrayants, la conjecture de Kepler (par exemple) reste un problème plutôt académique. Par contre, l’empilement d’hypersphères en dimensions plus élevées [3] a des applications importantes dans le domaine du stockage et transport d’information (voir par exemple l’article fondateur de Shannon [4]). On peut comprendre de manière intuitive la relation entre l’empilement de sphères dures (problème qui est apparu jusqu’ici comme purement géométrique) et la théorie de l’information.

La plupart du temps, un message numérique est codé sous forme de bits discrets d’information 0 et 1. Imaginons que nous utilisons cette algèbre binaire pour écrire des “mots” composés de 6 “lettres”. En supposant que toutes les combinaisons forment un mot acceptable nous avons un ensemble de $2^6 = 64$ mots possibles. Chaque mot peut alors être représenté de manière unique comme un point dans \mathbb{R}^6 . Il est important que le stockage et la transmission d’un message se fasse de manière robuste. Considérons deux mots **ALICE** et **BOB** codés de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{ALICE} &= 001110, \\ \mathbf{BOB} &= 001100.\end{aligned}$$

La seule différence entre les deux mots apparaît sur le cinquième bit. Il y a un risque que le mécanisme de stockage ou de transmission modifie une partie du message et fournisse des informations erronées. Ceci peut être dû à une légère rayure sur un CD, à du bruit électronique lors de la transmission... Comment minimiser ce genre d’erreurs ? Il faut imposer une distance (définie par la mesure de Hamming par exemple) minimale dans \mathbb{R}^6 entre les points représentant les mots telle que, même dans un environnement bruité, le risque d’erreur soit réduit et même éliminé. Appelons la distance minimale que l’on cherche à imposer ℓ . L’idée consiste alors à empiler un ensemble de 64 sphères de rayon $\ell/2$ dans \mathbb{R}^6 . Le rayon des sphères doit être choisi de manière à minimiser les erreurs, mais il ne faut pas le prendre trop grand sinon la taille du message explose. Pour des espaces de dimensions modérées ($d = 4, 5, 6$ par exemple) il existe une autre application pratique de ces idées. Il est fréquent, par exemple, d’avoir à évaluer numériquement des intégrales en dimensions plus grandes que 3. Comment échantillonner l’espace de manière à avoir une bonne approximation d’une intégrale ? Là aussi le problème est similaire : il faut beaucoup de points pour avoir une bonne approximation mais pas trop sinon le temps de calcul devient trop grand. Il faut donc choisir une distance optimale entre les points d’échantillonnage et la question se ramène à l’empilement d’hypersphères.

La recherche d’un tel compromis est un sujet de recherche très actif. En dehors de quelques dimensions très particulières où des progrès ont pu être fait rapidement (tel que $d = 8$ ou $d = 24$ où il existe des symétries très fortes menant aux réseaux de Leech) il n’y a pas de généralisations faciles dès que la dimension de l’espace devient supérieure à 3. Les arrangements connus les plus denses pour $3 < d < 10$ sont tous des arrangements cristallins. Dans la limite $d \rightarrow +\infty$, un résultat récent [5] donne un encadrement fin de la densité maximale. De manière générale, les raisonnements suivis pour obtenir des bornes supérieures et inférieures sont non-constructifs : ils ne permettent pas d’effectivement fabriquer un empilement qui réaliserait cette densité. D’autre part, il est soupçonné qu’il

existe une dimension critique au delà de laquelle l'état fondamental (optimal) puisse être réalisé par un empilement désordonné plutôt qu'un empilement ordonné en réseau.

1.1.3 Polydispersité

Nous n'avons considéré, jusque-là, que des empilements de sphères monodisperses. Il est possible de créer des empilements dont la densité est plus grande que ceux présentés dans les parties précédentes en introduisant un spectre étendu de tailles. Concentrons nous, pour illustrer, au cas de l'espace à 2D dans lequel nous empilons des disques durs (non-interpénétrables). Nous avons déjà vu que le pavage hexagonal (cf figure 1.2) est celui pour lequel la densité maximale possible $\phi \approx 91\%$ est réalisée. En ajustant correctement la taille des disques, il est possible de construire un empilement qui remplit totalement l'espace disponible, c'est à dire pour lequel $\phi \rightarrow 100\%$.

Commençons avec 3 cercles C_1, C_2 et C_3 tangents deux à deux extérieurement. On note leurs rayons respectifs R_1, R_2 et R_3 . On peut alors montrer qu'il existe un quatrième cercle C_4 lui-même tangent aux trois premiers cercles. Son rayon R_4 satisfait au théorème de Descartes :

$$\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_4} \right)^2 = 2 \left(\frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{R_2^2} + \frac{1}{R_3^2} + \frac{1}{R_4^2} \right).$$

L'équation déterminant le rayon R_4 est un polynôme du deuxième degré donc il existe en fait deux possibilités pour le choix du quatrième cercle. Ce sont les "kissing circles" de Soddy [6]. De manière à remplir l'espace de manière plus effective, il faut choisir le plus petit de ces cercles. En répétant cette construction itérativement des plus grands cercles vers des cercles de plus en plus petits, on finit par obtenir le motif présenté sur la figure 1.3. Il s'agit d'un empilement fractal dit empilement Apollonien [7]. Cette procédure itérative génère un spectre continu de taille de disques qui suit une loi de puissance. La porosité, c'est à dire la fraction d'espace non-occupée, décroît vers 0 ce qui prouve que cette construction permet effectivement de paver complètement l'espace. Il est possible de généraliser cette construction pour réaliser des empilements Apolloniens en dimensions supérieures.

Outre leur élégance géométrique, ce type empilement fractal a des applications en physique. Il peut être utilisé comme "toy model" dans la modélisation de la tectonique des plaques [8, 9] et de la cascade d'énergie vers les petites échelles en turbulence [10, 11] par exemple. Cependant une application pratique importante vient du génie civil. L'obtention d'un spectre granulométrique continu et étendu vers les faibles granulométries permet d'améliorer la compacité, donc les performances mécaniques. Il s'agit d'un des éléments centraux à la base de nouveaux matériaux tels que le béton à haute performance. Ce type de béton possède non seulement une résistance en compression de plusieurs ordres de grandeur supérieurs au béton classique mais il est capable de réagir de manière élastique quand il est chargé en tension. Utilisé de manière pionnière pour la construction de l'arche de la Défense et du pont de l'île de Ré à la fin des années 1980, son utilisation commence maintenant à se banaliser. La distribution de tailles des grains utilisés, qui tente de se rapprocher de celle d'un empilement Apollonien, est un ingrédient important de ces matériaux.

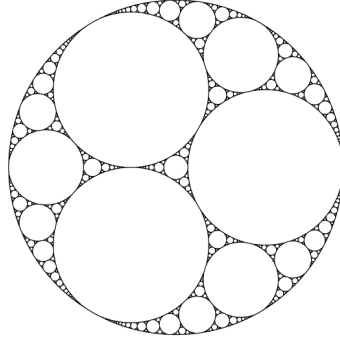


FIG. 1.3 – *Illustration d'un empilement Apollonien. Les règles de construction menant à ce motif fractal sont détaillées dans le texte. Cet empilement est optimal dans le sens où l'ajout de cercles de plus en plus petits permet de couvrir tout l'espace disponible et la densité tend vers 100%.*

1.2 Empilements désordonnés et “jamming”

À la fin des années 1950, l'expérience de J. D. Bernal [12] est une des premières à étudier les empilements aléatoires de sphères dures monodisperses. Quand un grand nombre de sphères est versé très doucement dans un récipient (grains de sable par exemple), la fraction volumique de la pile obtenue est approximativement 55%. C'est la limite au-dessus de laquelle les réseaux de forces inter-sphères percolent et une configuration rigide peut exister [13]. Cette pile est mécaniquement métastable, elle contient de nombreux vides, et possède une mémoire de son histoire (méthode de dépôt, friction entre les sphères...). En secouant le récipient, la densité augmente lentement et finit par se stabiliser à une certaine valeur (comprise entre 61% et 64%) qui dépend de l'intensité du forçage. La configuration des sphères formant la pile est maintenant “jammed” ou bloquée. On peut alors faire des cycles d'augmentation et de diminution de l'intensité des secousses et suivre l'évolution de la densité. Au fur et à mesure que l'intensité du forçage augmente, la densité diminue jusqu'à $\phi_{\text{RLP}} \approx 61\%$ (“Random Loose Packing”). C'est la limite à partir de laquelle les secousses sont tellement fortes que les sphères commencent à se désolidariser et les configurations ne sont plus “jammed” mais ressemblent plus à des suspensions. Si, au contraire, on diminue l'intensité du forçage extérieur, la densité augmente pour atteindre une valeur maximale $\phi_{\text{RCP}} \approx 64\%$ (“Random Close Packing”). Une propriété remarquable de ces empilements est que la courbe de compaction est complètement réversible (illustrée sur la figure 1.4) même en présence de friction entre les sphères [14].

L'existence de branches réversibles dans ces systèmes amorphes et dissipatifs est frappante et encourage l'utilisation des outils de la physique statistique pour tenter de les comprendre. La transition vers ces configurations de sphères dites “jammed” est en effet reliée à de nombreux problèmes tels que les émulsions, les suspensions colloïdales, les polymères fondus [15]... La phase “Random Close Packing” peut être vue comme un système vitreux à température nulle. Tous ces systèmes sont piégés dans une toute petite région de l'espace des phases et tombent dans la classe des phénomènes hors-équilibre (voir par exemple [16] pour un article de revue récent et [17] pour une approche complémentaire). Nous reviendrons sur ce sujet qui attire énormément d'attention en ce moment au cours

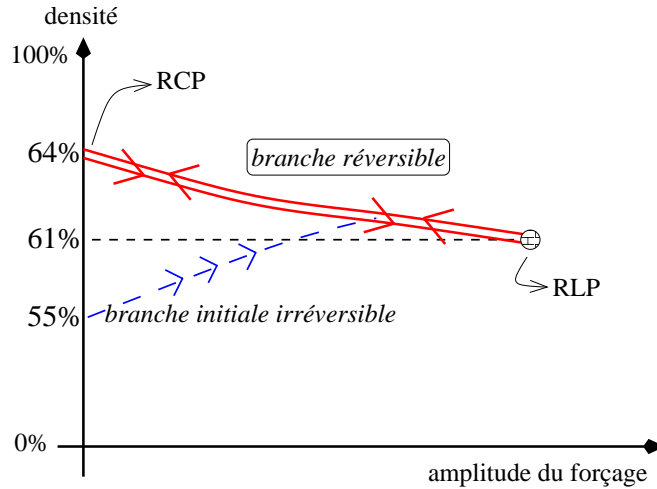


FIG. 1.4 – Illustration de la courbe de compaction donnant la densité d’un empilement granulaire en fonction de l’amplitude du forçage. La ligne en pointillé marque la branche irréversible d’initiation de la compaction. Elle finit par rejoindre la double ligne rouge qui représente la branche irréversible. Une fois sur cette branche, il suffit de faire varier l’amplitude des secousses pour aller continûment et réversiblement du “Random Loose Packing” (RLP) au “Random Close Packing” (RCP). Le point final signale l’amplitude critique à partir de laquelle les configurations ne sont plus “jammed”.

du chapitre 2.

Remarquons, entre parenthèses, que $\phi_{\text{RCP}} \approx 64\%$ est nettement inférieur à la densité du réseau cristallin $\phi_{\text{FCC}} \approx 74\%$. Le nombre moyen de contacts entre sphères est, avec friction, $Z \approx 6$. Ce nombre de coordination devient $Z \approx 10$ pour des ellipses. Ceci permet de construire, expérimentalement et numériquement, des empilements désordonnés d’ellipses dont les densités s’approchent de ϕ_{FCC} [18].

1.3 Structures élastiques mécaniquement contraintes

1.3.1 Confinement et morphogénèse biologique

La biologie du développement est l’étude des processus par lesquels les organismes vivants grandissent et évoluent au cours du temps. Les progrès dans la manipulation et l’analyse de l’ADN, support chimique de l’information génétique, au cours des 30 dernières années ont permis de grandes avancées en biologie moléculaire. Parmi ses nombreuses applications pratiques, la biologie moléculaire a contribué à la détection d’anomalies chromosomiques entraînant des maladies génétiques, à l’identification des individus par le typage de l’ADN (empreintes génétiques) et elle commence à faire ses preuves en immunologie avec l’introduction de vaccins d’ADN [19, 20]. D’un point de vue plus fondamental, il est maintenant possible d’identifier précisément les gènes impliqués dans des aspects aussi profonds du développement que l’embryogénèse, l’organogénèse, le développement des tissus biologiques... Cette situation peut laisser croire que les outils issus du génie génétique sont suffisants pour comprendre tous les aspects de la biologie du développement.

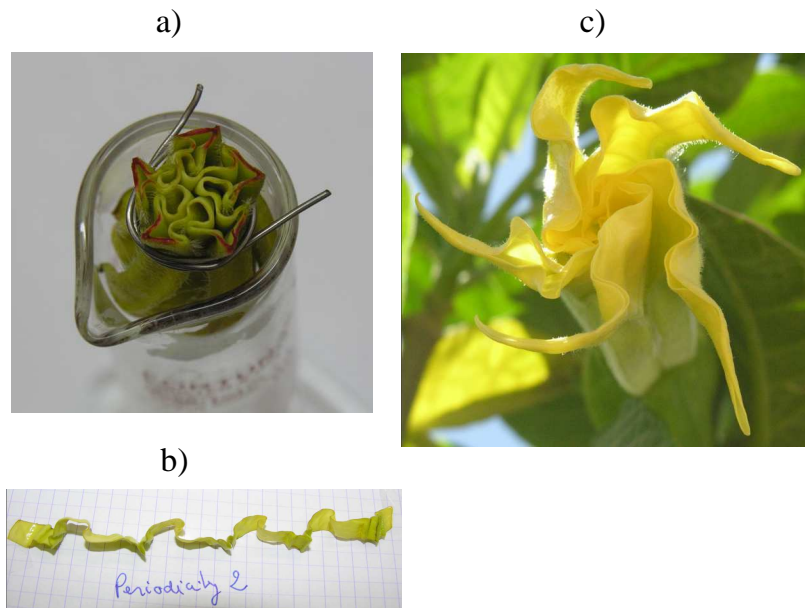


FIG. 1.5 – **a)** Coupe horizontale à travers le bourgeon de *Datura*. Le fil de fer enroulé autour de la feuille permet de maintenir, artificiellement, la pression exercée naturellement par le bourgeon. Les parties surlignées en rouge illustrent la forme repliée en pointes adoptée par la feuille au cours de sa croissance. **b)** Une tranche transversale de la feuille (au niveau du fil de fer) révèle une certaine périodicité de la forme entre les pointes. La bande est en fait rebouclée sur elle-même mais nous l'avons coupée ici pour pouvoir la mettre à plat. **c)** La fleur, pleinement épanouie, est capable de se déployer le soir avant de se refermer pendant la journée.

Pourtant, les organismes vivants grandissent sous l'effet de contraintes purement mécaniques ou géométriques et leur développement doit respecter les lois fondamentales de la physique et de la chimie. Dans quelles mesures ces contraintes sous-jacentes peuvent-elles limiter les formes biologiques observées dans la nature ? Bien que cette question (ancestrale) fût initiée dans les travaux pionniers de D'Arcy Thompson [21] au début du 20^{ème} siècle, l'étude précise de l'importance relative de la mécanique par rapport à la génétique est un domaine en pleine expansion de nos jours. Des expériences récentes [22] ont montré de manière définitive que l'application de contraintes mécaniques sur un embryon de drosophile (système modèle en biologie moléculaire) induit l'expression de gènes qui seraient restés inhibés sans intervention extérieure. Beaucoup de travaux, dans le but de quantifier l'influence des contraintes mécaniques dans la régulation génétique, ont aussi été lancés ces dernières années dans le cadre du développement des espèces végétales (voir par exemple l'article de revue [23]).

Penchons nous sur le cas d'une contrainte géométrique particulière (équivalente aux empilements de sphères dures présentés dans les parties précédentes) : le confinement dans un volume de taille finie. Il est évident que la plupart des organismes vivants grandissent dans des environnements confinés, qui les protègent du monde extérieur, pendant les premiers stades de leur développement (à commencer par les êtres humains par exemple...). La fleur de *Datura* (famille des *solanaçées*, voir figure 1.5), grandit à l'intérieur d'un tube,

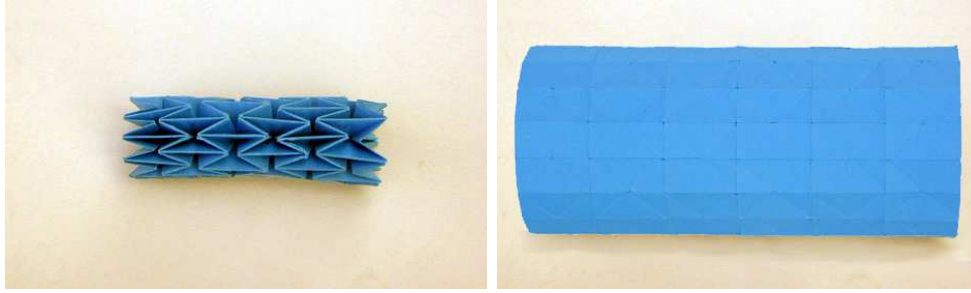


FIG. 1.6 – *Modèle papier d’un stent auto-déployable (Z. You, Oxford University). Le pliage est totalement compatible dans les phases pliées et dépliées ce qui assure une bonne étanchéité.*

de forme légèrement polygonale, qui joue le rôle de bourgeon. Une coupe transversale du tube permet de voir la forme circonvoquée adoptée par la fleur avant de pouvoir se déployer. Au premier coup d’œil (figure 1.5 **a**), ce motif plissé semble plutôt désordonné et seule une structure en pointes se fait remarquer. Cependant, une tranche transversale entre deux hauteurs le long du tube révèle une remarquable périodicité de la forme des plis entre les pointes (figure 1.5 **b**). Il est logique de supposer qu’une telle régularité est en fait simplement une réponse mécanique de la fleur qui se déforme pour s’accomoder à un container devenu trop petit pour elle. (Nous reviendrons sur le “logique” brièvement lors du chapitre 3.) La forme finale de la feuille résulte donc d’un processus d’auto-organisation et ne nécessite que d’une assistance minimale de la part de la génétique. Cette situation se retrouve dans de nombreux autres systèmes biologiques. Les ailes des insectes grandissent à l’intérieur de cocons. Dans ce cas, la position des plis sur les ailes doit être une conséquence de la croissance en géométrie confinée des ailes [24]. Les feuilles de certaines espèces d’arbres (comme le charme ou le châtaignier) présentent un réseau de plis de forme striée, avec des montagnes et des vallées [25]. Ce motif, de Herringbone, n’a rien de spécifique au monde végétal puisqu’il apparaît aussi dans des expériences de surfaces élastiques en compression bi-axiale [26]. On peut d’ailleurs montrer que cet arrangement de plis est un minimiseur de l’énergie d’une feuille élastique comprimée [27]. Dans le cas des feuilles d’arbre, c’est juste la présence restrictive du bourgeon qui fournit la compression engendrant un arrangement de plis auto-organisé.

Biomimétique Les exemples présentés ci-dessus renforce la notion que certaines formes observées dans la nature se comprennent simplement comme des surfaces élastiques grandissant dans un volume limité. En retour, les plis induits par le confinement possèdent des propriétés remarquables. En effet, ces structures (feuilles d’arbres ou ailes...) sont capables de se plier pour occuper un espace minimal mais aussi de s’auto-déplier facilement sans se déchirer. Ces propriétés font de ces objets une source d’inspiration pour concevoir des membranes déployables efficaces [28] comme les voiles solaires, les airbags, les tentes... Mentionnons finalement une dernière application dans le domaine médical. Les stents sont des structures tubulaires artificielles destinées à soutenir un tissu biologique souffrant d’une anomalie. En agissant comme un tuteur, un stent permet de maintenir ouverte une artère pour y ré-établir un flux sanguin normal. Les stents auto-déployables (figure 1.6)

sont pratiques car leur petite taille dans la phase pliée permet une implantation moins douloureuse. Leur flexibilité, une fois déployé, leur donne une meilleure robustesse et offre des possibilités de repositionnement en les refermant le temps du transport vers une autre zone. De manière similaire aux ailes d'insectes, les procédures de pliage-dépliage se font sans initier de déchirure ce qui donne à ce type de stents une meilleure étanchéité [29].

1.3.2 Confinement et variétés élastiques

Élasticité linéaire Contrairement aux empilements de sphères dures, la dimensionalité de l'objet et la dimension de l'espace dans lequel il est confiné ne sont pas nécessairement égales dans le cas des structures élastiques. Par exemple, nous venons de voir dans la partie précédente la situation d'une feuille (dimension = 2) confinée dans un bourgeon (dimension = 3). En pratique, les cas les plus intéressants sont les surfaces confinées dans l'espace à 3D (exemple canonique d'une simple boulette de papier froissé) et les tiges confinées dans des boîtes à 2 ou 3 dimensions spatiales. Cependant, nous avons aussi vu dans la section 1.1.2 que les questions d'empilement (donc de confinement) ne se limitent pas nécessairement aux espaces de bi ou tri-dimensionnel mais qu'elles restent intéressantes en dimensions supérieures. Considérons donc le cas général d'une variété élastique de dimension m confinée dans un espace de dimension arbitraire $d > m$. On note les coordonnées intrinsèques de la variété $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_m\}$ et $\mathbf{r} = \{r_1, \dots, r_d\}$ pour les coordonnées dans \mathbb{R}^d . Avant de préciser comment introduire la contrainte de confinement, il faut s'intéresser au problème de comment représenter géométriquement la variété dans l'espace ambiant, c'est à dire son plongement dans \mathbb{R}^d . La métrique intrinsèque de la variété est définie par :

$$ds^2 = \sum_{i=1}^m dx_i^2$$

tandis que la métrique induite par le plongement est donnée par :

$$\underline{ds}^2 = d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} = ds^2 + \sum_{i=1}^m dx_i \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_j} - \delta_{ij} \right) dx_j \quad (1.1)$$

La variété est maintenant paramétrisé par d fonctions réelles $r_{a=1, \dots, d}(x_{\alpha=1, \dots, m})$ dans l'espace ambiant. Cette configuration peut être complètement décrite grâce aux deux formes fondamentales de la géométrie différentielle : la métrique \underline{ds} et le tenseur de courbure β_{ij} :

$$\beta_{ij} = \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \mathbf{r} \right), \quad (1.2)$$

où le vecteur \mathbf{n} représente simplement la direction normale. Notons que nous avons déjà ré-écrit la métrique induite en fonction de la métrique intrinsèque dans l'équation (1.1) de manière à faire apparaître le tenseur de déformation [30] :

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_j} - \delta_{ij} \right). \quad (1.3)$$

Nous avons considéré, jusqu'ici, un plongement générique d'une variété de dimension m dans \mathbb{R}^d . Supposons maintenant que les représentations acceptables possèdent une taille

linéaire typique L dans m directions et une épaisseur $h \ll L$ dans les $d - m$ directions restantes. Ce sont les propriétés élastiques de la variété qui sélectionnent un plongement particulier. Nous nous basons sur l'élasticité linéaire ($|\gamma_{ij}| \ll 1$, $|\beta_{ij}| \ll 1/h$ et seulement deux coefficients de Lamé λ et μ déterminés par le module de Young et par le coefficient de Poisson de la variété) pour associer une énergie aux configurations. Comme la forme entière des configurations ne dépend (à une rotation solide près) que des deux formes fondamentales, on peut écrire l'énergie élastique comme une fonction régulière du tenseur de déformation et du tenseur de courbure. L'hypothèse de petite épaisseur permet de développer en puissances de h/L et, à l'ordre le plus bas les deux contributions se découpent. On peut donc exprimer l'énergie totale comme un combinaison des déterminants et traces (les deux invariants) de ces tenseurs [31] :

$$E = \int dx_1 \dots dx_m \left[\lambda_1 \left(\det \beta + \frac{\lambda}{2\mu} \text{Tr}^2 \beta \right) + \lambda_2 \left(\det \gamma + \frac{\lambda}{2\mu} \text{Tr}^2 \gamma \right) \right]. \quad (1.4)$$

Les paramètres λ_1 et λ_2 sont des combinaisons complexes des coefficients de Lamé λ et μ [32]. Notons que bien que la théorie soit mécaniquement linéaire (dépendance quadratique de l'énergie par rapport à γ , donc les contraintes sont bien proportionnelles aux déformations), elle reste géométriquement non-linéaire, cf équation (1.3). La configuration d'équilibre est sélectionnée en minimisant cette énergie par une procédure de type Euler-Lagrange. En élasticité linéaire, les équations d'équilibre sont typiquement des équations aux dérivées partielles elliptiques (nature variationnelle de la théorie [33]), non-linéaires et d'ordres élevés ce qui les rend particulièrement délicates. Nous verrons une application de cette technique lors du chapitre 2. Le paramètre λ_1 contrôle l'intensité des déformations de flexion (courbure) tandis que λ_2 correspond aux déformations d'étirement (traction). Une simple analyse dimensionnelle permet de trouver leur dépendance en fonction de l'épaisseur : $\lambda_1 \propto h^{d-m+2}$ et $\lambda_2 \propto h^{d-m}$. (Les exposants viennent des intégrations dans les $d - m$ dimensions de petite épaisseur) Cela montre que dans la limite $h \rightarrow 0^+$, les déformations de flexion sont largement plus favorables que les déformations d'étirement : $\lambda_1 \ll \lambda_2$. De manière générale le plongement sélectionné par la fonctionnelle (1.4) cherchera une configuration ne contenant que des déformations de flexion et le moins possible de traction. On peut alors, naïvement, prendre $\lambda_2 = 0$ pour éliminer les déformations de traction. Il ne reste, a priori, plus que des déformations de flexion. Les deux termes restants ont une interprétation physique simple : la trace du tenseur de courbure, $\text{Tr} \beta$, correspond à la courbure moyenne de la configuration et son déterminant, $\text{Det} \beta$, à la courbure de Gauss. Le "*Theorema Egregium*" de Gauss : $\text{Det} \beta = \partial_i \partial_j \gamma_{ij}$, montre que la courbure de Gauss agit comme une source de contrainte. (Si l'on considère les déformations γ comme un potentiel électrostatique, la courbure de Gauss serait l'analogue d'une charge électrique par exemple) On voit alors que le seul moyen d'éliminer totalement les contraintes d'étirement est de trouver des plongements tels que $\gamma_{ij} \equiv 0$. Dans ce cas les longueurs sont conservées et l'on parle de plongements isométriques.

Confinement vs. plongements isométriques Sous quelles conditions des plongements isométriques existent-ils ? Commençons par une situation modèle plus simple. Nous venons de voir qu'il est nécessaire d'annuler la courbure de Gauss pour se ramener à des déformations isométriques. En deux dimensions, le répertoire est assez limité puisque seuls les plans, les cylindres, les cônes (à part au niveau de l'apex) et certaines surfaces

particulières sont des surfaces développables, c'est à dire telles que $\gamma_{ij} \equiv 0$. Si l'on part d'une feuille initialement plate sur laquelle on applique des conditions aux bords (chargement ou conditions géométriques), il est donc certainement impossible de trouver une transformation isométrique compatible avec les conditions aux bords. On peut penser par exemple à l'impossibilité de recouvrir une feuille de papier sur un globe terrestre sans l'étirer en certains points. La surface sphérique du globe a une courbure de Gauss positive et va donc générer des termes non nuls dans le tenseur des déformations γ .

Revenons au cadre plus général du plongement d'une variété élastique de dimension m dans \mathbb{R}^d . Nous cherchons quelles sont les limitations sur les dimensions m et d telles qu'un plongement isométrique existe ou pas. Cette démarche ne fait plus appel aux conditions aux bords mais devient un problème de topologie. Le théorème de Nash [34] implique que l'on peut toujours trouver une dimension d suffisamment grande telle qu'un plongement isométrique existe. Il faut maintenant rajouter la contrainte de confinement pour déterminer quelle est cette dimension critique. Imaginons que la configuration obtenue par le plongement appartienne à une boule de rayon ℓ dans \mathbb{R}^d , c'est à dire qu'elle est confinée à l'intérieur d'un volume de taille finie. Witten et collaborateurs ont montré le résultat suivant [35, 36, 37] :

- Si $d \geq 2m$, il existe toujours un plongement isométrique quelle que soit l'intensité du confinement i.e. la taille finie du volume accessible donnée par ℓ . Les déformations d'étirement peuvent être rendues arbitrairement petites par rapport aux déformations de flexion.
- Au contraire si $d < 2m$, il existe un rayon ℓ en dessous duquel il ne peut plus y avoir de plongements isométriques. En d'autres termes, si la dimension de l'espace ambiant est strictement inférieure à deux fois la dimension de la variété, la contrainte de confinement fait que les configurations obtenues contiendront inévitablement des zones d'étirement. De plus, ces zones où $\gamma_{ij} \neq 0$ ne sont pas distribuées uniformément mais ont tendance à se focaliser dans des régions toutes petites des configurations. Alors que la majorité de la configuration est libre de se déformer en flexion pure, ces régions (singularités) concentrent toutes les contraintes.

Intuitivement, ce théorème montre que pour pouvoir confiner une variété élastique sans produire d'étirement, il faut que chaque direction (associée à une dimension de la variété) puisse se courber dans des directions indépendantes les unes des autres. Cette condition est compatible avec la borne inférieure $d \geq 2m$ sur la dimension de l'espace ambiant nécessaire. Bien que nous nous concentrons sur le cas de la théorie de l'élasticité, le raisonnement montrant l'émergence de singularités est très général puisqu'il repose principalement sur des principes de géométrie. Cette limitation sur l'existence de plongements isométriques en fonction des dimensions mises en jeu permet de mettre en évidence une différence importante entre les deux situations les plus pratiques : les surfaces ($d = 2$) et les tiges ($d = 1$).

1.3.3 Surfaces élastiques

Considérons une feuille de papier de largeur et longueur de taille typique L et d'épaisseur infinitésimale $h \ll L$. La minimisation de l'énergie élastique (cf équation (1.4)) permet de déduire les équations d'équilibre des plaques élastiques. Ces équations (dites de Föppl-von Kármán), consistent en un jeu de deux équations aux dérivées partielles couplées

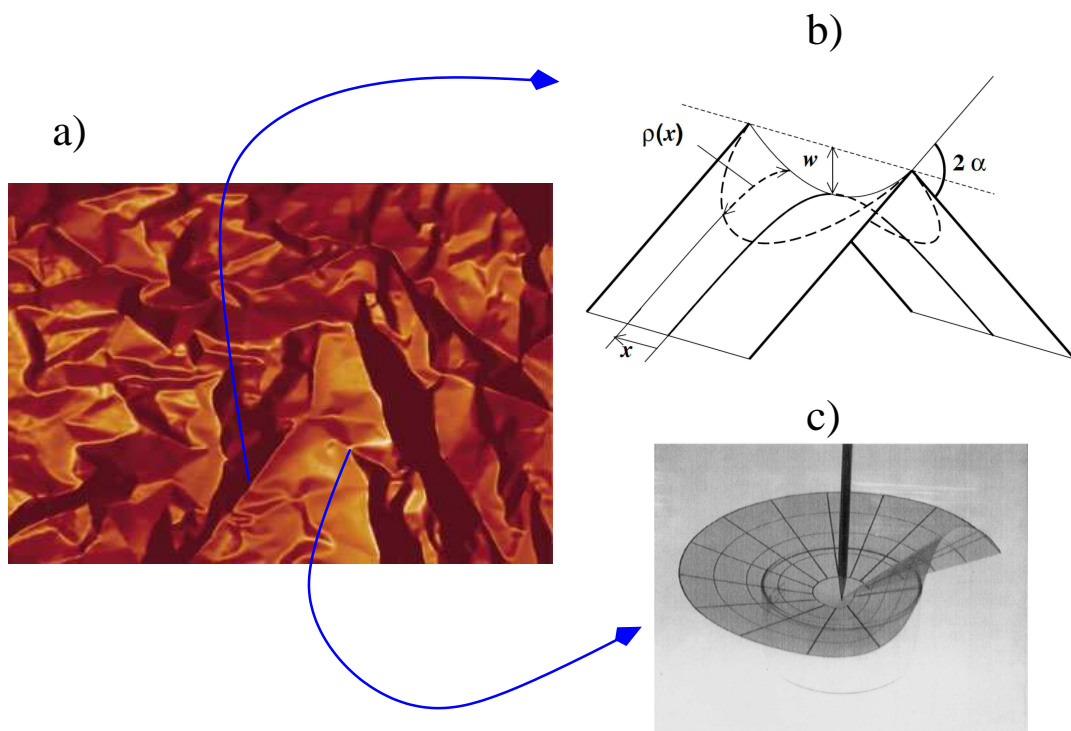


FIG. 1.7 – **a)** Vue de dessus de la surface d'une feuille, préalablement comprimée à la main, puis dépliée [48]. Les flèches permettent d'isoler les deux singularités génériques : **b)** Les plis courbes "ridges" (image théorique d'un pli [49]) et **c)** réalisation expérimentale d'un cône développable [50].

du 4^{ème} ordre et non-linéaires. Il est impossible de les résoudre exactement à part dans quelques cas modèles [38]. L'implémentation du confinement est évidente : il suffit de comprimer la feuille sous forme d'une boulette de papier froissé (figure 1.7 **a**). On peut utiliser les outils de la partie précédente en observant que, dans cette géométrie, l'espace ambiant à $d = 3$ et la feuille de papier à $d = 2$. Nous sommes donc dans la situation où la feuille, forcée dans un volume plus petit que sa taille au repos, va focaliser les déformations dans de toutes petites régions singulières. L'étude de ces singularités a fait l'objet de nombreux travaux depuis la fin des années 1990 et l'on peut consulter l'article de revue [39] pour une vision d'ensemble. Il est bien établi que la feuille développe un réseau de plis courbés [40, 41, 42] qui se connectent par l'intermédiaire de vertex appelés les cônes développables [43, 44, 45, 46, 47] (voir figure 1.7). Quasiment toute l'énergie injectée lors du froissage se condense dans ces deux éléments singuliers. Les énergies respectives des plis et des cônes développables sont données par :

$$E_{\text{pli}} \sim h^{5/3} L^{1/3},$$

$$E_{\text{d-cône}} \sim h^2 \log \frac{L}{\ell},$$

où ℓ est le rayon typique du cœur du cône développable en forme de croissant où les effets plastiques sont importants (figure 1.7 **c**). Ces lois d'échelle prédisent que dans la limite $h \rightarrow 0$, la contribution majeure à l'énergie de la feuille vient des plis. Cependant cet argument est trompeur car, d'une part, les préfacteurs peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur suivant les conditions aux bords appliquées et donner aux d-cones une plus grande importance, comparable à celle des plis [51]. D'autre part, la présence de cônes développables est précurseur de l'apparition des plis qui ensuite s'établissent sous forme d'un réseau articulé par les vertex.

Analyse statistique Bien que ces singularités soient maintenant bien identifiées, la question de leurs interactions et de leur dynamique reste encore beaucoup moins bien comprise. Les travaux récents sur ce sujet se concentrent d'avantage sur les aspects statistiques du froissage plutôt que sur des études purement géométrique et mécanique. Du point de vue numérique, la difficulté vient de la séparation entre les échelles de longueur allant de la taille de la feuille entière à celles des singularités. Dans le cas du papier froissé [52], des parties de la feuille initialement éloignées se retrouvent en contact, et il faut aussi tenir compte de l'auto-évitement. Cette contrainte est toujours compliquée à mettre en place (interaction non-locale) et génère des zones d'auto-contact où les frottements peuvent être importants. La majorité des travaux sont expérimentaux et restent, eux aussi, limités à des interactions entre un petit nombre de singularités [53, 54]. En effet, le seul moyen de faire apparaître plus de plis ou de cônes est en comprimant davantage la feuille. On peut alors facilement mesurer la force de compression pour atteindre une certaine taille de boulette [55]. Mais, il devient impossible de voir, de manière dynamique, les ré-organisations qui ont lieu à l'intérieur même de la boulette de papier froissé.

Il convient de noter, toutefois, deux nouvelles expériences où de telles mesures commencent à être envisageables. En utilisant des techniques de visualisation médicale, le groupe de N. Menon (UMass, Amherst) est capable de reconstruire de

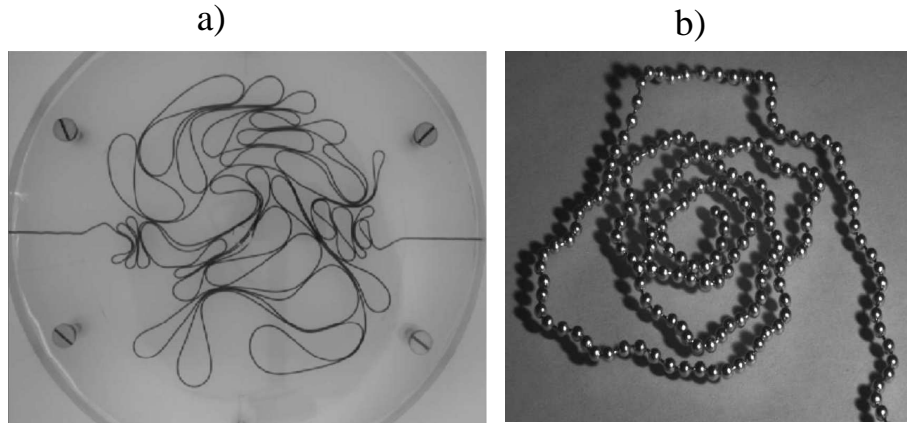


FIG. 1.8 – **a)** Tige de métal injectée dans une cellule quasi bi-dimensionnelle [60]. On vérifie que malgré le taux de confinement assez élevé, la tige ne présente aucune singularité (de type “kink” ou coin). **b)** Transition vers une forme en spirale pour des chaînes granulaires soumises à une vibration verticale [65].

manière non-destructive la forme entière d’une boule de papier froissé [56]. Aussi dans de le groupe d’E. Sharon (Racah Institute, Jérusalem), la création successive des plis d’un hydrogel grandissant à l’intérieur d’une sphère peut être suivie en temps réel [57]. Ces expériences permettront, à terme, une étude simultanée des forces mécaniques et de la formation du réseau de plis à l’intérieur de la boulette.

En général, il faut déplier la feuille et analyser, après coup, les configurations de manière statique. En plus de toutes les propriétés statistiques du réseau de plis (nombre de voisins, connectivité), une quantité importante a pu être mesurée dans des expériences de ce type [48, 58, 59] : la distribution de longueur des plis. La probabilité de densité d’observer un pli d’une certaine longueur suit une distribution lognormale (au moins pour les petits confinements). Ce résultat est compatible avec un scénario de cassure aléatoire, mais hiérarchique des plis. Nous reviendrons sur une analyse statistique en termes de distribution de probabilités au cours du chapitre 4 (dans un contexte différent) où nous expliquerons plus en détail les origines physiques donnant lieu à de telles distributions. Ce résultat est encourageant car il montre que certains des phénomènes qui apparaissent lors du confinement ont une interprétation probabiliste bien définie. Dans la même veine, l’exposant de rugosité d’une feuille dépliée (figure 1.7) est approximativement 0.7 [48]. Un exposant supérieur à 0.5 indique la présence de corrélations entre les plis. Ce résultat se prête, à nouveau, à une analyse statistique des fonctions de corrélations de l’orientation des plis.

1.3.4 Tiges élastiques

Considérons maintenant une tige élastique de longueur L et d’épaisseur h négligeable devant L . En utilisant la classification détaillée à la fin de la partie 1.3.2, nous voyons immédiatement que comme $m = 1$, une tige élastique peut toujours être déformée isomé-

triquement à partir de $d = 2$. C'est un cas trivial : il est géométriquement impossible pour la tige de développer des singularités de type "coin" (kink) quelle que soit la dimension de la boîte dans laquelle elle est confinée (disque, sphère, ...).

Paradoxalement, il n'existe que très peu de résultats portant les tiges confinées dans la littérature. Puisque nous reviendrons, en longueur, sur les tiges élastiques au cours des chapitres suivants, nous nous contentons ici de mentionner deux types d'expériences :

- **Statique.** Une tige de cuivre est injectée à l'intérieur d'une cellule quasiment bi-dimensionnelle (voir figure 1.8 **a**). La hauteur de la cellule est ajustée à l'épaisseur de la tige pour interdire les déplacements hors du plan, et donc les auto-intersections [60, 61, 62, 63]. Ces expériences permettent de mesurer un grand nombre de lois d'échelles (comme le nombre de boucles, aire des boucles) et la dimension fractale de la répartition de la masse à l'intérieur de la cellule. Par exemple, la probabilité d'observer une boucle d'aire \mathcal{A} suit approximativement la loi d'échelle : $\rho(\mathcal{A}) \propto \mathcal{A}^{-1.45}$ (figure 1.8 **a**). La distribution des aires est donc très large. Récemment, ces expériences ont été reproduites et confirmées par des simulations numériques intensives [64].
- **Vibration.** Cette fois, les expériences ne se font plus avec des tiges continues mais plutôt des chaînes granulaires : de petites boules sont reliées entre elles par des tiges métalliques. Les chaînes sont posées sur une plaque horizontale qui est mise en vibration. Pour des amplitudes de vibration assez faibles, la chaîne développe rarement des auto-intersections et peut se ramener à un problème en deux dimensions. Dans ce cas, une transition vers une forme spiralée a été observée dans [65] (figure 1.8 **b**). Quand la chaîne est suffisamment longue pour entrer en interaction avec les murs (effet de confinement), Kudrolli et al reportent une augmentation significative des temps de relaxation (non-publié [66]). Ceci ne va pas sans rappeler les systèmes vitreux introduits brièvement dans la section 1.2. Nous reviendrons sur cet aspect dans le chapitre 2.

1.4 Plan de la thèse

Les différents systèmes présentés dans ce tour d'horizon partagent tous une contrainte globale commune. Que ce soit pour les empilements de sphères dures ou les structures élastiques plissées/froissées, ils ne peuvent occuper qu'une extension spatiale finie : ils sont confinés. Ce sont aussi des systèmes auto-évitant puisqu'il ne peut pas y avoir d'inter-pénétration. Cependant, il est facile de morceler tous ces thèmes en plusieurs disciplines différentes en raison de la multitude de détails spécifiques à chaque situation. Nous préférons, au contraire, identifier quelques mots clés (associés à des ingrédients physiques fondamentaux) qui regroupent tous ces systèmes :

1. **Ordre et Désordre.** Les empilements de sphères dures peuvent être ordonnés en réseaux cristallins (cf section 1.1.1) mais peuvent aussi exister sous formes désordonnées dans des arrangements amorphes (cf section 1.2). De la même manière, nous avons vu que les plis d'une feuille de papier froissé (figure 1.7) ou d'une tige confinée en 2D (figure 1.8 **a**) sont désordonnés. Mais, nous avons aussi vu ces mêmes systèmes dans des phases ordonnées comme le pliage des stents (figure 1.6) et les formes auto-organisées en spirales d'une tige (figure 1.8 **b**).

2. **Multi-échelles.** Dans l'expérience d'injection d'une tige en 2D, la taille des boucles est bien décrite par une loi d'échelle d'exposant non-entier (section 1.3.4). La taille des plis dans une feuille de papier froissé suit, elle aussi, une distribution assez étalée. De plus, la topographie de sa surface est caractérisée par un exposant d'auto-affinité (fin de la section 1.3.3). Dans le cadre des sphères dures, les empilements Appoloniens (figure 1.3) conduisent aussi à une structure fractale. Ces deux exemples sont l'illustration d'une complexité émergente puisque les objets de départ, surfaces/tiges élastiques et sphères/disques ne présentent, en eux-mêmes, aucune caractéristique particulière (comparer les figures 1.3 et 1.8 **a** par exemple).
3. **Hors-équilibre.** Regardons l'expérience d'injection de tige (section 1.3.4). Le frottement solide entre les zones d'auto-contacts est un phénomène dissipatif. À part un ajout de longueur de tige, il n'y a pas d'injection d'énergie dans ce système. Il évolue donc de manière irréversible vers une forme finale qui finit par se bloquer (figure 1.8 **a**). Nous rencontrons la même situation dans le cas des empilements de sphères (ou de grains) présenté dans la section 1.2. La pile se stabilise à une certaine valeur du taux d'occupation ϕ , mais reste ensuite bloquée dans cette configuration en l'absence de forçage extérieur. Nous avons déjà mentionné dans cette section que cette transition de "jamming" a des ressemblances avec la transition vitreuse. Les vibrations verticales dans l'expérience de chaînette confinée fournissent un forçage extérieur minimal. Kudrolli et al observent alors une explosion des temps de relaxation (section 1.3.4). Comme dans les empilements amorphes, cette observation suggère un effet "vitreux" dans le comportement de la chaînette sous confinement. On peut donc penser que ces deux systèmes (empilement de sphères, pliage/froissage élastique) appartiennent à une classe plus grande de systèmes hors-équilibre mais aussi athermaux.

Ces observations nous permettent maintenant d'organiser un plan. Puisque le confinement de tiges élastiques ne contient pas de singularités (tout au moins géométriques comme des coins, "kink"), ce sujet est longtemps resté dans l'ombre de l'étude des surfaces (papier froissé, 2D) qui regorgent de singularités. D'autre part, nous venons de voir, ci-dessus, que plusieurs ingrédients physiques fondamentaux (auto-évitement, transition ordre-désordre, multi-échelles et hors-équilibre) communs à un grand nombre de systèmes différents se retrouvent dans la question du confinement d'une tige élastique. Nous nous proposons donc d'étudier le comportement d'un système modèle idéal : une tige élastique confinée dans un espace à 2 dimensions. Ce système se place naturellement dans le cadre de la physique statistique hors-équilibre. De plus, la simplicité de la géométrie permet d'étudier simultanément les aspects géométriques d'apparition des plis ainsi que les forces mécaniques.

Nous commencerons, dans la première moitié du chapitre 2, par une revue des fondements de la physique statistique. Cette partie sera suivie par une discussion de développements récents dans les systèmes athermaux. La deuxième moitié du chapitre 2, consacrée à la théorie des tiges élastiques, nous servira à étudier les premières étapes du confinement lors du chapitre 3. Les résultats de ce chapitre permettront d'ailleurs de revenir brièvement au cas de la morphogénèse végétale (section 1.3.1). Le chapitre 4 sera consacré à une expérience numérique révélant l'émergence d'un paysage énergétique

complexe mais structuré pour des taux de confinements plus grands. Ce résultat justifie le développement d'une théorie de physique statistique dans le chapitre 5. Au regard des résultats des chapitres précédents, nous proposerons la configuration optimale d'une tige élastique confinée avant de conclure dans le chapitre 6.

La création, comme la vie, est par définition un processus hors-équilibre qui nécessite un certain degré de confinement. Pierre Joliot-Curie

Physique Statistique - Tiges élastiques

Motivations et enjeux Le tour d'horizon présenté dans le chapitre précédent indique que l'étude du confinement d'une tige élastique va nécessiter l'utilisation d'outils issus de la physique statistique. Dans ce cas, il est intéressant d'enchaîner par une revue des fondements de la physique statistique, c'est à dire l'équation de Liouville et la notion d'ensembles statistiques. Cette discussion, poursuivie par une présentation de quelques développements récents dans la physique des systèmes athermiques, permet d'isoler les hypothèses de base qui nous seront utiles dans le cadre du problème du confinement d'une tige élastique. La deuxième partie de ce chapitre est consacrée à une étude générale des propriétés géométriques et mécaniques des tiges élastiques. Nous déduisons les équations d'équilibre d'une tige élastique, dites équations de Kirchhoff, et nous les spécialisons au cas d'une tige plane où elles se ramènent à l'équation de l'*elastica* d'Euler. Le but de ce chapitre est de mettre à notre disposition la plupart des concepts importants pour pouvoir aborder la question des propriétés géométriques, mécaniques et statistiques des tiges élastiques confinées dans un espace à 2D.

2.1 Physique statistique - Fondements

2.1.1 Équation de Liouville

Considérons N particules paramétrées par leurs positions $\mathbf{q} = \{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N\}$ et leurs impulsions $\mathbf{p} = \{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\}$ dans un volume fini V . À chaque instant, une configuration (c'est à dire la spécification complète des positions et des impulsions de toutes les particules) peut être représentée par un point $\mathbf{x} = \{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\}$ dans l'espace des phases. Puisqu'il est déterminé par toutes les variables microscopiques, nous pouvons aussi appeler une telle configuration un micro-état. Supposons que les particules évoluent selon un système dynamique générique (pas forcément Hamiltonien) :

$$\frac{d\mathbf{x}^i}{dt} = \xi^i(\mathbf{x}, t) \quad \text{avec } i = 1, \dots, N. \quad (2.1)$$

Si les fonctions de flot ξ^i sont déterministes, il est possible (au moins en principe), de déterminer exactement les positions \mathbf{x}_t^i après un temps t , étant données les N conditions initiales à $t = 0$:

$$\mathbf{x}_t^i = \mathbf{x}_t^i(t; \mathbf{x}_0^1, \dots, \mathbf{x}_0^N).$$

Notons $\delta V(\mathbf{x}_\tau)$ un volume infinitésimal d'espace des phases autour du point \mathbf{x}_τ . La dynamique étant déterministe, pour tout volume élémentaire initial $\delta V(\mathbf{x}_0)$ il existe un unique volume $\delta V(\mathbf{x}_t)$ contenant tous les faisceaux de trajectoires de particules issus du volume initial. Le changement de volume élémentaire se calcule facilement en introduisant le Jacobien $J(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0)$ de la transformation pour aller de $\tau = 0$ à $\tau = t$:

$$\underbrace{\prod_{i=1}^N d\mathbf{x}_t^i}_{\delta V(\mathbf{x}_t)} = \underbrace{\frac{\partial (\mathbf{x}_t^1, \dots, \mathbf{x}_t^N)}{\partial (\mathbf{x}_0^1, \dots, \mathbf{x}_0^N)}}_{J(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0)} \underbrace{\prod_{i=1}^N d\mathbf{x}_0^i}_{\delta V(\mathbf{x}_0)}.$$

Il est donc nécessaire d'étudier l'évolution temporelle du Jacobien pour comprendre comment se transforme un élément de volume infinitésimal de l'espace des phases. En écrivant $J(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0)$ comme le déterminant d'une matrice, on peut montrer (voir [67] par exemple) que le Jacobien satisfait l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dJ}{dt} = J\Lambda(\mathbf{x}_t) \quad \text{où } \Lambda(\mathbf{x}_t) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}. \quad (2.2)$$

La fonction $\Lambda(\mathbf{x}_t)$ est le facteur de compressibilité de l'espace des phases. On peut intégrer l'équation (2.2) pour trouver le rapport entre deux volumes élémentaires :

$$\frac{\delta V(\mathbf{x}_t)}{\delta V(\mathbf{x}_0)} = \exp\left(\int_0^t \Lambda(\mathbf{x}_\tau) d\tau\right). \quad (2.3)$$

Nous n'avons fait appel, jusqu'ici, qu'à la nature déterministe des équations (2.1). Il faut maintenant introduire des concepts probabilistes pour arriver à l'équation de Liouville. Notons $f(\mathbf{x}_\tau, \tau)$ la densité de probabilité d'observer la configuration \mathbf{x}_τ au temps τ . La mesure de probabilité sur l'espace des phases est alors définie par :

$$dP(\delta V(\mathbf{x}_\tau), \tau) = f(\mathbf{x}_\tau, \tau) \delta V(\mathbf{x}_\tau). \quad (2.4)$$

D'autre part, nous avons vu qu'il existe, dans l'espace des phases, un faisceau connectant deux volumes élémentaires $\delta V(\mathbf{x}_0)$ et $\delta V(\mathbf{x}_t)$ qui contient un nombre constant de trajectoires. Cela signifie que la mesure de probabilité associée aux deux volumes est identique :

$$dP(\delta V(\mathbf{x}_t), t) = dP(\delta V(\mathbf{x}_0), 0).$$

Cette loi de conservation de la mesure de probabilité permet, en dérivant l'équation (2.4) par rapport au temps, de déduire l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_t, t)}{\partial t} + \frac{d\mathbf{q}}{dt} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{x}_t, t)}{\partial \mathbf{q}} + \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{x}_t, t)}{\partial \mathbf{p}} = -f(\mathbf{x}_t, t)\Lambda(\mathbf{x}_t). \quad (2.5)$$

Dans le cas général, il n'existe pas de solution explicite à l'équation de Liouville. En la ré-écrivant sous forme Lagrangienne, on peut tout de même obtenir une solution formelle :

$$f(\mathbf{x}_t, t) = f(\mathbf{x}_0, 0) \exp\left(-\int_0^t \Lambda(x_\tau) d\tau\right). \quad (2.6)$$

On peut aussi retrouver ce résultat simplement en combinant les équations (2.3) et (2.4). Cette formulation ne permet pas de déterminer explicitement la densité de probabilité et peut paraître un peu académique. En fait, sa généralité la rend très utile. En effet, il est possible d'utiliser cette solution formelle de l'équation de Liouville pour démontrer de nombreux théorèmes de fluctuation hors-équilibre comme le théorème de Gallavotti-Cohen ou d'Evans-Searles (voir l'article de revue [68] pour plus de détails). La fonction Λ est alors parfois interprétée comme un taux de production d'entropie.

Dans notre cas, l'équation (2.6) va nous permettre de voir pourquoi le problème d'une tige élastique confinée se place naturellement dans le cadre de la physique statistique hors-équilibre. Nous reviendrons sur ce point dans la section 2.2.2. Avant d'en arriver là, revenons tout d'abord sur le cas, classique, où les équations du flot dans l'équation (2.1) ont une structure Hamiltonienne. Dans ce cas, toutes les forces dérivent d'un potentiel et nous savons déjà que l'énergie totale du système est conservée. Considérons, par souci de simplicité, un problème unidimensionnel. Les équations du mouvement sont données par :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \quad \text{et} \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \quad (2.7)$$

On peut alors vérifier que le facteur de compressibilité est identiquement nul $\Lambda(x_t) \equiv 0$. En remplaçant ce résultat dans l'équation (2.6), on voit immédiatement que la densité de probabilité est invariante au cours du temps :

$$\forall t \in \mathbb{R} \quad f(\mathbf{x}_t, t) = f(\mathbf{x}_0, 0). \quad (2.8)$$

Dans le cas d'une évolution Hamiltonienne, $\Lambda(x_t) \equiv 0$ montre que l'équation (2.5) se réduit à une équation de continuité en mécanique des fluides. La densité de probabilité est alors l'analogie de la densité d'un fluide incompressible [69].

2.1.2 Notion d'ensemble statistique

Ensemble microcanonique Tout en conservant la nature Hamiltonienne du flot de la section précédente, considérons maintenant la surface définie par tous les points $\mathbf{x} = \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$ de l'espace des phases tels que $\mathcal{H}(\mathbf{x}) = E$. Le nombre de micro-états présents sur cette surface d'iso-énergie est :

$$\Omega(E) = \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} \delta(E - \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})), \quad (2.9)$$

à partir duquel est définie l'entropie $S = k \log \Omega$, où k est constante de Boltzmann. Dans l'ensemble microcanonique, tous les micro-états d'un système isolé d'énergie E sont équiprobables. La densité de probabilité de l'ensemble micro-canonique est donc :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\delta(E - \mathcal{H}(\mathbf{x}))}{\Omega(E)}. \quad (2.10)$$

Une fois un Hamiltonien \mathcal{H} choisi, nous pouvons calculer la moyenne de n'importe quelle observable O sur cet ensemble :

$$\langle O \rangle_\mu = \frac{1}{\Omega(E)} \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} \delta(E - \mathcal{H}(\mathbf{x})) O(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad (2.11)$$

Bien que l'ensemble microcanonique soit le plus fondamental en physique statistique, il ne se prête pas si bien à des calculs explicites. Dans ce cas, il est plus pratique de travailler dans l'ensemble canonique (section 2.1.3).

Ergodicité Puisque $f(\mathbf{x})$ ne dépend pas du temps (théorème de Liouville), tous les micro-états doivent rester équiprobables au cours de l'évolution. Ceci pose un problème car même si tous les micro-états sont équiprobables à $t = 0$, il n'est pas sûr qu'ils le restent ensuite. Il est envisageable que le flot Hamiltonien interdise, dynamiquement, l'accès à certaines parties de l'espace des phases. Le seul moyen de remédier à ce problème est de faire appel à l'hypothèse ergodique : une trajectoire générique finit par passer arbitrairement près de tous les points sur une surface d'énergie constante. En d'autres mots, la trajectoire est dense dans la surface d'iso-énergie de l'espace des phases. De manière imagée, cela signifie qu'il y a une sorte de "mélange" très efficace qui fait qu'aucune partie de l'espace des phases ne peut se trouver inaccessible. Dans ce cas les moyennes sur l'ensemble microcanonique sont représentatives de l'évolution temporelle. Au lieu de suivre l'évolution d'un système dynamique pendant des temps très longs, il suffit de faire une moyenne de l'observable sur toutes les configurations appartenant à la surface d'iso-énergie E à $t = 0$:

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau O(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t) dt = \langle O \rangle_\mu. \quad (2.12)$$

Après un certain temps de relaxation, tous les régimes intermédiaires disparaissent et les valeurs moyennes des observables ne dépendent plus du temps ni des conditions initiales. Nous avons atteint l'équilibre thermodynamique. Notons que bien que l'hypothèse ergodique soit très largement acceptée, il est quasiment impossible de prouver qu'un système est effectivement ergodique [70].

2.1.3 L'ensemble canonique

Considérons maintenant que le système que nous souhaitons étudier n'est plus isolé mais est en contact avec un thermostat à la température T , avec lequel il peut échanger de l'énergie thermique. Supposons que la taille du thermostat soit beaucoup plus grande que la taille du système. À l'équilibre, les observables physiques ne peuvent pas dépendre des propriétés précises du thermostat. En intégrant sur les degrés de liberté du thermostat (moyennage), on peut montrer que la probabilité de trouver une configuration $\mathbf{x} = \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$, dans cet ensemble dit canonique, est donnée par la distribution de Boltzmann :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{x}))}{Z} \quad (2.13)$$

où $\beta = 1/kT$ avec k la constante de Boltzmann. Chaque micro-état \mathbf{x} a un poids probabiliste donné par une simple exponentielle de son énergie $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ normalisée par l'énergie d'agitation thermique kT imposée par le thermostat. La fonction de partition Z permet de normaliser cette densité de probabilité $f(\mathbf{x})$:

$$Z = \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} \exp(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})). \quad (2.14)$$

C'est une fonction de la température $\beta = 1/kT$ mais aussi de tous les paramètres physiques extérieurs qui déterminent l'énergie $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Ces paramètres n'apparaissent pas explicitement dans l'équation (2.14) mais sont contenus à l'intérieur du Hamiltonien lui-même. On peut penser à la présence d'un champ magnétique dans le modèle d'Ising comme influence extérieure intervenant dans le Hamiltonien. Bien que la fonction de partition apparaisse simplement comme un facteur de normalisation (analogue à la fonction Ω dans l'équation (2.9)), il se trouve que Z est une quantité centrale en physique statistique à l'équilibre. En effet, il est possible de retrouver toutes les variables thermodynamiques caractérisant le système en prenant des dérivées de la fonction de partition. Nous donnons, par exemple, l'entropie S et l'énergie libre F :

$$S = -k\beta \left(\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) + k \log Z, \quad (2.15)$$

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z \quad \text{soit} \quad Z = e^{-\beta F}. \quad (2.16)$$

Une fois un Hamiltonien choisi, il suffit donc en principe de calculer la fonction de partition associée en utilisant l'équation (2.14) pour pouvoir extraire toutes les propriétés du système. Nous serons amenés à utiliser la formule (2.16) au cours du chapitre 5. Finissons cette revue des ingrédients de base de la physique statistique par une remarque concernant le passage de l'ensemble microcanonique à l'ensemble canonique. L'énergie n'est plus fixée à une valeur bien définie $E = kT$ mais est étalée dans la distribution de Boltzmann. Dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, et $N/V \rightarrow \text{constante}$) les fluctuations autour de l'équilibre sont typiquement de l'ordre de $1/\sqrt{N}$. Même dans l'ensemble canonique, l'énergie totale du système est donc très proche de E . Dans ce cas on peut approximer la fonction de partition par $Z \approx \Omega(E) \exp(-\beta E)$ où Ω est le nombre de micro-états dans l'intervalle $E \pm \delta E$ (comme dans la section 2.1.2). En réintroduisant cette expression dans l'équation (2.15), on retrouve la définition usuelle de

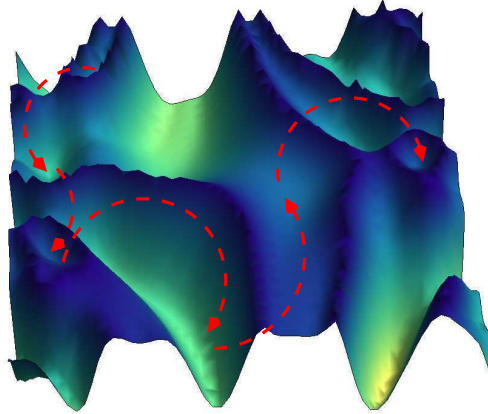


FIG. 2.1 – *Illustration des structures inhérentes dans un paysage énergétique complexe. Les flèches montrent les sauts entre différents bassins d'attraction. Dans le cas des systèmes vitreux c'est l'agitation thermique, aussi faible soit-elle, qui permet de passer les barrières d'énergie. Dans le cas de la tige confinée et des milieux granulaires il n'y a plus d'activation thermique et formellement $T = 0$. Il faut injecter de l'énergie (vibrations, cisaillement...) pour permettre à ces systèmes athermaux d'explorer l'espace des phases.*

l'entropie dans l'ensemble microcanonique : $S = k \log \Omega$. Cela montre que dans la limite thermodynamique, les ensembles microcanoniques, canoniques et grand-canoniques (que nous ne présenterons pas ici) sont équivalents.

2.2 Structures inhérentes - Systèmes athermaux

2.2.1 Systèmes vitreux

Quand un liquide est brusquement refroidi (trempe, “quenching”) en dessous d'une température critique T_g (température de transition vitreuse), sa viscosité augmente brutalement de plusieurs ordres de grandeur. Le liquide super-refroidi s'est rigidifié et est devenu un système vitreux. Cette transition est tellement brutale que les molécules se figent dans une configuration énergétique métastable, loin de l'état fondamental (cf réseaux cristallins présentés dans la section 1.1.1). Le verre se trouve alors dans un état amorphe, ni vraiment solide (il ne possède pas d'ordre à grande portée), mais ni vraiment liquide non plus (il résiste au cisaillement). Les molécules constituant le verre sont de taille microscopique et sont, en principe, soumises à l'agitation thermique. Cependant, pour $T < T_g$ ce bruit thermique est très faible et le temps de relaxation vers l'équilibre devient tellement long qu'il est inobservable en pratique. La question même de savoir si ce temps est fini ou diverge pour $T \neq 0$ reste encore débattue de nos jours (voir [71] et [72] par exemple). Ce ralentissement de la dynamique (on parle de “vieillessement”) fait entrer les systèmes vitreux dans le domaine de la physique statistique hors-équilibre. Dans cette situation, le concept de structures inhérentes se révèle très intéressant [73]. L'idée de structures inhérentes consiste à se concentrer sur le paysage énergétique du système que l'on souhaite étudier. En théorie, l'énergie thermique kT permet de passer d'un bassin d'attraction vers un autre afin de se rapprocher de l'état fondamental. Cependant,

quand la température est trop basse, le système peut rester bloquer pendant longtemps dans un état métastable avant qu'une rare fluctuation ne lui permette de passer une barrière énergétique (voir figure 2.1). On comprend alors, qualitativement, l'origine de cette spectaculaire augmentation du temps de relaxation dans les systèmes vitreux.

2.2.2 Tige élastique confinée en 2D

Revenons maintenant à la question centrale de la thèse portant sur le confinement d'une tige élastique. Comme nous allons le voir dans la section 2.3, les équations d'équilibre des tiges élastiques sont complètement déterministes. Le formalisme de la section 2.1.1 en termes de systèmes dynamiques pourrait donc être adapté dans le but de décrire les différentes étapes du pliage au fur et à mesure que le confinement augmente. Il apparaît, cependant, deux complications majeures par rapport aux cas des systèmes Hamiltoniens, empêchant une généralisation trop rapide :

- **Friction.** Nous avons déjà vu à la fin du chapitre 1 que les repliements de la tige sur elle-même engendrent des zones d'auto-contact. C'est une source de dissipation (frottements) qui rajoute un terme non-conservatif dans les équations du mouvement. Cela signifie que contrairement aux systèmes Hamiltoniens, la fonction de compressibilité Λ (voir équation (2.2)) n'est pas nulle : il existe un attracteur. La densité de probabilité dépend du temps et la fraction d'espace des phases accessible finit par s'effondrer sur une seule configuration \mathcal{C} , qui dépend des conditions initiales : $f(\mathbf{x}_t, t) = f(\mathbf{x}_0, 0) \delta(\mathcal{C})$ (voir équation (2.6)). Cela signifie que bien que la tige soit à l'équilibre mécanique, elle est très loin d'un équilibre thermodynamique. Nous verrons qu'en pratique la situation n'est en fait pas si grave. D'une part, nous pouvons très bien décrire les premières étapes du confinement sans faire appel à la friction (chapitre 3). D'autre part, nous discuterons de résultats expérimentaux (chapitre 4) qui montrent qu'il n'y a pas vraiment de convergence vers un attracteur particulier.
- **Perte d'ergodicité.** Une fois que la tige (de taille macroscopique) est dans un état d'équilibre mécanique, il lui est impossible de se ré-arranger d'elle-même. En effet, l'énergie d'agitation thermique kT est infiniment plus petite que les autres sources d'énergies mises en jeu (à commencer par l'énergie gravitationnelle). Cette absence d'activation thermique peut se traduire en écrivant formellement $T = 0$ et l'on parle alors de système athermal. Cette situation est analogue au cas des systèmes vitreux : la tige est piégée dans un état métastable mais à température strictement nulle cette fois. Sans aucune possibilité d'exploration de l'espace des phases, l'ergodicité est complètement perdue. Le seul moyen pour s'échapper d'un état métastable est d'injecter de l'énergie dans le système. Cela peut se faire en plaçant la tige sur une plaque vibrante (figure 1.8 **b**). L'énergie transmise à la tige lui permet de franchir les barrières énergétiques qui séparent les états métastables. Dans ce cas, l'approche en termes de structures inhérentes (figure 2.1) peut être mise en œuvre ici aussi. Le chapitre 4 est justement consacré à une exploration du paysage énergétique d'une tige élastique confinée.

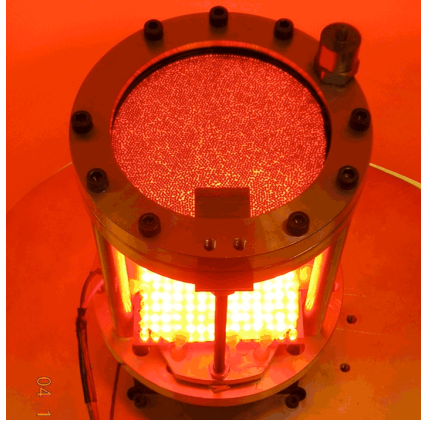


FIG. 2.2 – *Injection d’énergie mécanique dans un milieu granulaire bi-dimensionnel par l’intermédiaire de vibrations verticales (P. Reis, MIT.)*

2.2.3 Milieux granulaires

Les problèmes énoncés dans la section précédente pour les tiges élastiques se retrouvent de manière très similaire dans les milieux granulaires. Revenons sur les empilements de grains (sphères dures) introduits dans la section 1.2. Nous avons vu qu’il existe des branches réversibles d’augmentation et de diminution de la densité même en présence de friction entre les grains (figure 1.4). Comme pour l’expérience de vibration d’une tige élastique (figure 1.8 **b**), l’injection d’énergie dans un milieu granulaire se fait en imposant des vibrations verticales (figure 2.2) ou un cisaillement. Toutefois, le système est clairement hors-équilibre puisque si le forçage est supprimé les grains s’arrêtent dans une configuration métastable qu’ils sont incapables de quitter. En effet, la taille macroscopique des grains les prive de l’énergie d’activation thermique et nous nous retrouvons dans la situation d’un système athermal. La conservation de l’énergie était un ingrédient central dans les fondements de la physique statistique (cf section 2.1.1 et 2.1.2). Dans le cas des milieux granulaires quasi-statiques, l’énergie n’est non seulement pas conservée (friction, collisions non-élastiques lors de la moindre perturbation) mais ne joue pas de rôle primordial. À la fin des années 1980, Edwards et collaborateurs ont proposé de remplacer l’énergie par le volume occupé par les grains (quantité conservée), dans le but de développer une théorie statistique des milieux granulaires [74]. Ils ont été amenés, pour cela, à introduire un nouvel ensemble statistique ce qui représente l’une des rares généralisations de la notion d’ensemble pour des systèmes hors-équilibre. Cette théorie se limite aux empilements granulaires qui ont été suffisamment secoués de telle sorte qu’une fois au repos, ils soient à la fois mécaniquement stables et indépendants de leur histoire (les empilements appartenant à la branche réversible de la figure 1.4 satisfont à ces contraintes). Ces milieux granulaires sont dits bloqués (“jammed”). L’ensemble d’Edwards est constitué de toutes les configurations bloquées ξ occupant une surface d’iso-volume $V = \mathcal{W}(\xi)$ dans l’espace des phases. Cela permet de définir une entropie configurationnelle en comptant le nombre d’états “jammed” compatibles avec un volume V donné :

$$\Omega(V) = \int d\xi g(\xi) \Theta_{\text{jammed}} \delta(V - \mathcal{W}(\xi)). \quad (2.17)$$

Cette formulation est similaire à celle de l'ensemble microcanonique, cf équation (2.9), à part qu'elle contient une fonction Θ_{jam} destinée à limiter l'intégrale aux configurations effectivement bloquées. De plus la densité d'états $g(\xi)$ n'est pas pré-supposée équiprobable (sur l'ensemble des états bloqués) comme c'était le cas dans l'ensemble microcanonique [77] et dans la proposition originale d'Edwards. À partir de là, un raisonnement similaire à celui présenté dans la section 2.1.3 permet d'arriver [75, 76] à une densité de probabilité, dans un ensemble "canonique", analogue à la distribution de Boltzmann :

$$f(\xi) = \frac{\exp(-\beta \mathcal{W}(\xi))}{Z} \quad (2.18)$$

Le paramètre $\beta = 1/X$ est l'équivalent d'une "température granulaire", cf équation (2.13). La compacité X est une mesure de combien le système peut être compacté davantage. Une grande compacité indique un empilement plutôt lâche tandis qu'une petite compacité signale que l'empilement ne peut plus être compacté beaucoup plus. Dès lors, il est possible, en principe, de calculer toutes les grandeurs thermodynamiques que l'on souhaite (propriétés rhéologiques par exemple) en prenant des dérivées de la fonction de partition Z (cf section 2.1.3). En pratique, les complications viennent de la difficulté de définir proprement la fonction Θ_{jam} qui sélectionne les configurations appartenant à l'ensemble d'Edwards. De plus, la fonction de volume $\mathcal{W}(\xi)$ n'a pas d'expression analytique simple et il est très difficile de déterminer clairement la densité d'états $g(\xi)$ [78].

Cette théorie statistique des milieux granulaires a, toutefois, été confirmée expérimentalement dans de nombreuses expériences mesurant les distributions de volume et leurs fluctuations [79, 80, 81, 82]. L'interprétation de la compacité comme analogue de la température a aussi été testée avec succès dans des simulations numériques [83]. Récemment, Makse et collaborateurs ont montré que les empilements dans la phase "Random Close Packing" (cf section 1.2) peuvent être interprétés comme l'état fondamental ($X = 0$) de l'ensemble d'Edwards [84]. Nous utiliserons un approche de ce type, "à la Edwards" [85, 87], pour développer une théorie statistique de la tige confinée dans le chapitre 5.

??

2.3 Tiges élastiques - Fondements

Considérons une tige élastique de longueur totale L . Par définition, la taille caractéristique de la section transverse (épaisseur) est beaucoup plus petite que L . Quand la tige se courbe, certaines parties s'allongent tandis que d'autres se contractent. Cela signifie qu'il existe, au milieu de l'épaisseur, une ligne neutre sur laquelle la tension est nulle (voir figure 2.3). Nous nous intéressons seulement à la forme de la tige sous l'effet de forces extérieures, et non pas à la distribution des déformations à travers l'épaisseur. Dans ce cas, il est possible de ramener les déplacements de la tige aux déplacements de la ligne neutre. Nous commençons donc par étudier les propriétés géométriques de cette ligne neutre avant de nous intéresser à ses propriétés mécaniques.

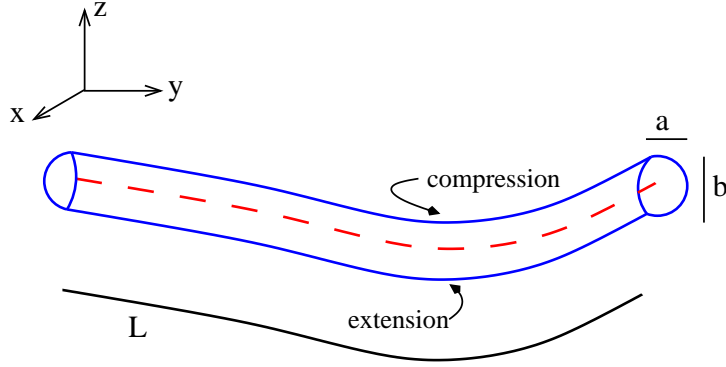


FIG. 2.3 – Tige élastique de longueur L . Dans la limite où L est bien plus grand que les longueurs transverses a et b , tout le comportement de la tige peut être ramené à celui de sa ligne neutre, pointillée en rouge. Dans le cas d’une section circulaire (ou carrée), $a = b = h$ où h est l’épaisseur de la tige.

2.3.1 Géométrie différentielle des courbes

Abscisse curviligne La ligne neutre peut être représentée de manière paramétrique grâce au vecteur position :

$$\mathbf{R}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix} \quad \text{avec } t \in [t_1, t_2].$$

La fonction $\mathbf{R}(t)$ est uni-valuée ce qui interdit la présence d’intersection de la courbe avec elle-même. De plus, nous supposons que ces fonctions sont au moins de classe C^1 (dérivables et de dérivées continues) et que les différentes composantes de $\mathbf{R}' = d\mathbf{R}/dt$ ne s’annulent pas simultanément au même point. Ces conditions permettent d’éviter des singularités de type “cusp” (coin, “kink”). Nous avons déjà vu dans la section 1.3.4 que ces contraintes sont automatiquement satisfaites pour des courbes “physiques” puisqu’elles ne peuvent pas contenir de singularités géométriques. Parmi toutes les paramétrisations possibles, il en existe une qui permet de décrire la courbe de manière particulièrement simple. Il s’agit de la représentation en abscisse curviligne, traditionnellement notée s . Définissons la fonction $\ell(t)$ qui mesure la distance entre les points $\mathbf{R}(a)$ et $\mathbf{R}(t)$ le long de la courbe :

$$\ell(t) = \int_{t_1}^t \sqrt{\mathbf{R}'(u) \cdot \mathbf{R}'(u)} du.$$

C’est une fonction continue et strictement monotone qui permet de transformer de manière bijective (“one-to-one correspondence”) l’intervalle $[t_1, t_2]$ en un nouvel intervalle $[0, L]$ faisant clairement intervenir la longueur totale de la courbe. On peut alors définir l’abscisse curviligne comme $s = \ell(t)$ et reparamétriser le vecteur position $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(\ell^{-1}(s))$. L’abscisse curviligne est donc l’analogie, sur une courbe, de l’abscisse sur une droite orientée. À partir de maintenant, nous n’utiliserons plus que l’abscisse curviligne (aussi appelé paramètre naturel) et nous noterons le vecteur position simplement $\mathbf{R}(s)$. Pour différencier l’abscisse curviligne des autres paramètres, nous notons les dérivées par rapport à s avec un point : $d(\cdot)/ds = (\cdot)$. Une conséquence remarquable de cette paramétrisation est la

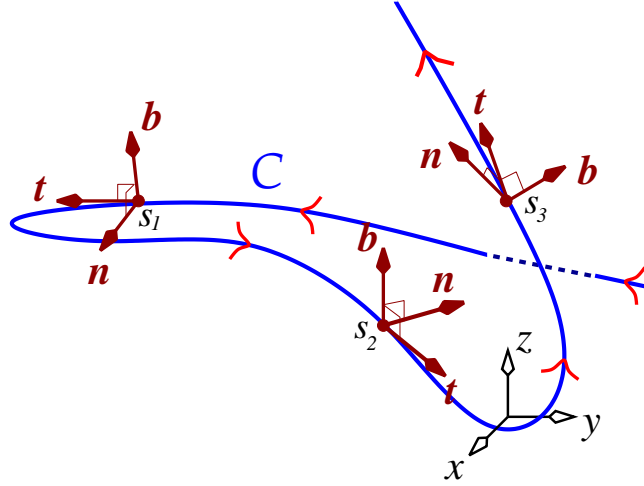


FIG. 2.4 – Évolution du repère de Frénet en différentes abscisses curvilignes $s = s_1, s_2, s_3$ le long de la courbe C .

propriété suivante :

$$\forall s \in [0, L] \quad \dot{\mathbf{R}}^2 = 1. \quad (2.19)$$

On peut imaginer le parcours de la courbe de $s = 0$ jusqu'à $s = L$ comme une évolution temporelle. La formule précédente montre alors que, grâce à cette paramétrisation, la vitesse de parcours pour aller de $\mathbf{R}(0)$ à $\mathbf{R}(L)$ est constante. Cette propriété permet de construire un repère local à la courbe relativement simple.

Repère de Frénet - Courbure/Torsion Le repère de Frenet [88] est un repère orthonormal direct qui est attaché à la ligne neutre. Cela signifie que les vecteurs de base $\{\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b}\}$ sont mobiles et changent continûment de direction le long de la courbe (figure 2.4). Le premier vecteur correspond au vecteur tangent $\mathbf{t}(s)$ défini par :

$$\mathbf{t}(s) = \dot{\mathbf{R}}(s).$$

D'après l'équation (2.19), il est évident que ce vecteur est bien unitaire. Le deuxième vecteur est le vecteur normal $\mathbf{n}(s)$ donné par :

$$\mathbf{n}(s) = \frac{\dot{\mathbf{t}}(s)}{|\dot{\mathbf{t}}(s)|}$$

Finalement, le vecteur binormal est construit à partir de $\mathbf{t}(s)$ et de $\mathbf{n}(s)$ par le produit vectoriel :

$$\mathbf{b}(s) = \mathbf{t}(s) \times \mathbf{n}(s).$$

L'évolution de ces vecteurs le long de la courbe est donnée, sous forme condensée, par la matrice suivante :

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{t}} \\ \dot{\mathbf{n}} \\ \dot{\mathbf{b}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{n} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}$$

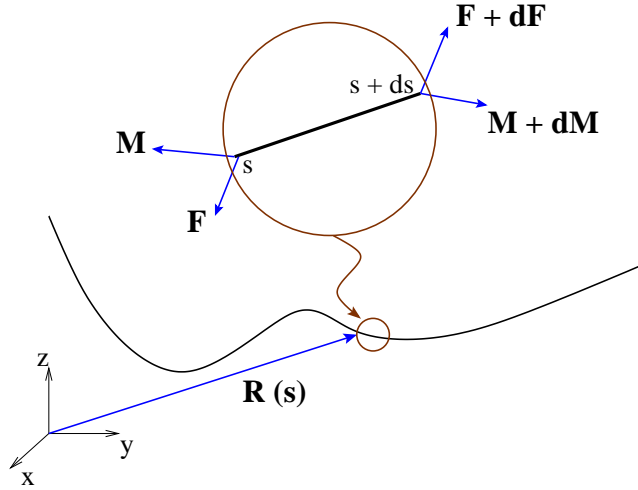


FIG. 2.5 – Illustration des forces et des moments agissant sur un tronçon élémentaire de longueur ds de la tige.

qui fait intervenir deux nouvelles quantités géométriques : $\kappa(s)$ et $\tau(s)$. Notons, entre parenthèses, que l'on peut continuer l'analogie avec une évolution temporelle, initiée à la fin du paragraphe précédent, en remplaçant formellement l'abscisse curviligne s par le temps t . Nous nous retrouvons alors face à un système dynamique similaire à ceux introduits dans la section 2.1.1. Les fonctions $\kappa(s)$ et $\tau(s)$ correspondent respectivement à :

- **Courbure.** Plaçons nous dans le plan osculateur défini par les vecteurs $\mathbf{t}(s)$ et $\mathbf{n}(s)$ (voir figure 2.4). La courbure $\kappa(s)$ est une mesure du taux de variation de la tangente $\mathbf{t}(s)$ dans ce plan. Son expression est donc donnée par :

$$\kappa(s) = |\dot{\mathbf{t}}(s)| = \sqrt{\dot{\mathbf{R}}(s) \cdot \dot{\mathbf{R}}(s)}. \quad (2.20)$$

On associe à $\kappa(s)$ son inverse : le rayon de courbure $\rho(s) = 1/\kappa(s)$. Si $\rho(s) \rightarrow \infty$, cela signifie que le vecteur tangent change peu de direction et la courbe reste très proche d'une droite ($\kappa \approx 0$).

- **Torsion** La torsion correspond à l'angle entre deux plans osculateurs pris en deux positions s et $s + ds$ infiniment proches le long de la courbe. C'est donc une mesure locale de combien la courbe se "tord" pour sortir du plan. Son expression est donnée par :

$$\tau(s) = -\mathbf{n}(s) \cdot \dot{\mathbf{b}}(s). \quad (2.21)$$

Le signe de la torsion correspond à l'hélicité (droite $\tau(s) > 0$, gauche $\tau(s) < 0$) de la courbe.

2.3.2 Mécanique - Équations de Kirchhoff

Nous nous intéressons maintenant à l'aspect mécanique des tiges élastiques. Les équations d'équilibre peuvent être déduites de plusieurs manières : équilibre mécanique par les lois de Newton ou minimisation de l'énergie élastique (puisque nous avons vu dans la section 1.3.2 que la théorie de l'élasticité est basée sur un principe variationnel). Nous

préférons présenter ici une déduction purement mécanique et réserver une illustration de la minimisation d'énergie pour la section suivante.

Considérons un tronçon élémentaire de la tige découpée par deux sections infiniment proches. On définit la section supérieure, en $\mathbf{R}(s + ds)$, et inférieure, en $\mathbf{R}(s)$, par rapport au sens de parcours de la tige le long de sa ligne neutre (figure 2.5). Les équations d'équilibre sont données par :

1. **Équilibre des forces.** La section supérieure applique une force $\mathbf{F} + d\mathbf{F}$ sur les sections plus en avant de la tige tandis que la section inférieure applique une force $-\mathbf{F}$ sur le morceau infinitésimal de tige étudié. Si la tige est en plus soumise à une force extérieure \mathbf{K} agissant sur l'unité de longueur ds , l'équilibre des forces donne :

$$\frac{d\mathbf{F}}{ds} + \mathbf{K} = \mathbf{0}. \quad (2.22)$$

2. **Équilibre des moments.** Calculons le moment appliqué à la base supérieure. Il est tout d'abord composé du moment des contraintes internes qui agissent sur cette section que l'on note $\mathbf{M} + d\mathbf{M}$. En ce qui concerne le moment (par rapport à la base supérieure) du aux contraintes internes dans la base inférieure : il est composé du moment $-\mathbf{M}$ et de la résultante $-\mathbf{F}$ des forces agissant sur cette base. Ce dernier s'écrit donc $-d\mathbf{R} \times (-\mathbf{F})$. En additionnant toutes ces contributions, l'équilibre des moments impose :

$$\frac{d\mathbf{M}}{ds} + \mathbf{t} \times \mathbf{F} = \mathbf{0}. \quad (2.23)$$

Le système d'équations [2.22-2.23] constitue les équations de Kirchhoff. La connection entre la mécanique de la tige (ses contraintes) et sa géométrie (ses déformations) se fait en introduisant une relation constitutive qui relie les moments appliqués $\mathbf{M}(s)$ à la courbure de la tige $\kappa(s)$ (cf équation 2.20). Nous verrons un exemple explicite d'une relation constitutive dans la section suivante. Les équations de Kirchhoff ont une grande histoire [31] et leur applicabilité, même pour des déformations importantes, n'est plus à prouver. Elles sont utilisées depuis très longtemps pour l'étude de la résistance et de la stabilité des poutres et des colonnes [89]. Cependant, les applications des équations de Kirchhoff ne se limitent pas qu'au génie civil puisqu'elles apparaissent régulièrement dans de très nombreux domaines aussi variés que la modélisation de l'ADN [90], des simulations réalistes du mouvement des cheveux [91], pour la modélisation de filaments biologiques [92], dans la locomotion animale [93] et les propriétés mécaniques des nœuds élastiques [94]...

2.4 Tiges élastiques en 2D

Nous allons maintenant spécialiser les équations générales de Kirchhoff au cas de tiges planaires. Cette situation correspond à l'*elastica* d'Euler. Dans cette géométrie, la base de Frénet se simplifie puisque le vecteur binormal $\mathbf{b} \equiv \mathbf{z}$ ne dépend plus de l'abscisse curviligne (figure 2.4) et la torsion de la courbe est identiquement nulle (cf équation (2.21)). Tout se passe maintenant dans le plan $\{\mathbf{t}(s), \mathbf{n}(s)\}$. En introduisant l'angle θ entre la

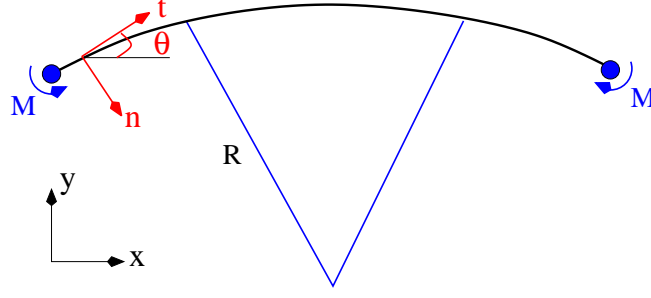


FIG. 2.6 – Le moment nécessaire pour fléchir la tige d'un rayon de courbure est $M = B/R$ dans l'approximation de Euler-Bernoulli.

direction de la tangente $\mathbf{t}(s)$ et la direction fixe \mathbf{x} du repère cartésien (figure 2.6), les vecteurs tangents et normaux s'écrivent :

$$\mathbf{t} = \cos \theta \mathbf{x} + \sin \theta \mathbf{y}, \quad (2.24)$$

$$\mathbf{n} = \sin \theta \mathbf{x} - \cos \theta \mathbf{y}. \quad (2.25)$$

En utilisant l'équation (2.20), on vérifie facilement que la courbure de la tige est donnée par :

$$\kappa(s) = d\theta/ds. \quad (2.26)$$

Supposons que la tige ne soit soumise à aucune force extérieure : $\mathbf{K} = \mathbf{0}$. Cela ne veut pas dire que la tige reste droite puisque les conditions aux bords imposent des contraintes qui la forcent quand même à se déformer. Dans cette géométrie plane, on peut décomposer la tension \mathbf{F} selon les directions tangentes et normales :

$$\mathbf{F}(s) = N(s) \mathbf{t}(s) + Q(s) \mathbf{n}(s). \quad (2.27)$$

À l'ordre le plus bas, la relation constitutive est donnée l'approximation linéaire de Euler-Bernoulli :

$$\mathbf{M}(s) = B\kappa(s) \mathbf{z}, \quad (2.28)$$

voir [95] pour des relations constitutives plus générales. Cela signifie que le moment nécessaire pour fléchir la tige est simplement proportionnel à la courbure que l'on impose (figure 2.6). La constante de proportionnalité B correspond au module de rigidité de la tige. Dans le cas d'une tige mécaniquement uniforme et de section circulaire, on a $B = \pi Y h^4 / 4$ où h est l'épaisseur de la tige (figure 2.3) et Y est le module de Young. Nous nous retrouvons donc, comme dans la section 1.3.2, dans le cas où la théorie est mécaniquement linéaire mais géométriquement non-linéaire. En insérant les expressions de la tension \mathbf{F} et du moment \mathbf{M} dans les équations de Kirchhoff [2.22-2.23], on obtient :

$$\frac{dN}{ds} + \kappa Q = 0, \quad (2.29)$$

$$\frac{dQ}{ds} - \kappa N = 0, \quad (2.30)$$

$$B \frac{d\kappa}{ds} = Q. \quad (2.31)$$

On peut alors ré-arranger les équations précédentes pour finalement obtenir une seule équation déterminant la forme de la tige :

$$\frac{d^2\kappa}{ds^2} + \left(a + \frac{1}{2}\kappa^2\right)\kappa = 0, \quad (2.32)$$

où a est une constante d'intégration. C'est une équation différentielle non-linéaire ordinaire du 3^{ème} ordre car la courbure $\kappa(s)$ contient déjà une dérivée (cf équation (2.26)).

Principe variationnel L'équation d'équilibre (2.32) peut aussi être obtenue en minimisant l'énergie élastique de la tige. Comme nous serons amenés à utiliser cette formulation dans les chapitres 4 et 5, il est important de montrer que les deux approches redonnent bien la même équation d'équilibre. Revenons à l'équation (1.4) de l'énergie d'une variété élastique. Comme nous nous limitons au cas des tiges inextensibles, les termes contenant le tenseur des contraintes γ ne contribuent pas. De plus, nous venons de voir qu'une tige élastique planaire ne contient qu'une seule courbure $\kappa(s)$. Dans ce cas, l'énergie élastique de la tige est donnée par l'intégrale, le long de la tige, du carré de sa courbure :

$$E_{\text{flexion}} = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds}\right)^2 ds. \quad (2.33)$$

où B est le module de rigidité qui vient de la relation constitutive de Euler-Bernoulli. Si aucune force n'agit sur la tige, son état d'équilibre est simplement une ligne droite et il faut imposer des conditions aux bords pour déformer la tige. Supposons que l'une des extrémités de la tige soit fixe tandis que l'autre extrémité est soumise à une force F et à un moment M . L'énergie totale de la tige s'écrit alors :

$$E_{\text{total}} = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds}\right)^2 ds + \int_0^L F \cos \theta ds. \quad (2.34)$$

L'énergie apparaît donc comme une fonctionnelle de l'angle θ et de sa première dérivée. On peut alors minimiser l'énergie grâce aux équations d'Euler-Lagrange. Une telle procédure de minimisation sera de nouveau utilisée dans une situation similaire au cours du chapitre 4. Nous nous contentons donc, ici, de donner directement l'équation d'équilibre qui découle de la minimisation :

$$B \frac{d^2\theta}{ds^2} + F \sin \theta = 0. \quad (2.35)$$

Le moment appliqué M n'intervient pas explicitement dans cette équation mais contribue aux conditions aux bords. Cette équation se retrouve aussi dans l'étude de la forme des ménisques liquides et des gouttes pendantes. En remplaçant l'abscisse curviligne s par le temps t , on retrouve aussi l'équation du pendule. Dans ce cas l'invariance dans le temps permet d'obtenir une intégrale première correspondant à la conservation de l'énergie totale du pendule. On peut utiliser cette analogie dans notre cas pour déterminer une quantité conservée :

$$\frac{1}{2}B \left(\frac{d\theta}{ds}\right)^2 - F \cos \theta = \aleph, \quad (2.36)$$

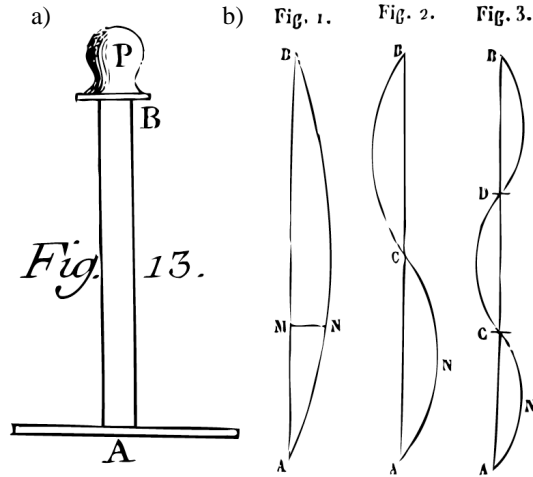


FIG. 2.7 – a) Illustration originale par Euler en 1744. b) Solutions post-flambage proposées par Lagrange en 1770. Image issue de [97].

où \aleph est une constante indépendante de s . On peut alors dériver une fois l'équation (2.35) puis injecter la valeur de $F \cos \theta$ fixée par l'équation (2.36) pour obtenir :

$$\frac{d^3\theta}{ds^3} + \left(a + \frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 \right) \frac{d\theta}{ds} = 0, \quad (2.37)$$

où nous avons juste ré-écrit la constante $\aleph = -Ba$ avec a comme nouvelle constante. L'équation (2.37) est exactement la même que l'équation d'équilibre (2.32) démontrée dans la partie précédente. Cela prouve que les deux formulations sont équivalentes.

Solution exactes L'équation d'équilibre (2.37) peut être résolue exactement grâce aux fonctions elliptiques de Jacobi. Nous renvoyons le lecteur à la référence [96] où des solutions explicites sont présentées. Malheureusement, ces solutions exactes ne sont pas toujours utilisables en pratique car, la plupart du temps, il est impossible de les inverser pour pouvoir prescrire les conditions aux bords que l'on cherche à imposer. Dans ce cas, le seul moyen pour trouver une solution est de résoudre l'équation numériquement. C'est cette voie que nous allons emprunter dès le prochain chapitre.

L'instabilité de flambage Quand on applique une pression P à l'extrémité d'une tige élastique encastree (figure 2.7 a), la tige finit par "lâcher" et adopte une forme courbée au lieu de rester droite. Cette instabilité de flambage doit être l'une des premières instabilités découvertes en théorie de l'élasticité car Euler en 1744 puis Lagrange en 1770 avaient déjà abordé cette question (figure 2.7 b). La pression critique pour l'instabilité de flambage est typiquement donnée par : $P_{\text{crit}} \propto B/AL^2$ où A est l'aire de la section de la tige et le préfacteur dépend des conditions aux bords. Ce seuil de flambage peut être calculé par une analyse de stabilité linéaire de l'équation (2.34). Nous serons amenés à faire un calcul similaire lors du chapitre 4.

Formation des Premiers Plis

Motivations Ce chapitre se situe dans le prolongement direct de la fin du chapitre précédent. En effet, après avoir établi l'équation d'équilibre des tiges élastiques planaires, ce chapitre est consacré à une étude numérique du comportement d'une tige élastique confinée à l'intérieur d'un disque rigide. La surface accessible à la tige diminue au fur et à mesure que le rayon du disque diminue : la tige réagit à ce confinement en développant des structures plissées. Le but de ce chapitre est d'étudier, simultanément, l'évolution des propriétés géométriques et mécaniques des configurations de la tige lors des toutes premières étapes du confinement. Pour cela, nous allons commencer par suivre l'approche originale d'E. Cerda et L. Mahadevan [98] avant de la généraliser pour traiter des configurations plus complexes. Les résultats obtenus dans ce chapitre sont résumés dans l'article joint (pages [61-63]), à l'intérieur duquel nous les comparons à des mesures expérimentales effectuées en parallèle à ce travail.

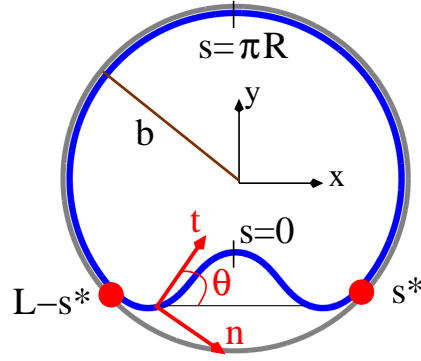


FIG. 3.1 – Tige élastique de longueur $L = 2\pi R$ à l'intérieur d'un disque de rayon $b < R$. La base locale $\{\mathbf{t}(s), \mathbf{n}(s)\}$ est identique à celle définie dans le chapitre précédent. Le centre du pli définit l'origine des abscisses curvilignes $s = 0$. Les points de raccord avec le disque sont notés s^* et $L - s^*$.

3.1 Présentation générale

3.1.1 Définition de la géométrie

Considérons une tige élastique fermée, de longueur totale L et d'épaisseur $h \rightarrow 0$, définie dans l'espace euclidien \mathbb{R}^2 de base $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}$. De manière imagée, on peut visualiser cette situation comme un simple élastique qui, une fois posé sur une table, ne peut plus s'échapper dans la troisième direction (c'est à dire quitter le plan de la table). On peut munir la tige d'un repère de Frenet tel que le plan contenant la tige soit défini par le vecteur tangent $\mathbf{t}(s)$ et le vecteur normal $\mathbf{n}(s)$. Puisque cette géométrie bi-dimensionnelle est identique à celle discutée dans la section 2.4, les vecteurs $\mathbf{t}(s)$ et $\mathbf{n}(s)$ sont encore donnés par les équations [2.24-2.25] et la courbure de la tige est :

$$\kappa(s) = \frac{d\theta}{ds}. \quad (3.1)$$

La forme de la tige est paramétrée par :

$$\mathbf{R}(s) = \int_0^s (\cos \theta(s') \mathbf{x} + \sin \theta(s') \mathbf{y}) ds' \quad \text{avec } s \in [0, L], \quad (3.2)$$

et où $\theta(s')$ est l'angle entre la tangente $\mathbf{t}(s')$ et la direction horizontale \mathbf{x} au point d'abscisse curviligne s' . À l'équilibre, la configuration adoptée par la tige est celle qui minimise son énergie de flexion (sections 1.3.2 et 2.4). Sans contraintes géométriques ou forces extérieures agissant sur la tige, la configuration d'équilibre est la forme circulaire puisque dans cette situation $E_{\text{flexion}} = BL/2R^2$ (voir équation (2.33)). Nous noterons R le rayon de ce cercle. Supposons maintenant que la tige soit introduite dans un récipient rigide, lui aussi circulaire mais de rayon $b < R$. La différence de longueur entre le périmètre de la tige et celui du disque génère une incompatibilité géométrique empêchant la tige de conserver sa forme circulaire : son excès de longueur l'oblige à se replier vers l'intérieur du disque. Cette instabilité de flambage (section 2.4) donne naissance à une région le long de laquelle la tige n'est plus en contact avec son récipient, voir une illustration sur

la figure 3.1. Il suffit, d'ailleurs, de s'amuser quelques minutes avec un simple élastique pour se convaincre que l'on peut reproduire cette nouvelle configuration très facilement. Le nombre sans dimension :

$$\varepsilon = \frac{(R - b)}{b} > 0 \quad (3.3)$$

va nous servir de paramètre de contrôle permettant de quantifier l'intensité du confinement.

3.1.2 Équation d'équilibre

Comme le raisonnement général permettant d'établir les équations d'équilibre d'une tige élastique s'applique parfaitement à la situation de la figure 3.1, nous allons être amenés à faire de nombreuses références aux équations de la section 2.4. La seule différence vient de la présence d'une force extérieure $\mathbf{K}(s) \neq \mathbf{0}$ associée à la contrainte de confinement : il s'agit de la force de réaction exercée par le récipient sur la tige. Bien entendu, $\mathbf{K}(s)$ n'est non-nul que dans les zones de contact entre la tige et le disque rigide. Si l'on néglige les effets de frottement, le vecteur $\mathbf{K}(s)$ est porté par la normale $\mathbf{n}(s)$ et est orienté dans le sens allant du disque vers la tige. Comme $\mathbf{n}(s)$ pointe toujours vers l'extérieur de la tige fermée (figure 3.1), la force exercée par le disque sur la tige s'écrit :

$$\mathbf{K}(s) = -k(s)\mathbf{n}(s) \quad \text{avec} \quad k(s) \geq 0. \quad (3.4)$$

En tenant compte de $\mathbf{K}(s)$, les équations d'équilibre [2.29-2.31] doivent maintenant être remplacées par les suivantes :

$$\frac{dN}{ds} + \kappa Q = 0, \quad (3.5)$$

$$\frac{dQ}{ds} - \kappa N = k(s), \quad (3.6)$$

$$B \frac{d\kappa}{ds} = Q, \quad (3.7)$$

où nous avons utilisé la même notation que celle introduite précédemment pour désigner la tension dans la tige : $\mathbf{F}(s) = N(s)\mathbf{t}(s) + Q(s)\mathbf{n}(s)$ (cf équation (2.27)). La force normale $Q(s)$ est directement fixée par l'équation (3.7). La force tangentielle $N(s)$ est déterminée en remplaçant l'expression de $Q(s)$ dans l'équation (3.5) puis en intégrant par rapport à s pour trouver :

$$N(s) = -B \left(a + \frac{\kappa^2(s)}{2} \right). \quad (3.8)$$

Cette manipulation fait apparaître, comme dans la section 2.4, une constante d'intégration a qui devra être déterminée par les conditions aux bords. Finalement, nous pouvons insérer $N(s)$ dans l'équation (3.6) pour réduire le système [3.5-3.7] à une seule équation d'équilibre :

$$B \left[\frac{d^2\kappa}{ds^2} + \left(a + \frac{1}{2}\kappa^2 \right) \kappa \right] = k(s). \quad (3.9)$$

3.2 Dissection de la tige en plusieurs morceaux

3.2.1 Problème à frontières libres

Regardons de plus près la configuration présentée sur la figure 3.1. On voit que l'on peut découper la tige en deux morceaux différents : une partie en contact avec le disque et une zone pliée qui ne touche pas le disque sauf au niveau de ses points de raccord s^* et $L - s^*$. Il est utile d'analyser ces deux morceaux séparément :

1. **Zone de contact tige/récipient.** La forme de ce morceau ne pose pas de difficulté : c'est un arc de cercle qui se conforme parfaitement au récipient. Dans cette région, le rayon de courbure de la tige est égal au rayon de courbure du disque et $\kappa_{\text{contact}} = 1/b$. Puisque $d\kappa_{\text{contact}}/ds = 0$, il faut que l'intensité de la force exercée par le disque sur la tige soit constante pour pouvoir satisfaire l'équation d'équilibre. Nous avons donc :

$$\mathbf{K}(s) = -k_{\text{contact}} \mathbf{n}(s) \quad \text{avec} \quad k_{\text{contact}} = \frac{B}{b} \left(a + \frac{1}{2b^2} \right) > 0. \quad (3.10)$$

En ce qui concerne la tension $\mathbf{F}(s)$, les équations (3.7) et (3.8) impliquent $Q(s) = 0$ et $N(s) = -bk_{\text{contact}}$. Cela signifie que la tige est en compression pure.

2. **Zone de détachement - Pli.** Notons $\{s_{\text{pli}}\}$ l'ensemble des abscisses curvilignes, situées entre les points de raccord s^* et $L - s^*$, où la tige est repliée vers l'intérieur du disque. En l'absence de force de réaction de la part du récipient, on a $k(s_{\text{pli}}) = 0$ et l'équation d'équilibre dans le morceau plié se réduit à :

$$\frac{d^3\theta}{ds_{\text{pli}}^3} + \left(a + \frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{ds_{\text{pli}}} \right)^2 \right) \frac{d\theta}{ds_{\text{pli}}} = 0. \quad (3.11)$$

Cependant, la longueur ℓ du pli n'est pas fixée à l'avance car la position des points de raccord est *a priori* inconnue. Cela signifie que l'intervalle $\{s_{\text{pli}}\}$ sur lequel l'équation (3.11) est valide doit, lui-même, être sélectionné par les conditions aux bords assurant l'équilibre mécanique.

Bien que nous ayons initialement divisé la tige en deux morceaux distincts, il suffit de s'intéresser au morceau plié pour déterminer la forme entière de la tige. En effet, le point 1 montre que les propriétés du morceau en contact avec le récipient sont triviales car sa forme est simplement un arc de cercle. Cependant, le point 2 montre que le calcul de la forme du pli est beaucoup plus délicat puisqu'il implique la résolution d'un problème à frontières libres nécessitant la prescription de 5 conditions aux bords. Les trois premières constantes viennent de l'ordre de l'équation différentielle non-linéaire déterminant la forme du pli (équation (3.11)). Les deux autres correspondent d'une part à la constante d'intégration a et, d'autre part à la longueur ℓ du pli.

Cette analyse s'est concentrée sur le cas de la configuration de la figure 3.1. Nous allons voir dans la section 3.3 que quand l'intensité du confinement augmente, il faut considérer $n > 1$ morceaux non-triviaux (pas de contact avec le récipient) qui se connectent à travers des points de raccord similaires à s^* et $L - s^*$ pour constituer la tige entière. Dans ce cas, nous avons un système de n équations différentielles non-linéaires (de la forme

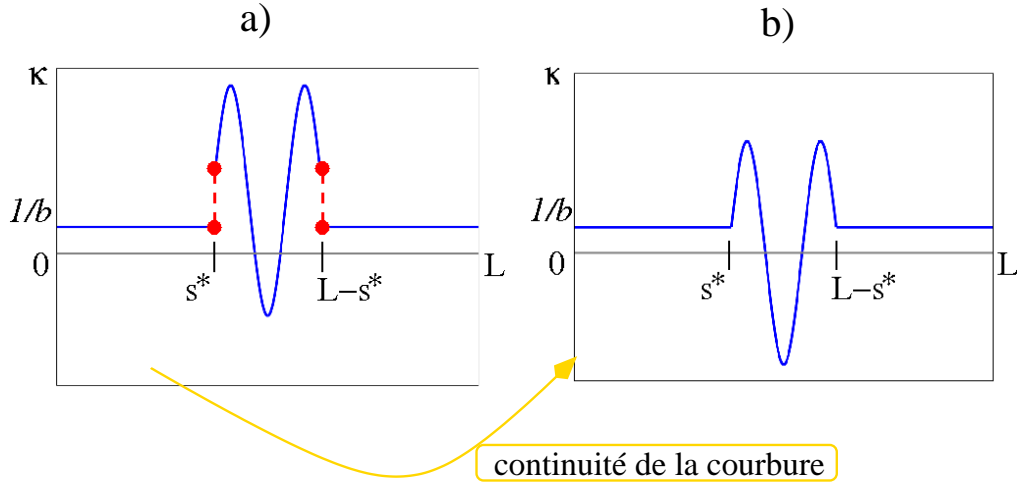


FIG. 3.2 – Représentation de la courbure $\kappa(s)$ pour la configuration de la figure 3.1. La courbure du disque est notée $1/b$ où b est le rayon du disque. **a)** Courbe volontairement faussée où l'on a rajouté une discontinuité aux points de décollement s^* et $L - s^*$ entre la tige et le disque. Ces sauts ont des conséquences non-physiques (voir le texte) et il faut abandonner cette image au profit de la figure **b)** Continuité de $\kappa(s)$ sur l'intervalle $[0, L]$. On voit, par contre que $\kappa(s)$ n'est pas dérivable en s^* et $L - s^*$. Ceci est dû à la présence de forces normales localisées qui assurent l'équilibre mécanique de la tige (voir le texte).

de l'équation (3.11)) couplées entre elles par l'intermédiaire de $5n$ conditions aux bords. Nous allons détailler ces conditions de raccord entre les différents morceaux formant la tige dans la section 3.2.2. Cependant, il est évident qu'il n'y a pas d'espoir de pouvoir résoudre ce problème analytiquement et qu'il va falloir faire appel à une résolution numérique (section 3.2.3).

3.2.2 Conditions aux bords

Fonction $\theta(s)$

La forme de la tige est entièrement déterminée par l'angle $\theta(s)$ entre la direction fixe \mathbf{x} du repère Cartésien et la tangente $\mathbf{t}(s)$ au point d'abscisse curviligne s (figure 3.1). Nous avons vu dans la section 1.3.2 qu'une courbe (1D), confinée dans un disque (2D), ne contient pas de singularités géométriques : les vecteurs $\mathbf{t}(s)$ et $\mathbf{n}(s)$ varient continûment avec s et ne peuvent jamais changer brusquement de direction. Ceci implique que la fonction $\theta(s)$ doit, elle aussi, être continue sur l'intervalle $[0, L]$. Cette observation permet de formuler une première condition aux points de raccord, s^* , entre différents morceaux de la tige :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} [\theta(s^* + \eta) - \theta(s^* - \eta)] = 0. \quad (3.12)$$

D'autre part, il est évident que $\theta(s)$ doit aussi être dérivable sur $[0, L]$. Il suffit, pour s'en convaincre, de se rappeler de l'expression de l'énergie de flexion de la tige (équation (2.33)) :

$$E_{\text{flexion}} = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 ds.$$

Il est donc nécessaire que la courbure $\kappa(s) = d\theta/ds$ existe sur tout l'intervalle pour que l'énergie élastique soit une quantité bien définie.

Courbure

Intéressons nous maintenant aux conditions de régularité de $\kappa(s)$. Les résultats du paragraphe précédent ne disent, *a priori*, rien sur les propriétés de continuité et de dérivabilité de la courbure. La relation constitutive $\mathbf{M}(s) = B\kappa(s)\mathbf{z}$ (cf section 2.4) montre déjà, qu'en l'absence de moments localisés, $\kappa(s)$ ne peut pas contenir de sauts discrets. Cela assure la continuité de la courbure, au moins à l'intérieur des morceaux individuels composant la tige. Il n'est pas interdit, cependant, que des discontinuités puissent se former aux niveaux des raccord entre les morceaux. Nous allons nous baser sur la configuration présentée sur la figure 3.1 pour démontrer, par l'absurde, que $\kappa(s)$ est en fait, bel et bien, une fonction continue le long de la tige. Commençons, donc, par supposer que la courbure possède un saut discret aux points de perte de contact tige-disque, s^* et $L - s^*$ tel que celui présenté sur la figure 3.2 **a**. La projection, Q , de la tension dans la tige, \mathbf{F} , selon la direction normale, \mathbf{n} , vaut (équations (2.27) et (2.31)) :

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{n} = Q = B \frac{d\kappa}{ds}.$$

Dans le repère mobile, $\mathbf{n}(s)$ pointe toujours vers l'extérieur de la tige fermée. Les forces appliquées par le disque sur la tige, $\mathbf{K}(s)$, sont donc toujours dans la direction inverse, $-\mathbf{n}(s)$, et $\mathbf{K} \cdot \mathbf{n} = -k(s) < 0$. C'est à dire que par action-réaction, dans les zones de contact, le disque repousse toujours la tige. Comme $\kappa(s)$ est analogue à une fonction de Heaviside aux points de raccord s^* et $L - s^*$, sa dérivée est proportionnelle à une fonction de Dirac et l'on a :

$$Q(s^*) \propto +\delta(s - s^*) > 0 \quad \text{et} \quad Q(L - s^*) \propto -\delta(s - (L - s^*)) < 0.$$

On voit que la présence de discontinuités dans $\kappa(s)$ a une conséquence non-acceptable : $Q(s^*) > 0$. En effet, ceci indique l'existence d'une force de réaction négative de la part du disque agissant sur la tige : au lieu de repousser la tige, le disque est en train de la tirer vers lui. Sans forces d'adhésion aux points de raccord, un tel comportement est impossible et prouve que la courbure doit être une fonction continue le long de la tige (figure 3.2 **b**). Bien que nous ayons illustré ce raisonnement en nous servant de la configuration symétrique de la figure 3.1, notons que nous n'avons jamais fait appel à une quelconque raison de symétrie. Le raisonnement est toujours valable et permet d'utiliser la continuité de $\kappa(s)$ pour écrire une deuxième condition de raccord entre différents morceaux de la tige :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} [\kappa(s^* + \eta) - \kappa(s^* - \eta)] = 0. \quad (3.13)$$

Forces tangentielles

La continuité de la courbure permet de déterminer une nouvelle condition de raccord concernant les forces tangentielles. En combinant les équations (3.5) et (3.7) autour d'un point de raccord s^* , on obtient :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(N(s^* + \eta) - N(s^* - \eta) + B \int_{s^* - \eta}^{s^* + \eta} \kappa \frac{d\kappa}{ds} ds \right) = 0.$$

Grâce à l'équation (3.13), cela montre immédiatement que les forces tangentielles sont continues à travers un point de raccordement :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} [N(s^* + \eta) - N(s^* - \eta)] = 0. \quad (3.14)$$

Sachant que $N(s) = -B(a + \kappa^2(s)/2)$, la condition aux bords (3.14) permet de déterminer des relations algébriques entre les constantes a de part et d'autre d'un point de raccord.

Forces normales ponctuelles

Le graphe 3.2 **b** montre que $\kappa(s)$ n'est pas dérivable aux points s^* et $L - s^*$. Nous allons, encore une fois, nous baser sur la configuration de la figure 3.1 pour comprendre l'origine physique de ce comportement non-analytique. Concentrons nous sur le morceau de tige en contact avec le disque. Nous avons vu dans la section précédente que, dans cette région, $\mathbf{K}(s) = -k_{\text{contact}} \mathbf{n}(s)$ avec $k_{\text{contact}} > 0$. Cependant, une force extérieure d'intensité constante le long de la région de contact semble être en contradiction avec l'équilibre mécanique de la tige. En effet, pour maintenir la tige stable, il faudrait que cette force s'exerce sur tous les points diamétralement opposés de la tige. L'absence de contact le long du pli empêche cette condition d'être réalisée et devrait conduire à un déséquilibre immédiat de la tige. Il est facile de s'en convaincre en calculant la résultante totale des forces extérieurs agissant sur la tige :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{\text{total}} &= \int_{s^*}^{L-s^*} \mathbf{K}(s) \mathbf{n}(s) ds, \\ &= \underbrace{-2bk_{\text{contact}} \sin \psi(s^*)}_{\neq 0} \mathbf{y}, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé $\psi(s^*) = -\psi(L - s^*)$ à cause de la symétrie autour de l'axe \mathbf{y} (voir la première figure de la section 3.3 pour la définition de l'angle d'ouverture $\psi(s^*)$). Ce résultat justifie notre intuition précédente en montrant que ce déséquilibre apparent aurait tendance à pousser la tige vers le bas (direction $-\mathbf{y}$). En fait, l'équilibre mécanique de la tige est assuré par l'existence de forces supplémentaires :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\text{local}}(s^*) &= -\chi_1 \delta(s - s^*) \mathbf{n}(s^*), \\ \mathbf{K}_{\text{local}}(L - s^*) &= -\chi_2 \delta(L - (s - s^*)) \mathbf{n}(L - s^*), \end{aligned}$$

qui n'agissent qu'aux points de raccord s^* et $L - s^*$. Dans le cas d'une configuration symétrique comme celle de la figure 3.1, on a $\chi_1 = \chi_2 = \chi$. L'intensité χ est alors déterminée en compensant le surplus de force dans la direction verticale avec les forces ponctuelles : cela donne $\chi = b \tan \psi(s^*)$. Nous verrons une autre conséquence de ces forces ponctuelles dans la section 3.3. En attendant, nous sommes maintenant en mesure de comprendre la non-analyticité de $\kappa(s)$ aux points de raccord entre deux morceaux de la tige. En utilisant la condition de continuité des forces tangentielles et en intégrant l'équation (3.6), on montre facilement la condition de raccord suivante :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\left. \frac{d\kappa}{ds} \right|_{s=s^*+\eta} - \left. \frac{d\kappa}{ds} \right|_{s=s^*-\eta} \right] = \frac{b\chi}{B} \quad (3.15)$$

C'est donc la discontinuité dans l'équation (3.15) qui explique la non-dérivabilité de $\kappa(s)$ aux points de raccord. Comme la force normale $Q(s)$ est proportionnelle à $d\kappa/ds$, elle subit une discontinuité dont l'importance est donnée par l'intensité de la force ponctuelle au point de raccord. Dans un cas plus général que celui de la figure 3.1, le nombre de forces ponctuelles peut être supérieur à 2 et les intensités χ_i ne sont pas égales mais s'ajustent pour maintenir la tige en équilibre. Cela signifie que leurs valeurs dépendent de la forme totale de la tige. En pratique, ce couplage non-local dans les conditions de raccord rend la détermination de l'intensité des forces ponctuelles un problème géométrique très difficile. Cette condition reste toutefois utile car elle permet de s'assurer, *a posteriori*, qu'une configuration correspond bien à un équilibre mécanique en vérifiant que les χ respectent bien la condition (3.15).

Conditions géométriques

Jusqu'ici, nous nous sommes concentrés principalement sur des conditions de raccord portant sur les propriétés mécaniques de la tige. Il convient, maintenant, d'agrémenter cette description en introduisant des conditions géométriques. Pour des tiges inextensibles, la somme de la longueur de tous les morceaux doit être égale à la longueur initiale L de la tige. Il s'agit d'une contrainte globale puisqu'un changement de longueur dans un morceau particulier a un impact immédiat sur la longueur de tous les autres morceaux de la tige. Aussi, pour des configurations plus complexes que celle de la figure 3.1, il faut tenir compte de la non-interpénétrabilité de la tige. Cette contrainte est non-locale puisqu'elle fait intervenir des morceaux qui, bien qu'étant initialement éloignés, finissent quand même par entrer en interaction (On peut regarder la figure 1.8 ou, par avance, les images de la section 3.3 pour se faire une représentation visuelle de la situation). Ces zones d'auto-contact peuvent apparaître sous deux formes différentes : contact ponctuel ou contact étendu. Ces deux cas se traitent de la manière suivante :

- **Contact ponctuel.** Supposons qu'un morceau $\{i\}$ entre en contact, à l'abscisse curviligne s_1 , avec un morceau $\{j\}$, à l'abscisse curviligne s_2 . Nous imposons alors que $\mathbf{R}(s_1) = \mathbf{R}(s_2)$, c'est à dire que les deux morceaux sont liés au niveau du point de contact. Il est important de remarquer que cette contrainte permet juste de s'assurer que l'évolution de ce point sera identique pour $\{i\}$ et $\{j\}$ mais ne pré-suppose rien quand à sa position absolue.
- **Contact étendu.** Supposons maintenant que les morceaux $\{i\}$ et $\{j\}$ partagent un zone étendue d'auto-contact. Dans ce cas, les deux morceaux se superposent et adoptent la même forme. Nous considérons alors qu'il n'y a plus qu'un seul morceau de longueur $\ell \rightarrow 2\ell$ et de module de rigidité $B \rightarrow 2B$. Encore une fois, ces contraintes ne pré-supposent ni la forme du contact ni sa position.

Lorsqu'un auto-contact apparaît, ces conditions géométriques sont aussi accompagnées de conditions mécaniques au niveau des points d'initialisation et de perte du contact. Finalement, il est important de remarquer qu'il y a un degré de liberté cachée. Puisque nous utilisons un récipient circulaire, toutes les configurations sont invariantes par rotation. Nous devons briser cette invariance en introduisant une origine pour les angles. Dans la suite, nous prendrons souvent $\theta(0) = 0$.

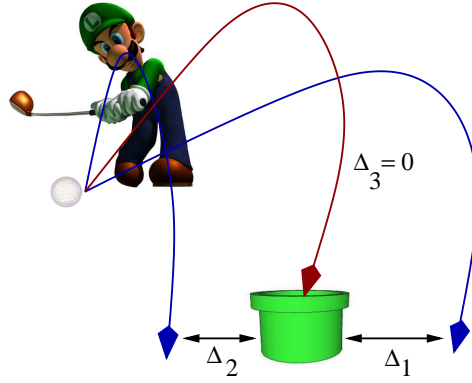


FIG. 3.3 – Illustration de la méthode du tir. Les trajectoires de la balle représentent l’intégration numérique de l’équation d’équilibre entre deux extrémités d’un morceau de la tige. Le but est de déterminer quelles sont les conditions initiales qui permettent de retrouver les conditions aux bords souhaitées à l’autre bout de l’intervalle d’intégration. L’algorithme de Newton-Raphson permet de corriger itérativement le tir de manière à trouver les zéros de la fonction score Δ et donc de converger vers la bonne solution.

3.2.3 Méthode du tir

Une configuration typique possède $n > 1$ morceaux non-triviaux. Notons s_i^* et s_{i+1}^* les abscisses curvilignes des points de raccord entre un morceau intermédiaire $\{i\}$ et les deux morceaux $\{i-1\}$ et $\{i+1\}$ qui l’entourent. Il faut prescrire 5 conditions aux bords pour pouvoir intégrer l’équation (3.11) déterminant la forme du morceau $\{i\}$. Cependant, nous venons de voir que les $5n$ conditions aux bords, assurant l’équilibre mécanique global de la tige, sont couplées de manière non-locale (détermination de l’intensité des forces ponctuelles, longueur des morceaux...). Cela signifie que, dans le cas général, nous ne connaissons pas toutes les conditions de raccord à une seule extrémité s_i^* du morceau $\{i\}$. Supposons que l’on puisse imposer $k < 5$ conditions à la position s_i^* au début du morceau. Dans ce cas, il faut imposer les $5 - k$ conditions restantes à l’autre extrémité s_{i+1}^* du domaine d’intégration : nous devons résoudre un problème de conditions aux frontières (“*Boundary value problem*”).

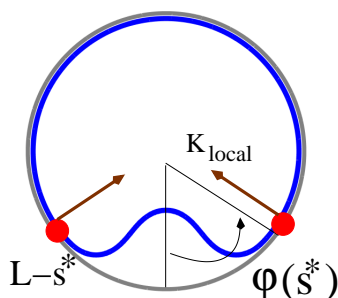
Numériquement, la méthode du tir (“*shooting method*”) est une technique qui permet de résoudre ce type de problème de manière robuste. L’idée est de compléter les k conditions connues à l’extrémité s_i^* par $5 - k$ conditions initiales “tests” choisies arbitrairement. Nous pouvons alors intégrer, par une procédure Runge-Kutta, l’équation différentielle (3.11) du point s_i^* jusqu’au point final s_{i+1}^* . Génériquement, les valeurs initiales “tests” sont fausses : elles ne correspondent pas aux vraies conditions physiques permettant l’équilibre mécanique de la tige. Cela se répercute lors de l’intégration puisque, des conditions initiales fausses ne permettent pas de retrouver les $5 - k$ conditions que nous souhaitons imposer au point s_{i+1}^* . On définit alors une fonction score Δ qui mesure la différence entre les $5 - k$ conditions physiques que nous connaissons à l’extrémité s_{i+1}^* et leurs valeurs obtenues lors de l’intégration (figure 3.3). En fonction de la valeur Δ_1 du score obtenu après la première intégration, il faut corriger les conditions “tests” au point s_i^* de manière à ce que l’on ait $\Delta_2 < \Delta_1$ lors du deuxième essai. En répétant de manière itérative cette procédure d’ajustement des conditions initiales inconnues, on voit

que le but est de trouver les zéros de la fonction score Δ et que les conditions “tests” jouent le rôle de paramètres libres. On peut donc utiliser l’algorithme de Newton-Raphson pour se rapprocher, méthodiquement, des conditions “tests” telles que $\Delta = 0$. Dans ce cas, les conditions “tests” ont convergé vers de vraies conditions physiques qui permettent de retrouver les $5 - k$ conditions aux bords au point s_{i+1}^* et le problème est résolu. En pratique, comme les conditions de raccord entre les différents morceaux sont couplées, on ne peut pas résoudre la forme d’un morceau individuellement mais il faut résoudre simultanément le problème entier de dimension $5n$ pour connaître la forme de la tige.

3.3 Une cascade de bifurcations

Nous disposons maintenant de tous les outils nécessaires pour suivre l’évolution de la forme du pli initial au fur et à mesure que l’intensité ε du confinement augmente. Une fois que les équations d’équilibre ont été résolues par la méthode du tir pour une valeur de ε donnée, il faut augmenter doucement ε et répéter de manière itérative la résolution numérique des équations d’équilibre pour suivre la forme de la tige par une méthode de continuation de branche. Quand cette branche de solutions cesse d’exister, cela signifie qu’il y a une bifurcation et que les conditions aux bords doivent être remplacées par de nouvelles.

Croissance du pli initial - Phase 1



La figure à gauche correspond à la même configuration que celle présentée dans la figure 3.1, sans redéfinir les vecteurs de base, mais en faisant apparaître l’angle d’ouverture $\psi(s^*)$. Les flèches représentent les forces ponctuelles introduites dans la section 3.2.2. Dans ce cas, le nombre de morceau à étudier est $n = 1$ et il faut prescrire 5 conditions aux bords. L’angle $\psi(s^*)$ n’est pas fixé à l’avance et doit être déterminé par les conditions aux bords.

Comme la configuration est symétrique droite-gauche, on peut utiliser des conditions supplémentaires, assez simples comparées à celles discutées dans les sections précédentes. Ici, il suffit d’étudier une moitié du pli, de $s = 0$ (centre du pli) à $s = s^*$ par exemple, pour être capable de reconstruire la forme entière de la tige. Il y a plusieurs manières de formuler les conditions aux bords pour cette configuration. Comme nous avons déjà amplement détaillé les conditions purement mécaniques lors de la section 3.2.2, nous préférons, ici, utiliser des arguments de symétrie et réserver les autres conditions pour des configurations plus complexes. Voilà la liste des conditions aux bords que nous utilisons pour résoudre, par la méthode du tir, l’équation (3.11) donnant la forme du pli :

1. Définition des angles $\implies \theta(0) = 0$.
2. Inextensibilité de la tige $\implies s^* - b\psi(s^*) = \pi b\varepsilon$.
3. Continuité de la courbure $\implies \kappa(s^*) = 1/b$.
4. Point d’inflexion au centre du pli $\implies \dot{\kappa}(0) = 0$.

5. En intégrant l'équation (3.2), on voit que la symétrie droite-gauche impose la condition suivante : $\implies \int_{s^*}^{L-s^*} \cos \theta(s) ds = 0$.

La résolution numérique de l'équation d'équilibre pour un confinement $\varepsilon = 0.15$ donne la configuration présentée dans la figure ci-dessus. On peut ensuite suivre l'évolution de la forme de la tige quand ε augmente par une méthode de continuation de branche. On observe que ce pli initial grandit vers l'intérieur du disque ce qui provoque une augmentation de l'angle d'ouverture $\psi(s^*)$. Pour $\varepsilon \approx 0.23$ ce type de configurations cesse d'exister car il devient instable. On peut comprendre ce phénomène en remarquant que c'est pour ce taux de confinement que l'angle d'ouverture atteint $\psi(s^*) = \pi/2$. Au-delà de cet angle critique, les forces ponctuelles commencent à pointer vers le bas : elles ne servent plus à stabiliser la tige mais sont, au contraire, le moteur d'une instabilité. En l'absence de force d'adhésion, ces configurations ne sont plus réalisables. On peut se convaincre du problème en calculant la force de réaction exercée par le disque sur la tige. En additionnant la force constante et la force ponctuelle introduite dans la section 3.2.2, la force totale de réaction du disque sur la tige au point s^* s'écrit :

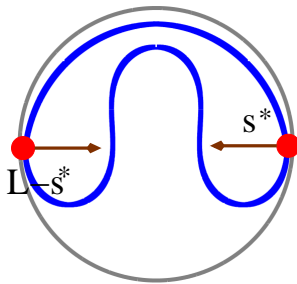
$$\mathbf{K}(s^*) = -k_{\text{contact}} (1 + b \tan \psi(s^*)) \mathbf{n}(s^*).$$

En utilisant à la fois la continuité des forces tangentielles, la solution numérique à $\varepsilon \approx 0.23$ et en intégrant l'équation (3.6) autour du point de raccord s^* , on montre que :

$$k_{\text{contact}} = -\frac{B\dot{\kappa}(s^*)}{b \tan \psi(s^*)} \geq 0.$$

Cela confirme que quand $\psi(s^*) \rightarrow \pi/2$, la force de réaction s'annule, $k_{\text{contact}} \rightarrow 0^+$, et les configurations deviennent instables. Nous savons, physiquement, que cela ne peut pas être la fin de l'histoire et qu'une nouvelle branche de solutions doit venir remplacer ces configurations. Cependant, nous sommes déjà dans un régime largement *post-flambage* et il n'est pas évident quelles doit être la forme des nouvelles configurations.

Décollement spontané par le haut - Phase 2



Nous avons découvert que, comme la force extérieure s'annule, c'est l'ensemble de la moitié supérieure de la tige qui se sépare uniformément du récipient. La tige n'est alors maintenue en équilibre que par deux contacts ponctuels diamétralement opposés (les flèches dans la figure associée). Puisque la symétrie droite-gauche persiste, nous sommes maintenant dans une situation où le nombre de morceaux n non-triviaux est $n = 2$, ce qui implique la prescription de 10 conditions aux bords.

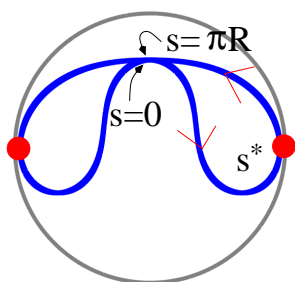
Comme pour les configurations qui suivront, nous n'allons plus expliciter, une par une, l'ensemble des conditions aux bords spécifiques à chaque configuration, mais simplement mentionner les nouvelles particularités qu'il faut prendre en compte. Les conditions de symétrie restent largement inchangées par rapport au cas des configurations de type (1)

mais il faut maintenant maintenir les points de contact s^* et $L - s^*$ dans des positions diamétralement opposées :

$$x(s^*) = -x(L - s^*) = b \quad \text{et} \quad y(s^*) = y(L - s^*) = 0.$$

Pour rester cohérent avec la symétrie droite-gauche, nous imposons aussi $\theta(s^*) = \pi/2$ et $\theta(L - s^*) = -\pi/2$. Au fur et à mesure que ε augmente, le morceau supérieur s'effondre vers l'intérieur du disque tandis que le pli inférieur continue de grandir vers le haut. Cette situation ne dure pas très longtemps car pour $\varepsilon \approx 0.25$, les deux morceaux se rejoignent sur l'axe de symétrie. Ce contact annonce la fin de cette configuration puisqu'elle contient une auto-intersection.

Premier auto-contact - Phase 3

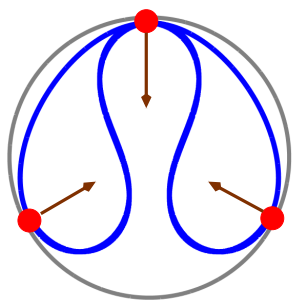


Afin de prévenir l'apparition d'une auto-intersection il est nécessaire de modifier les conditions aux bords des configurations de type (2). Par raison de symétrie, nous sommes encore dans le cas $n = 2$. Il faut tenir compte de la présence d'un auto-contact ponctuel sur l'axe de symétrie droite-gauche. Nous implémentons cette contrainte en écrivant : $y(0) = y(\pi R)$, c'est à dire :

$$\int_0^{s^*} \sin \theta \, ds + \int_{s^*}^{\pi R} \sin \theta \, ds = 0.$$

Notons que la contrainte ci-dessus n'impose en rien la position absolue du point d'auto-contact mais maintient juste les deux morceaux liés l'un à l'autre. Bien que nous ne représentions plus les forces ponctuelles, cette configuration est toujours maintenue à l'équilibre mécanique par la présence de 2 forces ponctuelles diamétralement opposées. De plus, la tension normale $Q(s)$ doit être équilibrée de part et d'autre du point de contact ce qui impose : $B\kappa(0) = -B\kappa(\pi R)$. Cette branche de solution commence pour $\varepsilon \approx 0.25$ et reste valable jusqu'à $\varepsilon \approx 0.29$ quand la position du point d'auto-contact, se dirigeant vers le haut, rentre lui-même en contact avec le disque. Comme la tige ne peut pas traverser le récipient, nous devons abandonner cette solution pour en chercher une nouvelle.

Trois contacts ponctuels - Phase 4



L'arrivée du premier point de contact sur le disque à la fin des configurations de type (3) donne naissance à une troisième force ponctuelle agissant sur la tige. En raison de la symétrie droite-gauche, nous avons encore $n = 2$. Les configurations émergentes sont assez élégantes car elles ne sont en contact avec le disque qu'en 3 points laissant un infime, mais non-nul, écartement avec les parois du disque. Cet espace-ment a d'ailleurs été exagéré dans la figure associée pour le rendre plus visible. (Les notations sont inchangées par rapport aux figures précédentes.)

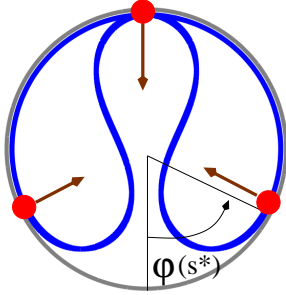
Comme pour les configurations de type (3), il faut imposer que la position du point d'auto-contact reste commune entre les deux morceaux. La seule différence vient du fait que, maintenant, la position de ce point est fixée à $\{x(0;\pi R) = 0 \text{ et } y(0;\pi R) = b\}$ pour interdire le croisement avec le disque. De plus, le raccord entre les deux morceaux au point s_* est libre de se déplacer et nous avons :

$$\int_0^{s^*} \sin \theta \, ds = - \int_{s^*}^{\pi R} \sin \theta \, ds = -b(1 + \cos \psi(s^*)),$$

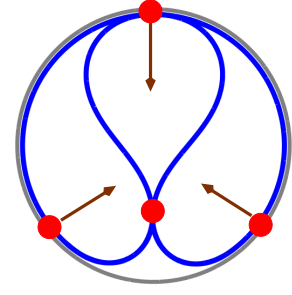
$$\int_0^{s^*} \cos \theta \, ds = - \int_{s^*}^{\pi R} \cos \theta \, ds = b \sin \psi(s^*).$$

La contrainte ci-dessus maintient le raccord entre les deux morceaux le long du disque mais n'impose pas sa position qui reste auto-déterminée par les autres conditions aux bords. La nouvelle force ponctuelle, dirigée vers le bas, permet aux points s^* et $L - s^*$ de redescendre en dessous de l'axe $y = 0$ et donc dans des angles d'ouverture $\psi(s^*) < \pi/2$. En faisant augmenter l'intensité ε du confinement, nous trouvons que le morceau supérieur se rapproche lentement du récipient pour finalement se conformer, de manière uniforme, avec les parois du disque. Cela arrive pour $\varepsilon \approx 0.4$, et l'on retrouve alors un contact linéique entre la tige et le récipient. Cette étape marque la fin des configurations de type (4) car sans ajout de nouvelles contraintes, le morceau supérieur sortirait du récipient.

Retour à un contact linéique - Phases 5 et 6



Le retour à un contact linéique nous ramène à des configurations très similaires à celles de type (1). La seule différence vient du fait qu'il y a maintenant 3 forces ponctuelles. Grâce à la symétrie droite-gauche, nous avons $n = 1$ et donc simplement 5 conditions aux bords (figure à gauche).



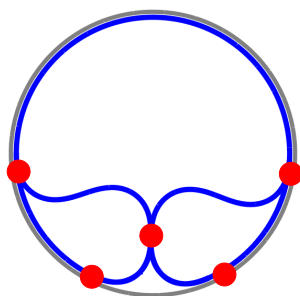
Dans ce cas, les conditions aux bords de type (1) sont presque toutes applicables ici aussi. Il suffit de tenir compte de la présence du point d'auto-contact sur l'axe de symétrie de la même manière que dans les configurations de type (4). La force exercée par le disque sur les régions de contact tige-disque est donnée par :

$$k_{\text{contact}} = - \frac{B (\dot{\kappa}(0) + \cos \psi(s^*) \dot{\kappa}(s^*))}{b \sin \psi(s^*)}$$

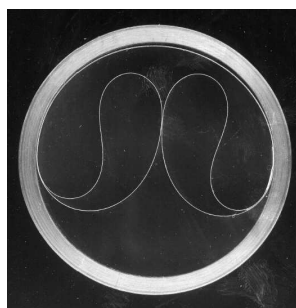
On voit que cette expression est similaire à celle des configurations de type (1) à part qu'il y a un terme supplémentaire dû à la présence de la troisième force ponctuelle. Au fur et à mesure que ε augmente, les deux "bulbes" symétriques se rapprochent l'un de l'autre. Dans le même temps, la zone de contact avec le disque continue de rester ponctuelle. Finalement, pour $\varepsilon \approx 0.62$ les deux "bulbes" se percutent. Ces nouvelles configurations, de type (6), sont représentées sur la figure de droite ci-dessus. L'apparition d'un nouveau point d'auto-contact, servant à interdire une intersection de la tige avec elle-même, signifie qu'il y a

maintenant $n = 2$ morceaux. En plus des conditions aux bords classiques introduites dans la section 3.2.2 (continuité l'angle θ , de la courbure κ et des forces tangentielles N), nous devons imposer des conditions géométriques. D'une part, il faut que la position de ce point reste commune aux deux morceaux quand ε augmente. Ceci est facilement réglé en écrivant une condition similaire à celles présentées dans le cas des configurations de type (3) (contact entre "bulbes") et de type (4) (contact supérieur avec le disque). D'autre part, la symétrie droite-gauche impose aussi que la position horizontale des deux points de contact se situent sur l'axe $x = 0$. Nous avons trouvé que ces configurations à 2 points d'auto-contact existent jusqu'à $\varepsilon \approx 0.71$. Au delà, le système bloque et nous ne pouvons plus trouver de solutions compatibles avec les conditions aux bords.

Écrasement en forme de champignon - Phase 7



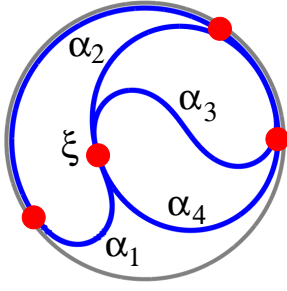
La branche de configurations de type (6) disparaît car c'est la zone de contact tige/disque qui commence à s'aplatir pour former une zone de contact étendue. Ces configurations, pour lesquelles $n = 2$, sont les dernières à présenter la symétrie droite-gauche. Grâce à cette invariance, les conditions aux bords de ces configurations sont similaires à celles de toutes les configurations présentées auparavant et sont principalement géométriques.



Bien que nous ayons trouvé des configurations de ce type jusqu'à $\varepsilon \approx 1.04$, nous avons aussi découvert qu'elles deviennent instables vis à vis de nouvelles configurations asymétriques vers $\varepsilon \approx 0.85$ (section 3.4). Cela ne veut pas dire que c'est la fin complète de l'existence de solutions symétriques. La figure, ci-contre, montre que nous avons pu obtenir, expérimentalement, des configurations symétriques même pour des taux de confinement plus élevés. (Les détails de l'expérience sont fournis dans l'article joint à la fin du chapitre)

Cependant, il semble logique de supposer que de telles configurations existent pour des valeurs discrètes de ε mais sont toujours instables par rapport à d'autres configurations non-symétriques. Nous n'avons pas poursuivi dans cette voie, pour plutôt, nous concentrer sur les premières configurations non-symétriques. Cependant, notre méthode de continuation de branches, en augmentant doucement ε , suggère que les configurations de type (7) ne peuvent pas se connecter continûment à de nouvelles configurations symétriques pour de plus grands confinements.

Brisure de symétrie - Phase 8



La disparition de la branche symétrique ne donne aucune information sur la forme possible des configurations asymétriques qui viennent la remplacer. Nous nous sommes laissés guider par l'expérience (voir la publication reproduite en fin de chapitre), pour trouver ces nouvelles configurations. Nous avons découvert que c'est en fait l'un des "bulbes" des configurations de type (7) qui bascule spontanément vers l'intérieur de l'autre "bulbe" (voir figure de gauche ci-dessus).

Cette transition vers une forme asymétrique implique un ré-arrangement global de la tige. Les premières configurations asymétriques qui commencent à apparaître pour $\varepsilon \approx 0.85$, contiennent $n = 4$ morceaux (figure de gauche). Ces morceaux $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\}$ partagent tous un point de raccord commun que nous notons ξ . En l'absence de symétrie droite-gauche, il suffit maintenant d'appliquer une à une toutes les conditions aux bords détaillées dans la section 3.2.2. Notons $(\cdot)_{\alpha_i=1,\dots,4}(\xi, \text{disque})$ les différentes variables selon qu'elles sont évaluées en ξ ou au point de raccord des morceaux avec les parois du disque. La continuité des angles, de la courbure, des forces tangentielles et l'équilibre des forces normales imposent :

$$\theta_{\alpha_1}(\xi) = \theta_{\alpha_2}(\xi) \quad \theta_{\alpha_2}(\xi) = \theta_{\alpha_3}(\xi) \quad \theta_{\alpha_3}(\xi) = \pi + \theta_{\alpha_4}(\xi)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\alpha_1}(\xi) &= \kappa_{\alpha_2}(\xi) & \kappa_{\alpha_2}(\xi) &= \kappa_{\alpha_3}(\xi) \\ N_{\alpha_1}(\xi) &= N_{\alpha_2}(\xi) & N_{\alpha_2}(\xi) &= N_{\alpha_3}(\xi) \end{aligned}$$

$$Q_{\alpha_1}(\xi) + Q_{\alpha_2}(\xi) = Q_{\alpha_3}(\xi) + Q_{\alpha_4}(\xi)$$

La position du point de contact doit être commune à tous les morceaux. En pratique, cela impose des relations intégrales sur l'angle θ . On peut, toutefois, écrire cette condition sous la forme suivante plus compacte :

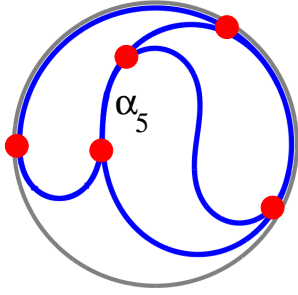
$$\begin{aligned} x_{\alpha_1}(\xi) &= x_{\alpha_2}(\xi) & y_{\alpha_1}(\xi) &= y_{\alpha_2}(\xi). \\ x_{\alpha_1}(\xi) &= x_{\alpha_3}(\xi) & y_{\alpha_1}(\xi) &= y_{\alpha_3}(\xi). \\ x_{\alpha_1}(\xi) &= x_{\alpha_4}(\xi) & y_{\alpha_1}(\xi) &= y_{\alpha_4}(\xi). \end{aligned}$$

Les conditions de raccord entre les morceaux et les parois du disque sont données par :

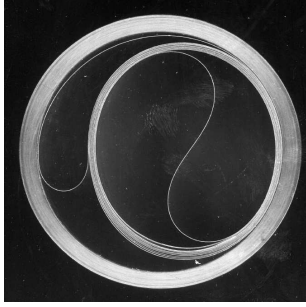
$$\kappa_{\alpha_1}(\text{disque}) = \frac{1}{b} \quad \kappa_{\alpha_2}(\text{disque}) = \frac{1}{b} \quad \kappa_{\alpha_3}(\text{disque}) = \frac{1}{b} \quad \kappa_{\alpha_4}(\text{disque}) = \frac{1}{b}.$$

Il faut compléter les 18 conditions précédentes par : i) la contrainte d'inextensibilité de la tige et ii) le choix d'une origine pour les angles θ , pour disposer de 20 conditions aux bords permettant de fermer le système. Pour un taux de confinement $\varepsilon = 0.85$ donne précisément la configuration non-symétrique présentée dans la figure associée.

Vers un enroulement en spirale - Phase 9



En faisant augmenter ε , on se rend compte que le point de contact ξ finit rapidement par dégénérer en une zone de contact étendu et d'épaisseur double. On peut alors modéliser cette région comme un seul morceau α_5 , en prenant garde de multiplier sa longueur et son module de flexion par 2 (voir section 3.2.2). Dans ce cas, les $5n = 25$ conditions aux bords sont complètement similaires à celles présentées dans le paragraphe précédent.



Nous avons décidé d'arrêter notre étude de l'évolution de la forme de la tige avec les premiers stades du développement de ce contact étendu. Il y a deux raisons pour cela :

i) Le nombre grandissant de conditions aux bords implique la résolution d'un système à frontières libres, non-linéaire et de grande dimension. Cela représente un problème particulièrement ardu, sujet à des instabilités numériques devenant de plus en plus difficiles à contrôler.

ii) D'autre part, nous suspectons que des formes analogues à ce dernier type de configurations persistent pour de plus grands confinements. En l'absence de friction, le bulbe qui a basculé vers l'intérieur du disque, pour former le double morceau α_5 est libre de continuer à s'épaissir en s'enroulant sur lui-même sous forme de spirale. C'est exactement la même chose que nous faisons dans la vie de tous les jours lorsque l'on roule un journal ou un magazine pour le porter dans sa main (voir la figure expérimentale ci-dessus). Dans ce cas, il ne faut pas s'attendre à de nouvelles ré-organisations de la tige mais juste à un enroulement en spirale jusqu'à ce que l'intérieur du disque soit rempli.

3.4 Propriétés mécaniques

À chaque fois que nous disposons de la forme d'une configuration, nous pouvons en déduire, en parallèle, toutes ses propriétés mécaniques. Par exemple, la force exercée par la tige (par unité de longueur dans la direction transverse), sur le récipient est donnée par :

$$W = \int_{\text{contact tige/disque}} (\mathbf{K} + \mathbf{K}_{\text{local}}) \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (3.16)$$

L'évolution de W en fonction du taux de confinement ε est représentée sur la figure 3.4. Nous remarquons que W est très grand pour $\varepsilon \ll 1$ et donne même l'impression de diverger. Ce comportement s'explique par la présence d'une barrière associée à l'instabilité de flambage qui donne naissance au premier pli. Immédiatement après la formation de ce pli, la déflexion de la tige par rapport à un cercle est de l'ordre de l'épaisseur, $h \neq 0$, de la tige. C'est ce paramètre microscopique, absent dans notre modèle uni-dimensionnel, qui régularise la divergence. Une fois le premier pli initié, W diminue jusqu'à ce que les configurations (4) apparaissent. Ceci s'explique par la disparition progressive des régions de contact tige/disque, qui finissent même par se réduire à des contacts ponctuels. Avec

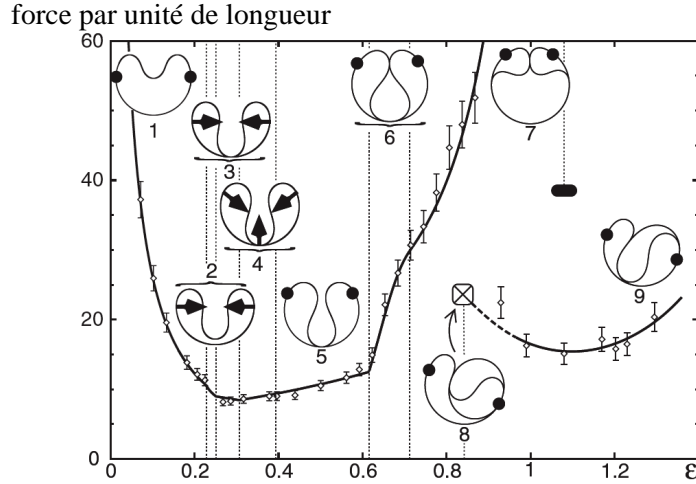


FIG. 3.4 – Force exercée par la tige sur le disque en fonction de ε . La ligne continue représente les prédictions numériques tandis que les barres correspondent aux mesures expérimentales (voir article reproduit).

l'arrivée d'une troisième force ponctuelle, W recommence à augmenter. D'abord relativement lente, cette augmentation devient beaucoup plus rapide avec le retour de zones de contact étendues, configurations 5 à 7. Finalement, nous observons que la transition vers des configurations asymétriques est accompagnée d'un saut de W . Ceci s'explique par la ré-organisation globale que subit la tige lors de cette transition. Nous avons comparé ces résultats numériques aux mesures expérimentales sur la figure 3.4. Les détails de l'expérience sont expliqués dans l'article en fin de chapitre mais nous voyons que l'accord est excellent.

La figure 3.5 montre l'évolution de l'énergie élastique :

$$E_{\text{flexion}} = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 ds. \quad (3.17)$$

Ce graphe permet de mettre en évidence le caractère hystérétique de la transition vers les configurations asymétriques, caractère que nous avons pu vérifier expérimentalement, au moins qualitativement, en secouant un peu les configurations expérimentales dans la zone d'hystérésis prédite numériquement. Ce point, qui n'est pas précisé, dans l'article joint renforce le bien-fondé des résultats numériques.

3.5 Bilan

Nous venons de voir que l'évolution de la forme de la tige révèle déjà une complexité sous-jacente inattendue, même pour de faibles taux de confinement. Il existe une surprenante cascade de bifurcations qui s'achève par une transition vers des configurations asymétriques s'enroulant sur elles-mêmes pour former une spirale. Il s'agit du résultat le plus important de ce chapitre. Il est important d'avoir mis en évidence l'origine de ce motif spiralé car il reviendra à plusieurs reprises dans les chapitres suivants. La comparaison

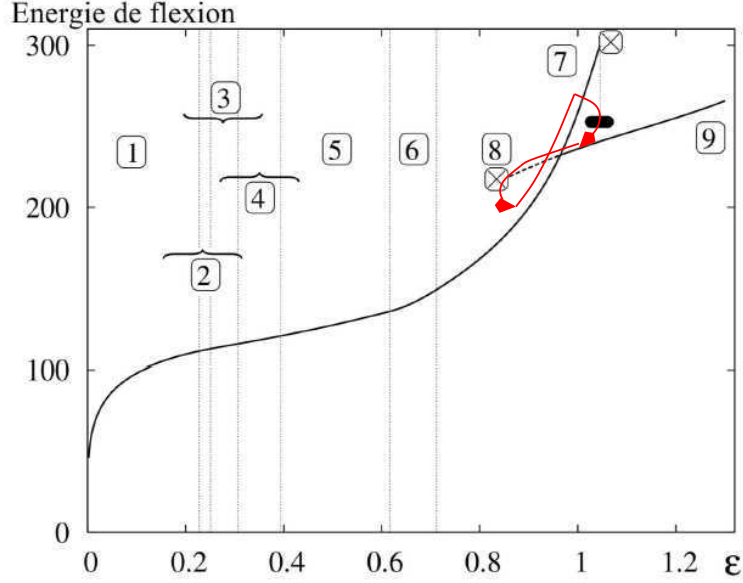


FIG. 3.5 – Évolution de l'énergie de flexion en fonction du confinement. Les formes correspondantes ont été omises pour alléger la notation et nous ne notons que leur numéro. La ligne en pointillé montre la partie métastable qui correspond à l'apparition de la solution non-symétrique. Les flèches rouges illustrent la zone d'hystérésis.

avec les résultats expérimentaux (voir l'article) est excellente. Cela montre qu'une description simple en termes d'*elastica* est robuste et que les ingrédients de base : élasticité, confinement et auto-évitement sont suffisants.

Mentionnons brièvement deux développements possibles :

- **Friction.** Nous n'avons considéré que des forces de réaction dirigées selon la normale $\mathbf{n}(s)$. Il est possible d'introduire une force de friction en ajoutant une composante tangentielle de la forme $|\mathbf{K}_t| \leq \mu |\mathbf{K}_n|$. Le glissement n'est initié que quand la réaction normale $|\mathbf{K}_n| = k(s)$ devient assez grande pour que l'égalité soit atteinte. Dans ce cas, il faudrait remplacer l'équation d'équilibre (3.11) par l'équation suivante :

$$B \left[\frac{d^3\phi}{ds^3} + \left(a + \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{ds} \right)^2 \pm \mu \frac{d\phi}{ds} \right) \frac{d\phi}{ds} \right] = k(s).$$

Bien qu'il serait intéressant de voir dans quelles mesures le nouveau paramètre μ peut avoir une influence sur les configurations (métastabilité...), la comparaison avec les expériences (dans lesquelles il y a inévitablement de la friction) est tellement bonne que l'on peut penser que les nouveautés resteront minimales. Il semble que la présence de friction n'est pas aussi primordiale que ce que l'on aurait pu penser (cf discussion dans la section 2.2.2 du chapitre précédent), au moins pour les petits confinements.

- **Symétries discrètes du récipient** Quelle est l'importance de la symétrie de rotation du récipient (disque) sur l'enchaînement des bifurcations que nous venons de décrire? Bien que nous nous attendions à ce que la transition vers un motif spiralé

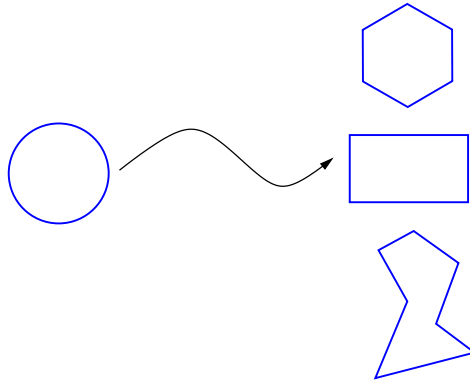


FIG. 3.6 – *Nous pouvons remplacer le récipient disque par d'autres récipients présentant des symétries discrètes ou peut-être aucune symétrie pour voir comment sont affectées les nouvelles configurations. Un récipient de forme polygonale permettrait de modéliser la croissance de la fleur Datura.*

soit un phénomène robuste, il est possible que la brisure de symétrie de rotation du récipient engendre des bifurcations un peu différentes. Nous discutons dans l'introduction de la feuille repliée de *Datura* (section 1.3.1). L'invariance par translation du bourgeon nous place dans une géométrie proche de la situation étudiée dans ce chapitre. Il serait intéressant de voir si l'on peut modéliser la forme repliée de la *Datura* en reprenant la même étude dans un récipient polygonal, plus proche de la structure du bourgeon (figure 3.6).

Spiral Patterns in the Packing of Flexible Structures

L. Boué, M. Adda-Bedia, A. Boudaoud,* D. Cassani, Y. Couder, A. Eddi, and M. Trejo

Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure, 24 Rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

(Received 20 July 2006; published 20 October 2006)

Spiral patterns are found to be a generic feature in close-packed elastic structures. We describe model experiments of compaction of quasi-1D sheets into quasi-2D containers that allow simultaneous quantitative measurements of mechanical forces and observation of folded configurations. Our theoretical approach shows how the interplay between elasticity and geometry leads to a succession of bifurcations responsible for the emergence of such patterns. Both experimental forces and shapes are also reproduced without any adjustable parameters.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.166104

PACS numbers: 68.55.-a, 46.32.+x, 46.65.+g

Illustrations of tightly packed flexible structures abound in nature from plant leaves in buds [1], insect wings in cocoons [2], DNA in viral capsids [3], chromatin in cell nuclei [4] to crumpled sheets [5–14] and rods [15–17]. This situation is often a consequence of the structures' own growth within a container or of a decrease in the available volume. In most cases the geometrical arrangement of the folding plays a central role in ensuring a safe deployment [1,4]. Besides, the elastic properties of these confined systems are further constrained by self-avoidance as well as by the dimensionality of both structures and containers. The interplay of these mechanisms usually yields a variety of possible self-organized patterns [1–17]. Their complexity led to approaches separating elastic forces [5,7–11,17] and geometrical configurations [6,16,18,19]. So far, in experiments on crumpled thin sheets [6,11,12] and rods [16], it has remained elusive to simultaneously determine mechanical forces and the corresponding configurations. Here, we make these measurements possible with an intermediate approach: the quasi-two-dimensional confinement of thin sheets. Ideally, this would correspond to the folding of an elastic rod when it is confined isotropically in a disk of decreasing radius, or equivalently when an elastic rod grows within a disk of fixed radius. We identify spirals as the building block of the apparently complex patterns observed and study in detail the generation of an isolated spiral. In parallel, our theoretical approach accounts for both elasticity and self-avoidance and agrees quantitatively with experiments.

Our first experimental setup, designed in a *conical geometry*, is inspired by the one used to study single developable cones [8,9]. A circular sheet of typical radius 40 cm and thickness $h = 0.1$ mm is pulled through a circular rigid hole of radius R of the order of 1 cm [Fig. 1(a)]. The distance Z between the pulling point and the plane of the hole serves as a control parameter. As it is much easier to bend the sheet than to stretch it, the sheet first assumes the shape of a developable cone, except near the tip where the pulling force is applied. This setup allows a quasi-one-dimensional, isotropic confinement as: (i) a cut across the

sheet in the plane of the hole yields a rodlike one-dimensional structure of length $L = 2\pi Z$, which grows within a disk of radius R as Z is increased—the shape of the cross section actually prescribes the shape of the whole sheet due to the approximately self-similar conical shape.

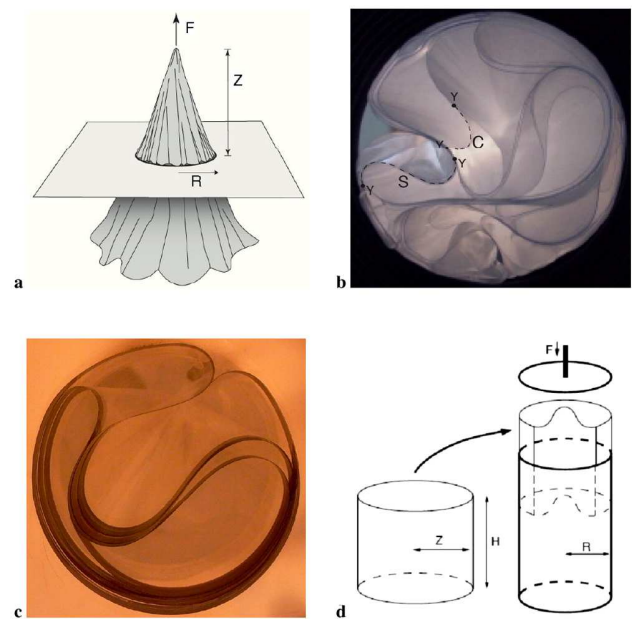


FIG. 1 (color online). Experimental setups and patterns. We used Mylar sheets of thickness $h = 0.1$ mm and bending modulus $B = 6.610^{-4}$ N m. (a) Setup for conical packing. A sheet of radius 40 cm is pulled through a hole of radius 1 cm. (b) Typical pattern at high confinement ($p = 15\%$). Examples of Y points (bifurcations), C curves, and S curves are shown. (c) Typical pattern at lower confinement ($p = 3\%$). A double-layered S curve inside a set of C curves forming a smaller effective container. (d) Setup for cylindrical packing. Sheets of height $H = 14$ cm are glued into a cylinder and introduced into a Plexiglass container of inner radius $R = 2.6$ cm and height 38 cm. The sheet is pushed at small velocity (0.5 mm s^{-1}) with an aluminum disc of radius 5 cm, and the pushing force F is recorded in a steady state (results in Fig. 3).

(ii) It is ensured that there is no preferred direction in the disk.

The strength of the confinement can be measured using the ratio of a cross-sectional area to that of the hole $p = Lh/S$ with $S = \pi R^2$. When most of sheet has been pulled through the hole, the packing fraction p can be as large as 20%. Figure 1(b) shows a deceptively complex shape typically observed for high confinements. However, a careful glance allows one to abstract out some much simpler well-defined patterns: (i) Y points where a stack of layers bifurcates tangentially into two groups; (ii) curves connecting Y points, which can themselves be classified into two types: C curves and S curves (with and without inflexion points, respectively).

Generically, S curves appear to link concave C curves acting as a flexible shell smaller than the outer rigid disk. These observations suggest that in order to understand close packing, one should focus on the generation of these elementary patterns. It is possible to isolate them during the early stages of the packing process and Fig. 1(c) shows an S curve, assuming a yin-yang-like shape, enclosed in a container formed of stacks of three C curves. While the pressure exerted on the container could be related to the pulling force F , friction on the container and configurational changes are mixed up, which results in a rather circumvoluted interpretation of F .

Thanks to Ref. [17], we know that conical and cylindrical geometries are described by the same equations except for some slightly different developability constraints. Besides, for large confinements, a slender cone is obviously equivalent to a cylinder. Therefore, we devised a second experimental setup designed in a *cylindrical geometry*. A sheet of height H and width L is glued into a cylinder of radius $Z = L/2\pi$. With its configuration prepared according to the topologies observed in the conical geometry, the sheet is introduced inside a smaller cylindrical container of radius R and let to relax to an equilibrium shape by tapping in order to minimize the effect of friction at the lineic self-contacts. Then the folded sheet is pushed along the inside of the container [Fig. 1(d)]. The pushing force F is recorded when a steady state is reached. Because F is proportional to the mean pressure P exerted on the container through Coulomb's law: $F = \mu 2\pi RHP$, this new setup achieves the goal of simultaneous observation of configurations and measurement of pressures. The dynamic friction coefficient $\mu = 0.37$ between the sheet and the container was measured independently.

The classical theory of bending due to Bernoulli and Euler stands as a cornerstone in elasticity theory. Within this framework, the mechanical properties and the shape of rods and cylindrical sheets can be determined by solving the equation of Euler's *Elastica*:

$$B \left[\frac{d^2 \kappa}{ds^2} + \left(a^2 + \frac{1}{2} \kappa^2 \right) \kappa \right] = k, \quad (1)$$

where κ is the curvature of the rod at arclength s , B is the bending modulus, a is an undetermined constant of integration, and k represents the external normal forces. However, the obvious physical constraint of self-avoidance gives rise to many complications in the prescription of suitable boundary conditions. Also, since the position and nature of these contacts is not known *a priori*, the formulation results in a nonlinear free-boundary problem. The boundary conditions necessary to close this formulation are determined at all n Y points that may be present in the rod and can be separated into two kinds: (i) *local mechanical equilibrium*. Because of torque and tangential forces equilibrium, the curvature κ is continuous all along the rod and the constants a_i $\{i = 1, \dots, n\}$ satisfy simple algebraic relations. The exact form of these compatibility equations depends on the nature of the Y point considered (localized or extended contact between curves) but always stems from tangential forces equilibrium. On the other hand, normal forces are proportional to local changes in curvature and provide a set of relations between the values of the curvature derivative κ' just before and after Y points. In this case one also needs to include other normal forces that may come from self-contacts or from the container itself. (ii) *Geometrical self-avoidance*. Regions of the rod that are initially far away from each other may end up in close vicinity during the packing process. In order to account for the impossibility of self-intersections in such regions, we require that whenever two (or more) points become in contact, they are bound together sharing a common position whose global location is otherwise free to move. Also, extended regions of contact are described by a new C or S curve whose thickness is adjusted according to the number of layers of which this region is made up.

The numerical resolution involves a shooting and branch tracking method. We start with a set of $5n$ shooting parameters: $\{\phi_i, \kappa_i, \kappa'_i, a_i, \ell_i\}_{i=1, \dots, n}$, where ϕ stands for the angle of the tangent to the rod with a constant direction ($d\phi/ds = \kappa$) and ℓ_i is the length between two consecutive Y points. Some of these parameters can be derived directly from the boundary conditions specified above, otherwise initial guesses are made for the remaining ones. The difference between their values and the desired boundary values at the other end of the integration interval is set up as a function which zeros are found with a Newton method. Eventually, this procedure yields the configurations of the sheet from which the corresponding mean pressures on the container can be extracted.

Now we describe the successive phases leading to the generation of spirals during the packing process. We compare the experiments and the numerics as the ratio between the excess perimeter of the cylindrical sheet and the perimeter of the container $\epsilon = (Z - R)/R = (L - 2\pi R)/2\pi R$ is increased. For low confinements, a symmetrical fold [Fig. 2(a) and 2(b)] grows inwards until its extremities become diametrically opposed. A first bifurcation occurs at

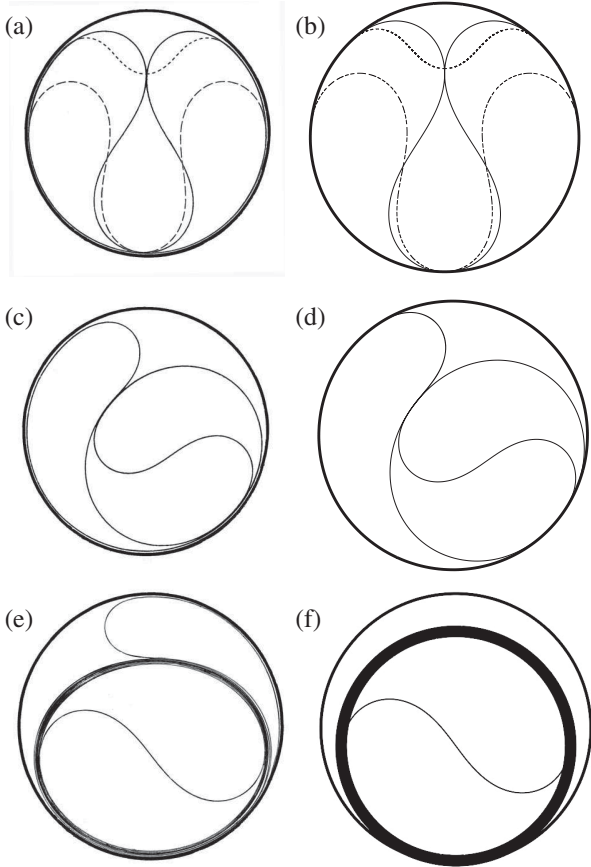


FIG. 2. Configurations for cylindrical packing. Experiments (left) and numerics (right) are almost indistinguishable. (a), (b) Symmetric configurations with no self-contact ($\epsilon = 0.016$, short dashed line), one self-contact point ($\epsilon = 0.31$, continuous line), and two self-contact points ($\epsilon = 0.66$, long dashed line). (c), (d) First asymmetric configuration for $\epsilon = 0.85$. The S curve and the surrounding C curves form a yin-yang-like pattern. (e) Yin-yang pattern at high confinement $\epsilon = 9.4$. The thick C curves are formed of 10 layers. (f) Numerical shape of the S curve in the yin-yang pattern for very large confinements. In this case, the C curves form a rigid circular effective container.

$\epsilon = 0.23$ and the contact between the sheet and the container reduces to two diametrically opposed points (inset 2 of Fig. 3). Then at $\epsilon = 0.25$, a first self-contact appears between the inward fold and the C curve. As ϵ is increased, this contact point is driven back toward the disk and finally reaches it, thereby creating rather peculiar configurations displaying 3 localized contacts with their container, which exist in the range $0.31 < \epsilon < 0.39$ (inset 4 of Fig. 3). This additional support leads to an increase in the external pressure although the gap between the two C curves and the disk is too thin to be observed experimentally. Eventually these C curves come back in contact with the container leaving only two symmetrical S curves connected through a contact point with the disk, for $0.39 < \epsilon < 0.62$ [Fig. 2(a) and 2(b)]. A second self-contact ap-

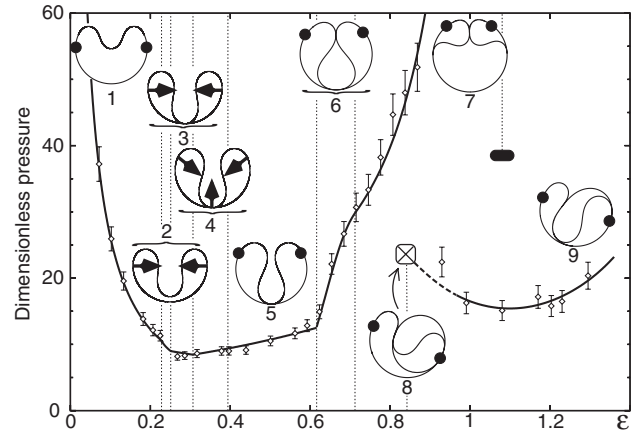


FIG. 3. Mean pressure as a function of confinement for cylindrical packing. The pressure is given in units of B/R^3 . Diamonds correspond to experimental measurements and lines to theoretical results. The dashed line corresponds to metastable asymmetric configurations reflecting the hysteretic character of the transition; the cross signals a termination of the asymmetric branch. Vertical dashed lines correspond to separations between different types of numerical configurations shown as insets numbered from 1 to 9. Single contacts with the container are labeled with force vectors; lineic contacts with the container are delimited by disks.

pears at $\epsilon = 0.62$ [Fig. 2(a) and 2(b)]. Above $\epsilon = 0.71$, the lower contact point flattens out into an extended zone of self-contact (inset 7 of Fig. 3). While configurations with an axis of symmetry disappear at $\epsilon = 1.04$, asymmetric configurations may appear above $\epsilon = 0.85$ [Fig. 2(c) and 2(d)]: a lower bump of one S curve suddenly dives into the convex part of the second S curve forcing the lower self-contact to slide away from its symmetrical position. The transition between the two types of configurations is thus hysteretic. At this point, we observe experimentally that the inner S curve begins to rotate surrounding itself by spiral layers of C curves [Fig. 1(c)]. While the size of the outer loop (formed by the remaining S curve) decreases, a yin-yang-like shape embedded in an effective spiral container promptly develops [Fig. 2(e)]. When multiple turns have been completed, the outermost layer of the C curves is almost a circle and the pattern is formed of an S curve surrounded by a spiral of pitch equal to the thickness of the sheet h . The shape of the S curve can easily be determined numerically and is shown in Fig. 2(f). The pressures computed numerically are in good agreement with the experimental values (Fig. 3).

In three dimensions, the uniform close packing of a rod yields an optimal helix with a pitch and a radius proportional to the thickness of the rod [18,19]. In two dimensions, we propose that the optimal packing of a rod yields a spiral of pitch equal to the thickness of the rod h , one of the rod extremities being at the center of the spiral. This tiling is optimal because the only unoccupied region is the core

of the spiral, which area is of the order of h^2 . Indeed, this geometrical construction naturally arises in our experiments on cylindrical sheets. However, a yin-yang pattern [Fig. 2(e)] is found in the core because a cross section of the sheet does not have any extremity inside the core; moreover, the radius of the core is in general much larger than h because of the high elastic cost of bending the sheet on such a small scale.

Now we turn to the estimation of the pressure needed to maintain such a structure within a surface of area $S = \pi R^2$ in terms of the packing ratio $p = Lh/S$. The area of the core is approximately the difference between S and the area occupied by the sheet Lh . Therefore, the radius of the core is given by $R_c = \sqrt{(S - Lh)/\pi}$. Its bending energy is proportional to B/R_c :

$$E_{S \text{ curve}} = \alpha \frac{\sqrt{\pi}B}{\sqrt{S}} \frac{1}{\sqrt{1-p}}, \quad (2)$$

where $\alpha = 17.44$ is the nondimensioned energy of the S curve as found numerically [Fig. 2(f)]. Besides, the radius of curvature of the spiral increases by an amount of h each time a new layer surrounds the inner core:

$$\frac{1}{\kappa(\theta)} = \frac{h}{2\pi} \theta + \sqrt{\frac{S - Lh}{\pi}} \quad (3)$$

in terms of the polar angle θ . Integrating the square of the curvature κ , we obtain the elastic energy of the spiral:

$$E_{\text{spiral}} = \frac{\pi B}{2h} \ln \frac{1}{1-p}. \quad (4)$$

From this, one can compute the total bending energy (per unit height) $E = E_{\text{spiral}} + E_{S \text{ curve}}$ and thus the mechanical pressure $P = -\partial E/\partial S$,

$$P = \frac{\pi B}{2hS} \frac{p}{1-p} + \alpha \frac{\sqrt{\pi}B}{2S^{3/2}} \frac{1}{(1-p)^{3/2}}. \quad (5)$$

This expression matches a simple scaling $P \sim BL/S^2$ at low packing ratio ($p = Lh/S \ll 1$) to a nontrivial divergence when $p \sim 1$ because of the high energetic cost of the core. This equation successfully reproduces the experimental measurements for spiral configurations with packing ratios p as large as 15% (such as in Fig. 2(e)).

In this Letter we showed how spirals are generated from a sequence of bifurcations. In an ideal system we would expect only one spiral. However, in real situations, friction between layers of C curves kicks in for higher confinements and tends to freeze the C curves into an effective thicker and more rigid sheet. This creates effective containers within which the same sequence is repeated, generating new spiraling patterns. While the underlying individual pockets still grow in a spiral fashion, an apparently com-

plex pattern emerges from this cascade of bifurcations [Fig. 1(b)]. Although we investigated a simplified geometry for packing, our results have a wider scope because they are based on the key ingredients of elasticity and self-avoidance. Indeed, for the more complex packing of 2D elastic sheets in 3D containers, a cut through a crumpled ball of paper yields 1D curves, the topology of which could correspond to an assembly of spirals. This is the subject of work in progress.

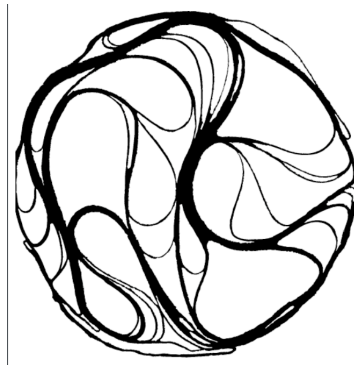
This work was partly supported by the Ministre de la Recherche-ACI Jeunes Chercheurs and by the EEC MechPlant NEST project. Laboratoire de Physique Statistique is associated with the CNRS (UMR No. 8550) and Universities Paris VI and Paris VII.

*Electronic address: arezki.boudaoud@lps.ens.fr

- [1] H. Kobayashi, B. Kresling, and J.F.V. Vincent, Proc. R. Soc. B **265**, 147 (1998).
- [2] J.H. Brackenbury, J. Zool. **232**, 253 (1994).
- [3] P.K. Purohit, M.M. Inamdar, P.D. Grayson, T.M. Squires, J. Kondev, and R. Phillips, Biophys. J. **88**, 851 (2005)
- [4] N. Kleckner, D. Zickler, G.H. Jones, J. Dekker, R. Padmore, J. Henle, and J.A. Hutchinson, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **101**, 12 592 (2004).
- [5] A. Lobkovsky, S. Gentges, H. Li, D. Morse, and T. Witten, Science **270**, 1482 (1995).
- [6] F. Plouraboué and S. Roux, Physica (Amsterdam) **227A**, 173 (1996).
- [7] M. Ben Amar and Y. Pomeau, Proc. R. Soc. A **453**, 729 (1997).
- [8] S. Chaïeb, F. Melo, and J.C. Geminard, Phys. Rev. Lett. **80**, 2354 (1998).
- [9] E. Cerda, S. Chaïeb, F. Melo, and L. Mahadevan, Nature (London) **401**, 46 (1999).
- [10] A. Boudaoud, P. Patricio, Y. Couder, and M. Ben Amar, Nature (London) **407**, 718 (2000).
- [11] K. Matan, R.B. Williams, T. Witten, and S.R. Nagel, Phys. Rev. Lett. **88**, 076101 (2002).
- [12] D.L. Blair and A. Kudrolli, Phys. Rev. Lett. **94**, 166107 (2005).
- [13] G.A. Vliementhart and G. Gomper, Nat. Mater. **5**, 216 (2006).
- [14] E. Sultan and A. Boudaoud, Phys. Rev. Lett. **96**, 136103 (2006).
- [15] B. Roman and A. Pocheau, Europhys. Lett. **46**, 602 (1999).
- [16] C.C. Donato, M.A.F. Gomes, and R.E. de Souza, Phys. Rev. E **67**, 026110 (2003).
- [17] E. Cerda and L. Mahadevan, Proc. R. Soc. A **461**, 671 (2005).
- [18] A. Maritan, C. Micheletti, A. Trovato, and J.R. Banavar, Nature (London) **406**, 287 (2000).
- [19] S. Przybyl and P. Pieranski, Eur. Phys. J. E **4**, 445 (2001).

Émergence de la Complexité

Motivations Le diagramme de phase présenté dans le chapitre précédent révèle une richesse assez étonnante de configurations possibles pour des taux de compactions pourtant faibles : Il ne s'agit après tout que des premières étapes post-flambage. Cette observation suggère une forte croissance du nombre d'états possibles au fur et à mesure que le taux de compaction augmente. La figure expérimentale ci-dessous confirme d'ailleurs visuellement l'énormité de l'espace des phases accessibles.



Le paysage énergétique associé à une tige confinée est extrêmement complexe. Une question vient alors immédiatement à l'esprit : Existe-t'il une mesure sous-jacente qui attribue un poids statistique aux différentes configurations réalisables ? Un échantillonnage systématique de l'espace des phases permet d'aborder cette question.

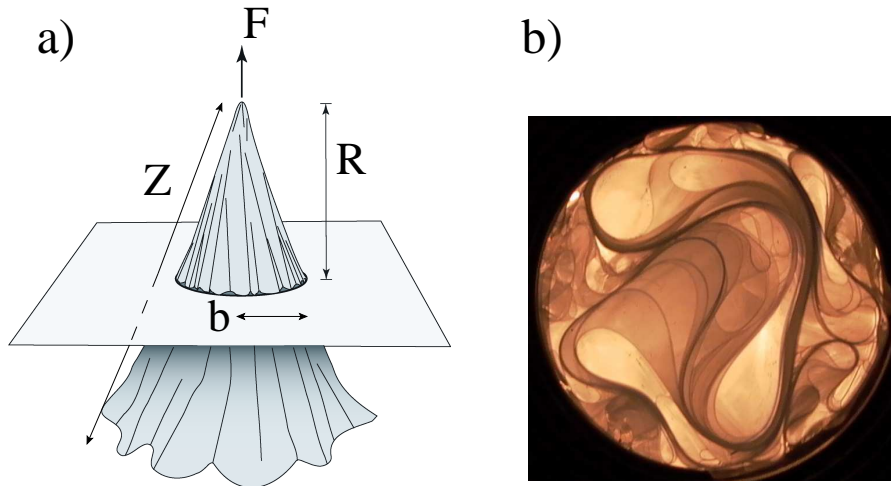


FIG. 4.1 – **a)** Illustration de l'expérience de compaction isotrope d'une feuille de mylar. **b)** Grâce à l'invariance de la forme dans la direction verticale, une coupe horizontale de la feuille dans le plan du trou donne une tige "effective" confinée dans un disque. Remarquons l'extrême complexité de la configuration.

4.1 Description de l'expérience associée

Commençons par décrire brièvement le dispositif expérimental qui a motivé les simulations numériques que nous avons développées. Le principe de l'expérience est basé sur une idée très simple mais astucieuse. Une feuille de mylar initialement circulaire de rayon Z et d'épaisseur $h \ll Z$ est attachée, en son centre, à un bras mécanique. Ce bras permet de tirer la feuille vers le haut en lui appliquant une force dans la direction verticale. La force de tirage, F , est mesurée à l'aide d'un dynamomètre. Au repos, la feuille adopte une forme similaire à celle d'un drap suspendu dont la géométrie est identique à celle d'un cône développable [99] (et cf section 1.3.3). L'idée est alors de tirer la feuille d'une certaine distance R vers le haut, en la forçant à passer à travers le trou circulaire de rayon $b \ll Z$ (figure 4.1 **a**). La géométrie conique du dispositif expérimental implique une invariance d'échelle de la forme de la feuille dans la direction verticale. Dans le plan du trou, la forme de la feuille devient équivalente à celle d'une tige de longueur $2\pi R$ confinée à l'intérieur d'un disque de rayon b . Un exemple typique de tiges "effectives" obtenues est présenté sur la figure 4.1 **b**. Cette nouvelle expérience présente deux propriétés remarquables :

- **Confinement isotrope.** Contrairement aux expériences de compaction discutées dans la section 1.3.4, cette méthode de confinement de tiges "effectives" ne fait pas intervenir de directions d'injection privilégiées.
- **Couplage géométrie-mécanique.** Grâce à la mesure de F et à la visualisation des tiges dans le plan du trou, il est possible d'étudier simultanément les propriétés mécaniques et géométriques des tiges confinées.

Pour obtenir plus d'information sur les détails techniques de cette expérience, nous renvoyons le lecteur à la référence [100]. En ce qui nous concerne, nous reviendrons sur les résultats de l'expérience au cours de la section 4.4 pour les comparer à ceux de notre propre "expérience" numérique.

4.2 Une “expérience” numérique

4.2.1 Introduction

La figure 4.1 **b** annonce clairement la couleur. Nous avons commencé à percevoir cette possibilité pendant l’interminable cascade de bifurcations du chapitre précédent mais il n’y a, maintenant, plus aucun doute : au fur et à mesure que le taux de confinement augmente, les configurations se complexifient rapidement. Cette figure montre aussi que la configuration “spirale”, bien qu’étant peut-être optimale, est en fait loin de représenter le seul état possible. Il serait suicidaire de penser que notre première approche, basée sur la résolution des équations de Kirchhoff, a une chance d’être fructueuse dans ce nouveau régime. Une nouvelle stratégie, plus adaptée, doit être envisagée de manière à étudier des taux de confinements plus élevés que ceux traités dans le chapitre précédent.

Devant cette émergence de complexité dans la forme des configurations, c’est une approche statistique que nous avons choisi de privilégier. En nous inspirant de la notion de structures inhérentes introduite dans la section 2.2 dans le contexte des systèmes vitreux, nous avons mis en place une expérience numérique destinée à explorer le paysage énergétique des configurations. La ligne directrice que nous allons suivre au cours de ce chapitre est donc la suivante : i) Développer une formulation en termes d’énergie. ii) Écrire un algorithme de minimisation. iii) Procéder à une analyse statistique des configurations. Plutôt que d’essayer de modéliser, point par point, l’expérience décrite dans la section précédente, nous avons décidé de mettre en place un modèle ne faisant appel qu’à un nombre minimal d’ingrédients physiques. Nous finirons ce chapitre par une comparaison entre les deux expériences, l’expérience numérique et celle de la figure 4.1 **a**, pour dégager un comportement robuste de certaines propriétés statistiques de la tige.

4.2.2 Énergie de la tige confinée

De manière à rester fidèle avec la notation des chapitres précédents, nous continuons à noter $\mathbf{R}(s) \in \mathbb{R}^2$ le vecteur position de la tige, L sa longueur totale et B son module de rigidité. Toutefois, contrairement au chapitre précédent, nous allons maintenant considérer des tiges ouvertes, c’est à dire $\mathbf{R}(0) \neq \mathbf{R}(L)$, plutôt que des tiges fermées. Dans l’optique d’étudier le paysage énergétique d’une tige élastique confinée, voilà la fonctionnelle d’énergie totale que nous proposons :

$$E_{\text{total}}[\mathbf{R}(s)] = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d^2 \mathbf{R}}{ds^2} \right)^2 ds + \frac{\lambda}{2} \int_0^L \mathbf{R}^2 ds + \text{“Interaction cœur dur”}. \quad (4.1)$$

Il s’agit bien d’un modèle minimal car cette formulation ne fait intervenir que trois ingrédients dont les interprétations physiques respectives sont :

- **Flexion.** Le premier terme, paramétré par B , correspond simplement à l’énergie de flexion de la tige en élasticité linéaire (cf équation (2.33)).
- **Confinement.** Nous avons choisi de représenter le confinement en plongeant la tige à l’intérieur d’un potentiel quadratique d’intensité λ centré sur l’origine $\mathbf{R} = \mathbf{0}$. Ce terme est proportionnel au rayon de gyration R_g défini par :

$$R_g^2 = \frac{1}{L} \int_0^L \mathbf{R}^2 ds. \quad (4.2)$$

On voit alors que le paramètre λ , homogène à une pression, permet de contrôler l’extension spatiale moyenne accessible à la tige. Cette modélisation est assez différente de ce qui se passe dans l’expérience de compaction décrite dans la section précédente puisque nous n’imposons pas la présence de murs rigides (le trou de rayon b). Nous reviendrons sur ce point à la fin de ce chapitre.

- **Auto-évitement.** Le terme noté, formellement, “Interaction cœur dur” dans la fonctionnelle (4.1) représente une interaction non-locale et isotrope qui permet d’éliminer les auto-intersections. On peut le représenter de la manière suivante :

$$\text{“Interaction cœur dur”} = \lim_{\omega \rightarrow +\infty} \frac{\omega}{2} \iint ds_1 ds_2 \delta(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2)). \quad (4.3)$$

Ce terme est toujours nul sauf quand il y a un croisement de la tige avec elle-même, c’est à dire $\mathbf{R}(s_1) = \mathbf{R}(s_2)$, auquel cas il devient infini et fait diverger E_{total} . Comme nous allons développer un algorithme de minimisation de cette énergie, le terme d’auto-évitement introduit une discontinuité dans le paysage énergétique qui fait que les configurations contenant une auto-intersection seront rejetées lors de la minimisation. La technique de détection d’auto-intersections est détaillée dans la section 4.2.5.

En l’absence de confinement ($\lambda = 0$), le minimum de l’énergie (4.1) correspond simplement à une tige toute droite pour laquelle $E_{\text{total}} = 0$. Quand $\lambda > 0$, il commence à y avoir une compétition entre l’énergie de flexion et l’énergie de confinement puisque les deux termes ont des effets antagonistes. Le module de rigidité essaye de maintenir la tige droite mais le terme de confinement rend cela impossible car il impose une extension spatiale finie devenant de plus en plus petite au fur et à mesure que λ augmente. Cela signifie qu’il existe un rapport critique entre les paramètres λ et B au delà duquel la tige subit une instabilité de flambage (cf section 2.4) et commence à se déformer. Nous avons déterminé ce seuil de flambage par une analyse de stabilité linéaire des équations d’Euler-Lagrange de la fonctionnelle (4.1). Les détails du calcul sont présentés dans l’appendice 7.1 et donnent la valeur du seuil de flambage :

$$\left(\frac{\lambda}{B}\right) \Big|_{\text{critique}} \approx \frac{10.5}{L^4}. \quad (4.4)$$

Si l’on continue à augmenter le rapport λ/B au delà de la valeur seuil calculée ci-dessus, la tige subit de grandes déformations et la contrainte de non-interpénétrabilité finit par donner naissance à des régions d’auto-contact pour former une structure plissée complexe. Bien que nous nous intéressions à ce régime *post-flambage*, l’équation (4.4) est importante car elle fait apparaître une échelle de longueur caractéristique :

$$\ell_{\text{critique}} \approx 1.8 \left(\frac{\lambda}{B}\right)^{-1/4} \quad (4.5)$$

Pour un rapport λ/B donné, ℓ_{critique} est une estimation de l’extension linéaire accessible à la tige puisque les longueurs supérieures ont déjà franchi le seuil de flambage et commencent à se replier vers le centre.

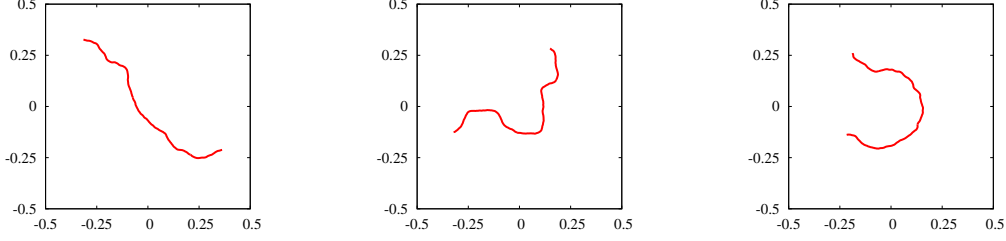


FIG. 4.2 – *Formes initiales aléatoires générées avec $D = 700$. Les unités sont renormalisées par la longueur totale de la tige L .*

4.2.3 Discrétisation

De manière à rendre l’expression de l’énergie de la tige manipulable numériquement, nous devons, dans un premier temps, redimensionner toutes les variables pour travailler avec des quantités adimensionnées. Nous allons donc effectuer les transformations suivantes :

$$\tilde{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{R}}{L}, \quad \tilde{s} = \frac{s}{L}, \quad \tilde{E} = \frac{2LE}{B}, \quad \Lambda = \frac{\lambda L^4}{B},$$

Comme dans les chapitres précédents, la courbure de la tige est définie par :

$$\tilde{\kappa} = L \kappa(\tilde{s}) = \frac{d\theta}{d\tilde{s}} = \frac{d^2 \tilde{\mathbf{R}}}{d\tilde{s}^2} \quad (4.6)$$

où $\theta(\tilde{s})$ est l’angle entre la tangente au point \tilde{s} et une direction fixe. Ces changements de variables permettent de ré-écrire l’énergie totale de la tige sous la forme adimensionnée suivante :

$$\tilde{E} = \int_0^1 \left(\frac{d\theta}{d\tilde{s}} \right)^2 d\tilde{s} + \Lambda \int_0^1 \tilde{\mathbf{R}}^2 d\tilde{s} + \text{“Interaction cœur dur”}. \quad (4.7)$$

Nous discrétisons ensuite la tige en N segments joignant les $N + 1$ points formant la tige : $\{(x_1, y_1), \dots, (x_{N+1}, y_{N+1})\}$. Cela donne :

$$\tilde{E} = N \sum_{i=1}^{N-1} (\theta_{i+1} - \theta_i)^2 + \frac{\Lambda}{N} \sum_{i=1}^{N+1} (\tilde{x}_i^2 + \tilde{y}_i^2)^2 + \text{“Interaction cœur dur”}. \quad (4.8)$$

C’est cette expression que nous allons utiliser pour évaluer numériquement l’énergie de la tige en utilisant les angles θ_i comme degrés de liberté.

4.2.4 Configurations initiales

L’étape suivante dans la mise en place de notre expérience numérique consiste à équiper la fonctionnelle d’énergie (4.8) de conditions initiales bruitées. Il est, en effet, primordial d’introduire du désordre dans les configurations initiales pour se donner une chance d’explorer un échantillon représentatif d’états métastables lors de l’étape de minimisation. Nous avons choisi de construire les formes initiales aléatoires en imposant un bruit

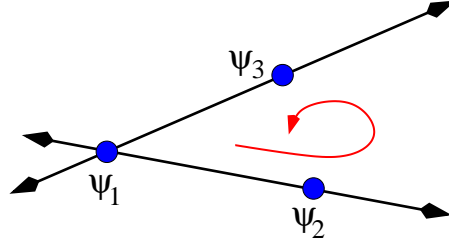


FIG. 4.3 – Le triplet de points $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3\}$ est dans le sens trigonométrique.

blanc sur la différence $\theta_{i+1} - \theta_i$. De cette manière, en revenant à la limite continue, nous obtenons un bruit blanc sur la courbure de la tige :

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{R}''(s) \rangle &= 0, \\ \langle \mathbf{R}''(s_1) \mathbf{R}''(s_2) \rangle &= 2D\delta(s_1 - s_2),\end{aligned}$$

Comme l'énergie de flexion est elle-même proportionnelle à la courbure, cela signifie que les configurations initiales ont un bruit blanc sur leur énergie de flexion. L'intensité, D , de ce bruit ne peut pas dépasser une valeur maximale $D_{\max} \approx 750$ au dessus de laquelle, des auto-intersections commencent à être générées dans les conditions initiales. Une fois qu'une configuration est construite, nous calculons son barycentre pour le placer à l'origine du potentiel extérieur $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ en translatant la tige entière. Dans cette position, les conditions initiales sont en situation d'attente, prêtes à être minimisées quand nous déciderons d'imposer un confinement $\Lambda > 0$. Un exemple de configurations initiales typiques que nous avons utilisé est présenté sur la figure 4.2.

4.2.5 La question des auto-intersections

Pour les taux de compaction que nous souhaitons étudier, des parties de la tige initialement éloignées vont inévitablement se retrouver très proches les unes des autres et créer des auto-intersections lors de l'étape de minimisation. Typiquement, le temps de calcul pour déterminer la présence d'une auto-intersection sur une tige discrétisée en N segments grandit comme $O(N^2)$ car il faut tester chaque paire de segments. Nous avons mis en place deux astuces géométriques pour tenter de réduire ce temps de calcul.

Intersection entre deux segments Comment détecter une intersection entre deux segments ? La technique la plus directe consiste à prolonger chaque segment selon une droite jusqu'à ce que ces deux droites finissent par se croiser. Une fois la position $\{x_{\text{int}}, y_{\text{int}}\}$ de ce point calculée, il suffit de vérifier si ce point est contenu dans au moins l'un des deux segments, auquel cas les deux segments se croisent. Il s'agit pourtant d'un test qui demande plusieurs opérations numériques ce qui multiplie le risque d'erreurs. C'est pourquoi nous n'avons pas utilisé un test de ce type mais un test géométrique plus simple issu de la géométrie algorithmique [101].

Considérons trois points $\psi_1 = (x_1, y_1)$, $\psi_2 = (x_2, y_2)$ et $\psi_3 = (x_3, y_3)$ donnés dans cet ordre (voir figure 4.3). Ces points sont dans le sens trigonométrique si la pente de la

ligne $\overleftarrow{\psi_1\psi_2}$ est plus petite que la pente de la ligne $\overleftarrow{\psi_1\psi_3}$, c'est à dire :

$$\text{sens trigonométrique} \iff (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1) > 0.$$

Si l'inégalité est inversée alors le triplet est orienté dans le sens anti-trigonométrique. Ce test est donc équivalent à un test sur le signe du déterminant $\Delta(\psi_1, \psi_2, \psi_3)$:

$$\Delta(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix}.$$

Le signe de $\Delta(\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ nous renseigne alors sur l'orientation relative des trois points puisqu'il correspond à la direction du produit vectoriel entre $\overrightarrow{\psi_1\psi_2}$ et $\overrightarrow{\psi_1\psi_3}$. On peut formaliser ce test en définissant la fonction booléenne :

$$\Omega(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = \text{sgn}[\Delta(\psi_1, \psi_2, \psi_3)] = \begin{cases} +1 & \text{“trigonométrique”} \\ -1 & \text{“anti-trigonométrique”} \end{cases}$$

Le cas $\Delta(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = 0$ correspond à une dégénérescence qui se présente quand les 3 points sont exactement alignés. En utilisant une précision numérique “double”, ce cas de figure ne s'est jamais présenté et ne nous a donc pas posé de problème en pratique. Nous allons maintenant utiliser cette fonction Ω pour déterminer si deux segments se croisent.

Considérons quatre points $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4\}$. Les segments $\overrightarrow{\psi_1\psi_2}$ et $\overrightarrow{\psi_3\psi_4}$ ne peuvent se croiser que si les deux conditions suivantes sont simultanément satisfaites :

- les extrémités ψ_1 et ψ_2 sont situés de cotés opposés de la ligne $\overleftarrow{\psi_3\psi_4}$,
- les extrémités ψ_3 et ψ_4 sont situés de cotés opposés de la ligne $\overleftarrow{\psi_1\psi_2}$.

Il suffit alors de remarquer que les points ψ_1 et ψ_2 se trouvent de côtés opposés de la ligne $\overleftarrow{\psi_3\psi_4}$ si et seulement si les triplets $\{\psi_3, \psi_4, \psi_1\}$ et $\{\psi_3, \psi_4, \psi_2\}$ sont dans des orientations différentes. En utilisant les symétries par permutation du déterminant, on peut ré-écrire cette condition sous forme d'une proposition logique :

$$[\Omega(\psi_1, \psi_3, \psi_4) \neq \Omega(\psi_2, \psi_3, \psi_4)] = \begin{cases} 1 & \text{vrai} \implies \psi_1 \text{ et } \psi_2 \text{ sont de côtés} \\ & \text{opposés de la ligne } \overleftarrow{\psi_3\psi_4} \\ 0 & \text{faux} \end{cases}$$

Décider du statut de deux segments (intersection ou pas d'intersection) entre deux segments se ramène donc à :

```

Intersection_( $\psi_1, \psi_2; \psi_3, \psi_4$ )
If {
  [ $\Omega(\psi_1, \psi_3, \psi_4) \neq \Omega(\psi_2, \psi_3, \psi_4)$ ]  $\wedge$  [ $\Omega(\psi_1, \psi_2, \psi_3) \neq \Omega(\psi_2, \psi_3, \psi_4)$ ] = 1
  Print « Il y a intersection » }
Otherwise : Pas d'intersection

```

Le symbole \wedge représente l'opérateur booléen “ET” dont la table de vérité est simplement :

$$0 \wedge 0 = 0, \quad 0 \wedge 1 = 1 \wedge 0 = 0, \quad 1 \wedge 1 = 1.$$

Cette méthode peut paraître un peu académique mais elle permet de se ramener à une suite d'opérations de pure logique permettant de minimiser le risque d'erreurs numériques. Comme la détection d'intersection est un point central et délicat de l'expérience numérique, il était important de se munir d'une technique robuste.

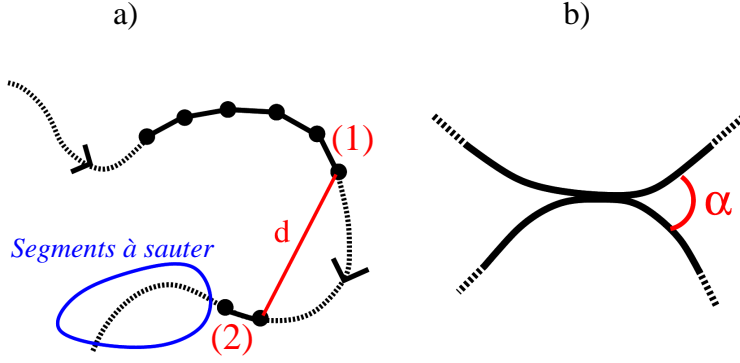


FIG. 4.4 – **a)** Illustration de l’astuce géométrique permettant de sauter $n = dL/N$ segments. **b)** Définition de l’angle α dans une zone d’auto-contact.

Réduction du nombre de tests Maintenant que nous disposons d’un test fiable pour déterminer si des segments se croisent, prenons deux segments (1) et (2) au hasard le long de la tige. Supposons que le test précédent indique que ces deux segments ne se croisent pas. Notons d la distance minimale entre (1) et (2) (figure 4.4 **a**). Puisque les segments constituant la tige discrétisée sont tous connectés les uns aux autres sous forme d’une chaînette, il est évident que même si tous les segments après (2) revenaient tout droit vers (1), il y a un nombre $n = dL/N$ de segments qui sont géométriquement trop loin pour pouvoir croiser (1). On peut donc sauter n segments à partir de (2) et recommencer un nouveau test d’intersection beaucoup plus loin le long de la tige sans avoir raté une auto-intersection. Bien que cette astuce ne change pas la croissance en $O(N^2)$ de la procédure, nous avons vu qu’elle permet, en pratique, des détections non seulement beaucoup plus rapides que le test “brute force” mais aussi du même niveau que des algorithmes plus complexes de type “sweep-line” [101] dont le temps de calcul grandit comme $O(N \log N)$. Nous utiliserons $N = 300$ par la suite ce qui permet de résoudre des longueurs minimales $\approx 0.003L$.

4.2.6 Minimisation de l’énergie

Nous disposons maintenant de tous les outils nécessaires pour déclencher la procédure de confinement de la tige. Nous avons choisi d’augmenter brusquement Λ en partant de 0 (configurations initiales) pour aller directement à une valeur $\Lambda_{\text{final}} > 0$. Cette procédure est analogue à une trempe (“quenching”) d’un état libre vers un état confiné. Pour des raisons pratiques, le choix de Λ_{final} est assez restreint. D’une part, nous voulons que les tiges se replient suffisamment pour former des motifs complexes : cette condition exclue des valeurs plus petites que, typiquement, $\Lambda_{\text{final}} \approx 10^4$. D’autre part, nous ne pouvons pas choisir des valeurs trop grandes sans risquer de fausser les résultats en introduisant des effets de taille finie dûs à la discrétisation de la tige. En pratique, nous avons travaillé principalement avec $\Lambda_{\text{final}} = 7 \times 10^5$.

Il existe une deuxième possibilité d’initier le confinement. Nous pourrions passer continûment et très doucement de $\Lambda = 0$ à Λ_{final} (“annealing”). Dans ce cas, on

s’attend à ce que les configurations initiales convergent toutes vers l’état fondamental et cette procédure ne permet pas d’explorer un grand nombre de minima locaux du paysage énergétique. C’est effectivement ce que nous avons vérifié. Cependant, nous préférons reporter cette discussion à la conclusion où nous reviendrons en détail sur les propriétés de l’état fondamental.

Une fois une valeur Λ_{final} sélectionnée, la question d’explorer le paysage énergétique de la fonctionnelle (4.8) se réduit à un problème d’optimisation dans un espace à $N = 300$ dimensions. À cause des discontinuités introduites par la contrainte d’auto-évitement, la recherche de minima, mêmes locaux, est toujours un problème difficile car on ne peut pas utiliser les techniques traditionnelles telle que la méthode du gradient conjugué. Nous avons trouvé que, dans notre cas, l’algorithme de Powell était relativement bien adapté [102]. L’ensemble des directions de recherche est adaptatif : il s’optimise dynamiquement de manière à favoriser une convergence plus rapide en générant un ensemble de directions conjuguées. Dès qu’un minimum local a été localisé, nous ré-exécutons 10 fois la procédure de minimisation de manière à s’assurer de la robustesse du minimum et à affiner sa précision numérique. Aussi, dans le souci de maximiser nos chances d’explorer des minima très différents, nous ré-initialisons régulièrement les directions de recherche en les remplaçant par des directions aléatoires.

Nous avons vu dans la section précédente que si nous détectons la présence d’une auto-intersection, l’énergie de la configuration correspondante est fixée à un nombre arbitrairement grand. Cette solution est alors naturellement rejetée par l’algorithme de minimisation qui poursuit sa route dans une autre direction. Cependant, la présence de zones d’auto-contact fait apparaître une nouvelle complication. En effet, le potentiel de confinement étant central, il arrive qu’une partie de la tige tente de se rapprocher de $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ mais se retrouve coincée derrière une autre partie, plus proche, qui lui bloque le chemin (“*stiff modes*”). La sévérité de ce problème dépend de l’intensité du confinement et donc de l’exposant utilisé. Cela explique, *a posteriori*, notre décision de modéliser le confinement par un potentiel quadratique $\propto \mathbf{R}^2$, c’est à dire relativement “mou”. Si l’on essaye de rendre le potentiel plus “dur” en augmentant l’exposant, la situation devient de plus en plus critique et nous nous retrouvons face à de nouvelles instabilités numériques. Cela est dû au fait que la procédure de minimisation va toujours tenter de minimiser l’énergie totale de la tige en rapprochant la partie coincée du centre et, ce faisant, rentre dans une boucle ne générant que des configurations auto-intersectantes. L’algorithme ne peut plus sortir de cette boucle et devient sujet à des instabilités (erreurs d’arrondi par exemple...) qui mettent en péril la suite de la minimisation. Nous avons remédié à ce problème en proposant un traitement phénoménologique des zones d’auto-contact. Une détermination “microscopique” des forces de friction est, toutefois, en contradiction avec notre approche basée sur une formulation énergétique. Nous avons donc décidé de modéliser les interactions dans les zones de contact par une énergie “nématique” de la forme $E_{\text{auto-contact}} = u \sin^2 \alpha$ où u est un paramètre sans dimension et α est l’angle entre deux segments qui se touchent (figure 4.4 **b**). Nous avons choisi u dans une fenêtre entre 50 et 150. Toutefois, dans le régime de confinement atteignable numériquement, la valeur précise de u ne semble pas avoir d’importance sur la forme des configurations obtenues. Nous retrouverons et justifierons cette interaction géométrique dans le chapitre suivant.

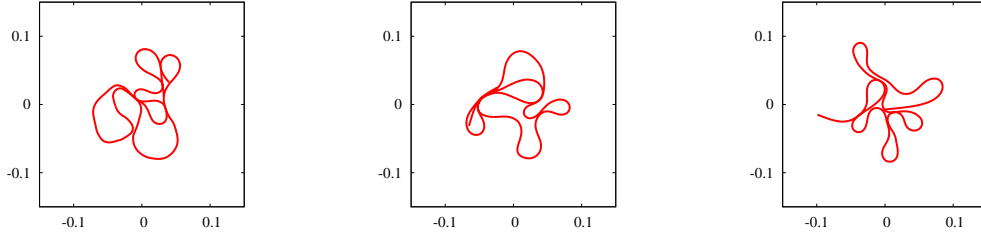


FIG. 4.5 – Illustration de quelques configurations correspondant à des minima locaux de l'énergie pour $\Lambda = 7 \times 10^5$ et $D = 700$.

Dans la situation présente, $E_{\text{auto-contact}}$ joue le rôle d'une force de frottement "effective" permettant de déstabiliser les configurations bloquées en les aidant à s'auto-aligner localement. Cette contribution n'est incluse que 2 fois parmi les 10 minimisations effectuées et sa forme précise est oubliée lors des autres minimisations.

4.3 Analyse statistique des configurations

Une fois menée à bout, cette expérience numérique permet d'obtenir des configurations correspondant à des minima locaux de la fonctionnelle d'énergie (4.8). Malgré les astuces géométriques de la section 4.2.5 permettant une simplification de la détection d'auto-intersections, la procédure entière reste lourde puisqu'il faut compter plusieurs heures de calcul pour trouver une configuration acceptable. (La majorité des calculs numériques a été effectuée sur un ordinateur iMac Intel Core 2 Duo 2,66 GHz.) Une illustration des configurations obtenues est présentée sur la figure 4.5. Une rapide inspection visuelle montre déjà que nous avons bien atteint notre objectif : les configurations sont bien plus complexes que celles présentées dans le chapitre précédent mais elles sont aussi assez différentes les unes des autres. Remarquons qu'elles sont nettement moins compactes que les configurations typiquement obtenues dans l'expérience décrite dans la première section de ce chapitre (comparer figure 4.1 et figure 4.5). Pour les raisons expliquées dans la section 4.2.6, nous avons principalement axé nos simulations sur les configurations correspondants au jeu de paramètres $\{\Lambda_{\text{final}} = 7 \times 10^5, D = 700\}$, pour lequel nous avons obtenu 252 configurations indépendantes.

Nous avons vu dans la section 1.3.3 que la plupart des travaux portant sur le confinement de surfaces (boulettes de papier froissé par exemple) font appel à une description statistique des propriétés des plis, c'est à dire en termes de fonctions de densité de probabilité. Grâce aux configurations produites par l'expérience numérique, nous sommes en mesure d'engager ce type d'analyse dans le cas d'une tige élastique confinée en 2D. Dans la suite nous abrègerons "fonction de densité de probabilité" par la notation PDF pour "*Probability Density Function*". Que faut-il mesurer maintenant ? Nous allons commencer par quelques mesures globales pour s'assurer de la bonne convergence des simulations avant de nous intéresser à une sous-structure particulière suggérée par les résultats du chapitre 3.

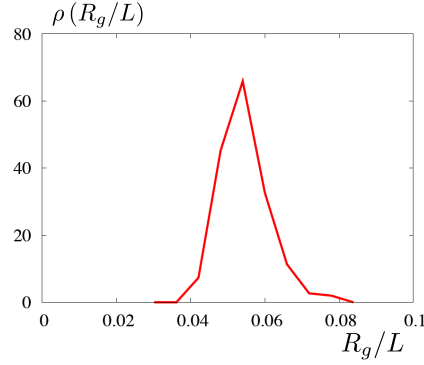


FIG. 4.6 – Densité de probabilité du rayon de gyration R_g adimensionné par la longueur L des tiges.

4.3.1 Premières observations

Rayon de gyration Commençons par regarder la PDF du rayon de gyration, R_g , des configurations. Cette quantité donne une approximation de la taille linéaire caractéristique accessible aux configurations et est définie par l'équation (4.2). En variable adimensionnée (cf section 4.2.3), cela donne :

$$\frac{R_g}{L} = \sqrt{\int_0^1 \tilde{\mathbf{R}}^2 d\tilde{s}}.$$

Le figure 4.6 représente la PDF de R_g/L moyennée sur les 252 configurations. On voit qu'elle est fortement piquée autour de $R_g \approx 0.058L$. Cette valeur peut s'expliquer en utilisant le seuil de flambage de la tige. En effet, on peut ré-écrire l'équation (4.5) sous forme adimensionnée et injecter $\Lambda = 7 \times 10^5$ pour obtenir :

$$\frac{\ell_{\text{critique}}}{L} = \frac{1.8}{\Lambda^{1/4}} \approx 0.062.$$

Cette valeur théorique, compatible avec la taille linéaire moyenne observée numériquement, signifie que les configurations initiales ont réagi de manière appropriée lors de la procédure numérique visant à les confiner.

Distribution de la courbure locale Regardons maintenant la distribution de la courbure locale $\tilde{\kappa}(\tilde{s})$ le long des configurations. La figure 4.7 montre que la PDF de $\tilde{\kappa}$ est très bien décrite par une loi normale de moyenne $\mu = 0$ et de variance $\sigma_{\text{final}}^2 = 2210$:

$$\rho(\tilde{\kappa}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\tilde{\kappa}^2}{2\sigma_{\text{final}}^2}\right).$$

Ceci n'est pas une surprise puisque nous avons préalablement construit les configurations initiales en imposant un bruit blanc sur leur courbure. Après l'étape de minimisation, les courbures locales restent complètement décorréelées mais la variance de leur distribution s'est élargie pour aller de $\sigma_{\text{initial}}^2 = 2D = 1400$ (configurations initiales) à $\sigma_{\text{final}}^2 = 2210$ pour les configurations confinées.

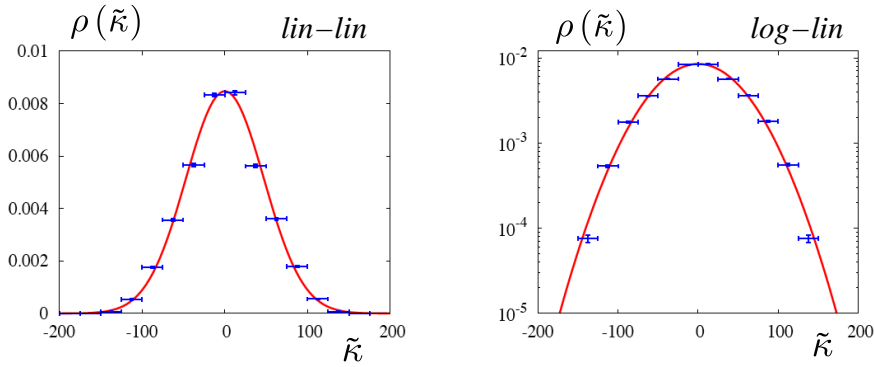


FIG. 4.7 – Densité de probabilité de $\tilde{\kappa}$. Les paramètres de la loi normale (ligne rouge) sont directement fixés par les données numériques et ne sont pas laissés comme paramètres libres.

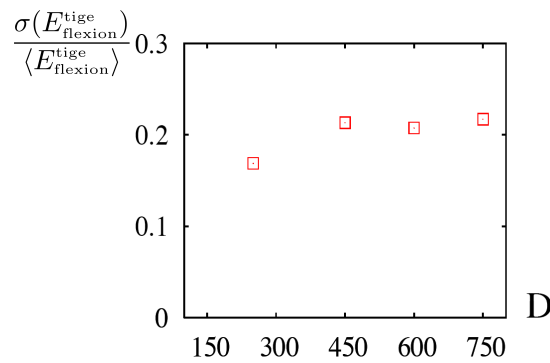


FIG. 4.8 – Rapport entre la variation standard de l'énergie de flexion des tiges entières $\sigma(E_{flexion}^{tige})$ et leur valeur moyenne $\langle E_{flexion}^{tige} \rangle$ montrant la faible importance de l'intensité D du bruit.

Influence de l'intensité du bruit initial De manière à connaître l'influence de l'intensité D du bruit introduit dans les configurations initiales, nous avons recommencé le même type d'expériences, toujours pour $\Lambda = 7 \times 10^5$, mais en faisant varier D . Chaque point de la figure 4.8 représente une moyenne sur plus de 150 configurations du rapport entre la variation standard et la moyenne de l'énergie de flexion des configurations. On voit que les résultats ne dépendent que très faiblement de D . Cet "oubli" du détail des conditions initiales est assez fréquent quand un système physique est brusquement forcé vers un nouvel état sans avoir le temps de relaxer ("*quenching*"). C'est exactement comme cela que la procédure numérique agit puisque nous augmentons de manière discontinue le paramètre de contrôle Λ .

4.3.2 L'élément "branche"

Après ces observations générales, nous allons porter notre attention sur une quantité plus précise. Pour commencer, choisissons une configuration que l'on souhaite analyser (figure 4.9 **a**). L'idée est alors de découper cette configuration en un ensemble de "branches" délimitées par des points de raccords annonçant l'initiation ou la perte d'une zone

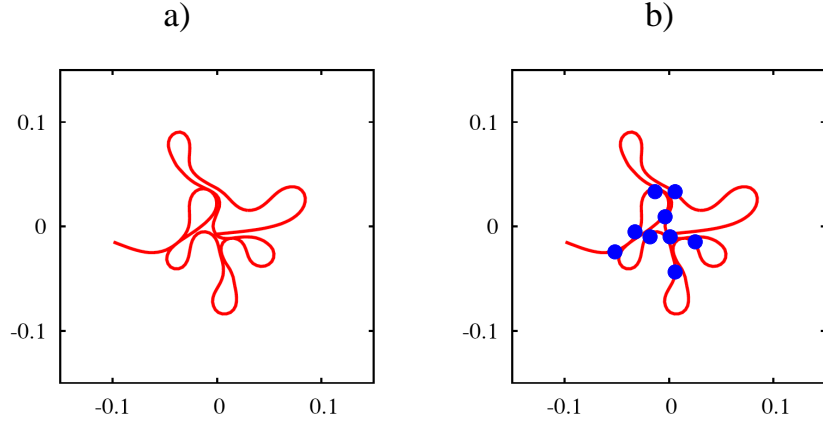


FIG. 4.9 – **a)** Exemple typique d'une configuration à analyser. **b)** Les points bleus marquent les points de raccords permettant de délimiter les branches, constituants élémentaires des tiges repliées.

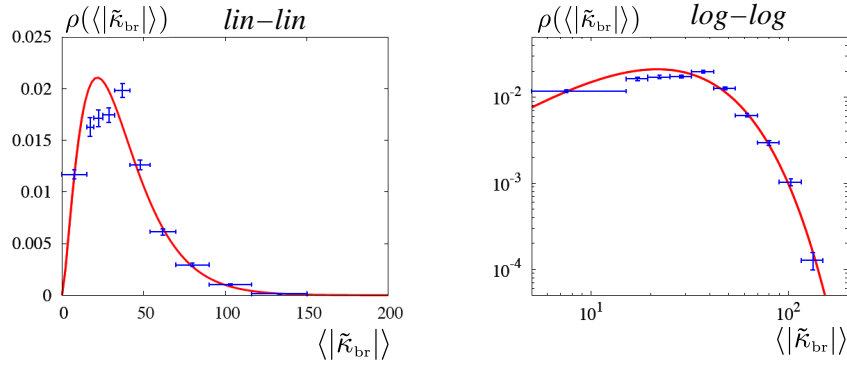


FIG. 4.10 – Densité de probabilité de $|\tilde{\kappa}_{br}(s)|$. Les points bleus correspondent à un histogramme conçu à partir des 4676 branches. La ligne rouge continue correspond à un ajustement par une loi Γ dont les 2 paramètres sont fixés par les données numériques elle-mêmes.

d'auto-contact (voir figure 4.9 **b** pour une illustration). Cette découpe des configurations est tout à fait similaire à celle que nous avons employée dans le chapitre 3. Les résultats de ce chapitre avaient montré que l'ensemble des propriétés de la tige pouvait se ramener à l'étude de ces éléments fondamentaux issus du découpage. Nous allons donc nous concentrer sur les propriétés statistiques des 4676 branches contenues dans nos 252 configurations.

Valeur absolue de la courbure moyenne des branches La figure 4.10 représente la PDF de $\langle |\tilde{\kappa}_{br}| \rangle = L \langle |\kappa_{br}(s)| \rangle$. Le signe $\langle \rangle$ représente une moyenne sur la longueur de la branche. Nous voyons que $\rho(\langle |\tilde{\kappa}_{br}| \rangle)$ est relativement bien décrite par une loi gamma :

$$\rho(\langle |\tilde{\kappa}_{br}| \rangle) = \frac{\langle |\tilde{\kappa}_{br}| \rangle^{\alpha-1} \exp(-\langle |\tilde{\kappa}_{br}| \rangle / \chi)}{\chi^\alpha \Gamma(\alpha)} \quad \{\alpha = 2.5, \chi = 14.8\},$$

où $\Gamma(\alpha)$ représente la fonction de gamma d'Euler. Notons que les paramètres α et χ ne

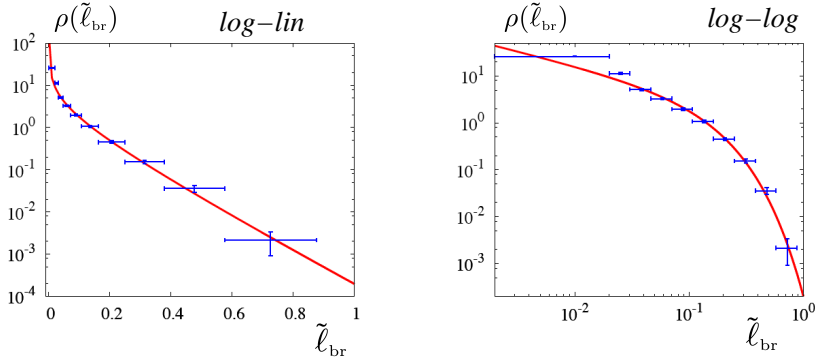


FIG. 4.11 – Densité de probabilité de $\tilde{\ell}_{\text{br}}$. Les paramètres de l’ajustement par une loi gamma (ligne rouge) sont donnés dans le texte.

sont pas libres puisque nous les déterminons directement à partir de la moyenne μ et de la variance σ^2 des données numériques :

$$\begin{aligned}\alpha &= \mu^2/\sigma^2, \\ \chi &= \sigma^2/\mu.\end{aligned}$$

(Par la suite, tous les paramètres entrant dans les PDF seront déterminés de la même manière.) Nous voyons que $\rho(\langle|\tilde{\kappa}_{\text{br}}|\rangle)$ présente un maximum autour de $\langle|\tilde{\kappa}_{\text{br}}|\rangle \approx 30$. Il est possible de comprendre l’origine de cette valeur en faisant appel au rayon de gyration des configurations. En effet, nous avons vu que $\rho(R_g)$ est piqué autour de $R_g \approx 0.058L$ (figure 4.6). La courbure correspondante est donc $1/R_g$ ce qui donne à peu près 17. On retrouve donc le bon ordre de grandeur ce qui suggère que les branches loin du centre ressentent le potentiel de confinement plus fort et, pour s’adapter, adoptent une courbure compatible avec R_g . Cependant, cet argument ne donne qu’un ordre de grandeur car le potentiel quadratique n’impose pas de murs durs mais un confinement beaucoup plus mou.

Longueur des branches Regardons maintenant les propriétés statistiques de la longueur ℓ_{br} des branches. La figure 4.11 montre que la densité de probabilité de $\tilde{\ell}_{\text{br}} = \ell_{\text{br}}/L$ suit une loi gamma :

$$\rho(\tilde{\ell}_{\text{br}}) = \frac{\tilde{\ell}_{\text{br}}^{\alpha-1} \exp(-\tilde{\ell}_{\text{br}}/\chi)}{\chi^\alpha \Gamma(\alpha)} \quad \{\alpha = 0.4, \chi = 0.12\}.$$

Une distribution purement exponentielle, c’est à dire $\alpha = 1$, aurait tendance à suggérer une fragmentation aléatoire des branches (appendice 7.2). Cependant, nous trouvons que ce paramètre est $\alpha = 0.4 < 1$: il y a une sur-représentation de branches de petites longueurs. En fait, le nombre de branches telles que $\ell_{\text{br}} \ll L$, diverge selon une loi de puissance (la distribution restant quant même intégrable). Comme expliqué dans l’appendice 7.2, l’exposant α mesure le nombre de sous-systèmes se subdivisant de manière aléatoire qui sont en interaction. Toutefois, comme α est non seulement inférieur à 1 mais aussi non-entier, il n’est pas évident de donner une interprétation physique à ce résultat.

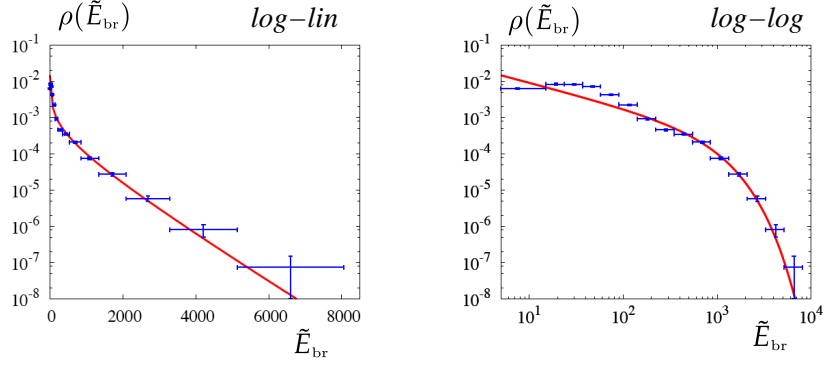


FIG. 4.12 – Densité de probabilité de l'énergie des branches. L'ajustement par une loi gamma (ligne rouge) révèle une large décroissance exponentielle accompagnée par une divergence intégrable en loi d'échelle pour les petites énergies.

Il est possible que ces étranges corrélations soient spécifiques aux détails de l'expérience numérique comme le choix d'un potentiel de confinement quadratique ou la procédure de “quenching” pour obtenir les configurations finales.

Énergie des branches L'énergie des branches est donnée par la somme de leur énergie de flexion et de leur énergie de confinement. Sous forme adimensionnée, l'énergie totale d'une branche s'écrit (cf équation 4.7) :

$$\tilde{E}_{\text{br}} = \int_{\text{branche}} \left(\frac{d\theta}{d\tilde{s}} \right)^2 d\tilde{s} + \Lambda \int_{\text{branche}} \tilde{\mathbf{R}}^2 d\tilde{s}.$$

La PDF de \tilde{E}_{br} (figure 4.12) montre que l'énergie des branches est très bien décrite par une loi gamma :

$$\rho(\tilde{E}_{\text{br}}) = \frac{\tilde{E}_{\text{br}}^{\alpha-1} \exp(-\tilde{E}_{\text{br}}/\chi)}{\chi^\alpha \Gamma(\alpha)} \quad \{\alpha = 0.31, \chi = 728\}. \quad (4.9)$$

Cela signifie que la densité de probabilité de l'énergie des branches suit, sur une très grande plage, une décroissance quasi-exponentielle. Il s'agit du résultat principal de ce chapitre. Le but de l'expérience numérique était d'explorer le paysage énergétique d'une tige confinée. Nous venons juste de voir que ce paysage est non seulement structuré, mais son spectre suit également une décroissance exponentielle qui ne va pas sans rappeler la distribution de Boltzmann que nous avons vue dans la section 2.1.3. D'autre part, $\rho(\tilde{E}_{\text{br}})$ présente aussi une divergence pour les petites énergies puisque le paramètre α est inférieur à 1. Nous reviendrons sur cette observation dans la conclusion. Cependant, avant de tirer des conclusions trop hâtives, il est temps de comparer nos résultats numériques à ceux des expériences de compaction de tiges décrites dans la section 4.1.

4.4 Comparaison avec l'expérience associée - Bilan

Les résultats de l'analyse statistique des propriétés des configurations issues de l'expérience décrite dans la section 4.1 sont présentés dans [100]. Nous ne nous concentrerons

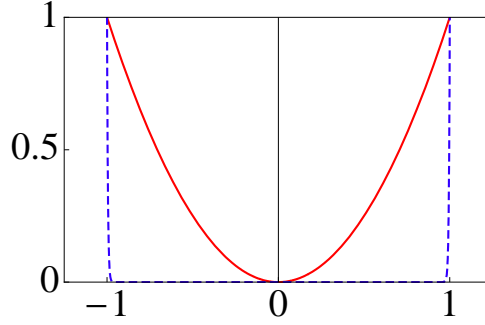


FIG. 4.13 – *Différence dans la nature du confinement entre les simulations numériques et les expériences. Le potentiel parabolique utilisé lors des simulations est représenté en rouge (ligne continue) tandis que le potentiel à murs durs des expériences de la section 4.1 correspond à la ligne bleue (ligne brisée).*

que sur quelques aspects de ces résultats pour les comparer avec nos simulations numériques. Tout d’abord, il convient de remarquer que les simulations numériques et ces expériences de compaction présentent de nombreuses différences. Notons, entre autres :

- **Nature du confinement.** Nous modélisons la contrainte de confinement en plongeant les tiges dans un potentiel quadratique attractif \mathbf{R}^2 dans les simulations numériques. Au contraire, le confinement se fait par l’intermédiaire de murs durs dans l’expérience de compaction. Cela correspondrait à un potentiel du type \mathbf{R}^a avec $a \rightarrow +\infty$ (figure 4.13).
- **Topologie de la tige.** Les simulations numériques considèrent des tiges ouvertes tandis que la géométrie des expériences fait que ce sont toujours des tiges fermées qui sont confinées (figure 4.1 a).
- **Intensité du confinement.** Nous pouvons estimer l’intensité du confinement en faisant appel au paramètre ε que nous avons introduit dans le chapitre précédent, voir équation 3.3. Bien que le rayon de gyration R_g ne soit qu’une sous-estimation du vrai rayon accessible par la tige, nous pouvons ré-écrire l’équation 3.3 en remplaçant le rayon b du trou par R_g pour obtenir :

$$\varepsilon \approx \frac{L/2\pi - R_g}{R_g} \approx \frac{1/2\pi - 0.06}{0.06} \approx 1.7 \quad (4.10)$$

La même estimation dans le cas des expériences donne typiquement $\varepsilon \approx 15$. Cette différence peut se percevoir en comparant visuellement les figures 4.1 a et 4.2.

À cause de ces différences, les quantités géométriques n’ont pas exactement les mêmes propriétés statistiques dans les simulations numériques et dans l’expérience associée :

- **Longueur des branches.** La longueur des branches est très bien décrite par une distribution exponentielle dans les expériences alors que nous avons trouvé une accumulation de petites branches donnant lieu à une distribution gamma dans les simulations numériques (section 4.3.2). Pour les expériences, cette distribution exponentielle suggère une simple fragmentation aléatoire des branches au fur et à mesure que le confinement augmente (appendice 7.2).

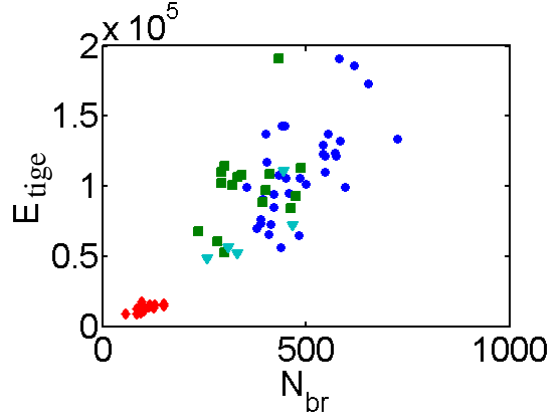


FIG. 4.14 – Illustration de l’énergie entière des tiges E_{tige} en fonction du nombre de branches N_{br} qu’elles contiennent. Les points rouges représentent les données numériques où, à cause du petit taux de confinement, il n’y a qu’une vingtaine de branches par configuration. Les autres points proviennent de l’expérience et montrent que les corrélations entre E_{tige} et N_{br} se précisent au fur et à mesure que N_{br} augmente.

- **Division en sous-systèmes.** La présence de murs durs (les bords du trou) dans l’expérience permet de définir deux sous-systèmes (nous renvoyons le lecteur à la référence [100] pour les détails). Le premier sous-système regroupe toutes les branches qui ont une de leurs extrémités en contact avec les bords du trou. Le reste des branches constitue le deuxième sous-système. La valeur absolue de la courbure des branches du premier sous-système est imposée par le contact avec les bords et est donc fortement piquée sur $1/b$, l’inverse du rayon du trou (voir figure 4.1). La valeur absolue de la courbure des branches du deuxième sous-système est, quant à elle, bien décrite par une loi gamma. Cela signifie que nos simulations numériques créent des configurations plus proches de celles du deuxième sous-système de l’expérience, mais aussi que nous ne pouvons pas faire de distinction aussi claire entre deux sous-systèmes.

Les branches vues comme des “particules” élémentaires En dépit de ces nombreuses différences géométriques, il est frappant de remarquer que nous retrouvons exactement le même comportement dans les simulations numériques ainsi que dans les expériences en ce qui concerne les propriétés de l’énergie des branches. Dans les deux cas, les PDF de E_{br} sont parfaitement distribuées selon une loi gamma de paramètre $\alpha < 1$. La distribution $\rho(E_{br})$ contient donc une large décroissance exponentielle accompagnée par une divergence en loi de puissance pour les petites énergies (voir figure 4.12 pour les simulations numériques et [100] pour les expériences). Cette observation est d’autant plus intéressante que l’énergie des branches dans les simulations numériques est composée du terme lié au confinement en plus de celui de flexion (cf équation (4.7)) alors que E_{br} ne possède qu’une énergie de flexion dans les expériences.

Nous reviendrons sur les implications de la présence d’une divergence pour les petites énergies dans la conclusion pour nous concentrer, pour l’instant, sur la région de décroissance exponentielle qui occupe une fenêtre beaucoup plus large des PDF (figure 4.12).

Nous avons vu dans le chapitre 3 que les branches sont les éléments fondamentaux des configurations : elles portent toutes les informations géométriques et mécaniques permettant de reconstruire les configurations entières en joignant les branches par l’intermédiaire de points de raccords où ont lieu les interactions inter-branches. L’exploration du paysage énergétique menée dans ce chapitre vient de montrer qu’en plus d’être les éléments “microscopiques” de base, l’énergie des branches suit une distribution très proche de la distribution de Boltzmann (cf section 2.1.3). Ce résultat est robuste puisque nous le retrouvons dans deux systèmes *a priori* assez différents : simulations numériques et expériences. Cela suggère que les seuls ingrédients physiques importants, communs aux deux systèmes, sont l’élasticité des tiges, l’auto-évitement et le confinement. Nous remarquons aussi que cette distribution quasi-Boltzmann de l’énergie des branches apparaît de manière précoce puisque le taux de confinement des simulations numériques est à peine plus grand que ceux étudiés lors du chapitre 3 (cf équation (4.10)). Tous ces éléments suggèrent que les branches se comportent comme les “particules élémentaires” des configurations et que leur énergie est la variable importante. La figure 4.14 montre d’ailleurs que l’énergie totale de la tige E_{tige} est directement corrélée au nombre de branches N_{br} présent dans une configuration :

$$E_{\text{tige}} \approx N_{\text{br}} e_{\text{br}},$$

où e_{br} est la moyenne de l’énergie des branches issue de la PDF, cf équation (4.9). Cette corrélation linéaire n’est pas évidente car elle suppose que l’énergie d’une branche est indépendante de l’énergie de ses voisines. Toutefois les corrélations entre E_{tige} et N_{br} semblent s’accroître au fur et à mesure que N_{br} augmente ce qui est consistant avec une limite “thermodynamique” (cf section 2.1.3) et confirme le rôle essentiel des branches. Le paramètre χ contrôlant le taux de décroissance de l’exponentielle dans la distribution $\rho(E_{\text{br}})$ (équation (4.9)) joue alors le rôle d’énergie caractéristique analogue à une température. Comme nous l’avons vu dans la section 2.2, la tige confinée est un bon exemple de système athermique ce qui signifie que cette température n’a rien à voir avec kT mais ressemble plus à une température “effective” comme dans la théorie d’Edwards des milieux granulaires.

Une théorie statistique

Motivations Le chapitre précédent montre que le paysage énergétique d'une tige confinée est pondéré par une mesure statistique ressemblant à un facteur de Boltzmann. Cela signifie qu'il existe une température "effective", sous-jacente, qui permet d'explorer l'espace des phases comme si le système se trouvait dans un état d'équilibre. Il s'agit cependant d'une échelle d'énergie macroscopique qui n'a rien à voir avec l'énergie thermique habituelle car :

$$k_B T \approx 10^{-23} \text{ J}$$

est complètement négligeable vis à vis des autres échelles d'énergie mises en jeu. Ce chapitre est donc consacré au développement d'une théorie statistique des champs pour étudier le comportement d'une tige élastique confinée dans un espace à 2D. Le but est d'obtenir une théorie ne se basant que sur les ingrédients fondamentaux discutés précédemment (élasticité, auto-évitement et confinement) mais qui permet, au moins qualitativement, de comprendre le comportement général, c'est à dire à la fois géométrique et mécanique, de la tige confinée.

5.1 Introduction

La théorie que nous allons développer dans ce chapitre s'inspire des travaux pionniers de Sir Edwards sur les poudres granulaires et les verres polymériques, sujets que nous avons introduits dans la section 2.2 lors de la présentation des systèmes athermiques. Ces travaux, couplés aux résultats du chapitre précédent, montrent qu'il est possible d'utiliser les outils de la physique statistique traditionnelle pour décrire des systèmes macroscopiques, mais complexes, tels que le problème d'une tige élastique confinée. L'énergie caractéristique extérieure qui permet d'explorer l'espace des phases peut être due à une agitation mécanique, comme dans les expériences de vibration décrites dans la section 1.3.4, ou à une énergie interne auto-sélectionnée comme dans le chapitre précédent. Dans ce cas, la quantité importante est la fonction de partition Z du système. L'équation (2.16) montre que Z s'écrit :

$$Z = \exp\left(-\frac{F}{\Omega}\right), \quad (5.1)$$

où F est l'énergie libre de la tige. Par la suite nous utiliserons l'énergie libre Y adimensionnée par l'énergie caractéristique macroscopique Ω :

$$Y = \frac{F}{\Omega}. \quad (5.2)$$

Étant donné que tous les résultats que nous avons obtenus grâce à cette théorie des champs sont déjà présentés dans la publication reproduite à la fin du chapitre, nous avons préféré nous concentrer sur l'explication de l'origine de tous les ingrédients inclus dans notre modèle. Nous allons aussi montrer comment évaluer la fonction de partition mais les résultats qui en découlent ne seront que brièvement résumés dans la section 5.4 et nous renvoyons le lecteur à l'article original pour tous les détails.

5.2 Ingrédients minimaux

5.2.1 Représentation en abscisse curviligne

Comme dans les chapitres précédents, nous noterons $\mathbf{R}(s) \in \mathbb{R}^2$ le vecteur représentant la position de la tige à l'abscisse curviligne s . Les dérivées par rapport à l'abscisse curviligne sont notées avec un prime ($'$). Un des grands avantages de cette paramétrisation est l'identité suivante (cf équation 2.19) :

$$\mathbf{R}'^2(s) \equiv 1. \quad (5.3)$$

En plus d'énoncer l'inextensibilité de la tige, cette contrainte nous sera très utile dans la section suivante.

5.2.2 Flexion

Comme dans la physique des polymères, nous noterons l'énergie de flexion de la tige :

$$Y_{\text{flex}} = \frac{\varepsilon}{2} \int \mathbf{R}''^2(s) ds. \quad (5.4)$$

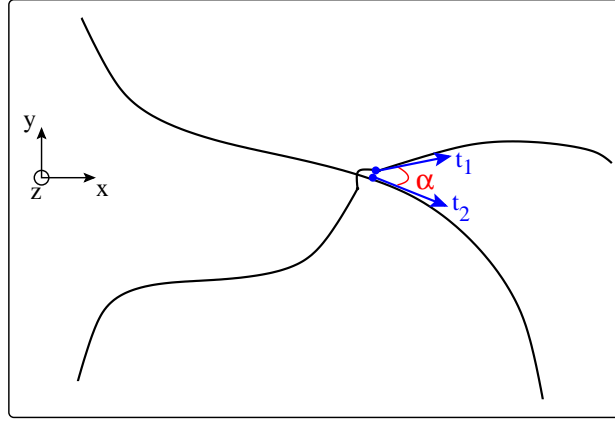


FIG. 5.1 – Définition de l’angle d’attaque α dans le cas où deux parties de la tige se chevauchent.

Cette expression est tout à fait similaire à l’énergie de flexion classique d’une tige élastique. Il y a, cependant, une petite différence du point de vue du préfacteur ε . Puisque Y_{flex} doit être un nombre pur, une simple analyse dimensionnelle montre que le préfacteur doit être une longueur et non plus un module de rigidité B . Cette longueur ε , plutôt associée à la physique des polymères, s’appelle la longueur de persistance. Rappelons brièvement sa signification physique pour voir que ε joue un rôle similaire au module de rigidité traditionnel dans les tiges élastiques. Considérons les vecteurs tangents $\mathbf{t}(s_1)$ et $\mathbf{t}(s_2)$ en deux points d’abscisses curvilignes s_1 et $s_2 = s_1 + \Delta s$ le long de la tige. Si Δs est *petit*, nous nous attendons à ce que $\mathbf{t}(s_1)$ et $\mathbf{t}(s_2)$ pointent approximativement dans la même direction. L’angle Θ entre les deux vecteurs sera donc proche de 0. Au contraire si Δs est *grand* les deux directions seront complètement décorréées et, en moyenne, $\Theta \approx \pi/2$. Dans le cas général, on peut montrer que les corrélations des directions des tangentes sont données par [103] :

$$\langle \cos \Theta(\Delta s) \rangle = \exp\left(-\frac{\Delta s}{\varepsilon}\right),$$

où la moyenne $\langle \cdot \rangle$ est prise pour toutes les paires de points qui sont séparés de Δs . La longueur de persistance, ε , apparaît donc comme la longueur caractéristique de décroissance de la fonction à deux points de l’orientation des vecteurs tangents à la tige. On voit que ε agit de la même manière qu’un module de flexion. Il est très facile de déformer un polymère sur des $\Delta s \gg \varepsilon$ mais beaucoup plus difficile dès que $\Delta s \approx \varepsilon$. (D’ailleurs, pour des polymères soumis à l’agitation thermique, les deux quantités sont simplement reliées par $B = kT\varepsilon$.) Dans notre cas, ε correspond au module de rigidité de la tige renormalisé par la température effective : $\varepsilon = B/\Omega$. L’expression (5.3.1) décrit donc bien l’énergie de flexion de la tige élastique et ε est une mesure de la résistance à la flexion.

5.2.3 Auto-évitement

La manière la plus élégante pour s’assurer que la tige ne peut pas développer d’auto-intersections serait d’utiliser un invariant topologique tel que le “*linking number*” [104]. Malheureusement, cette démarche est difficile à mettre en œuvre car elle fait intervenir

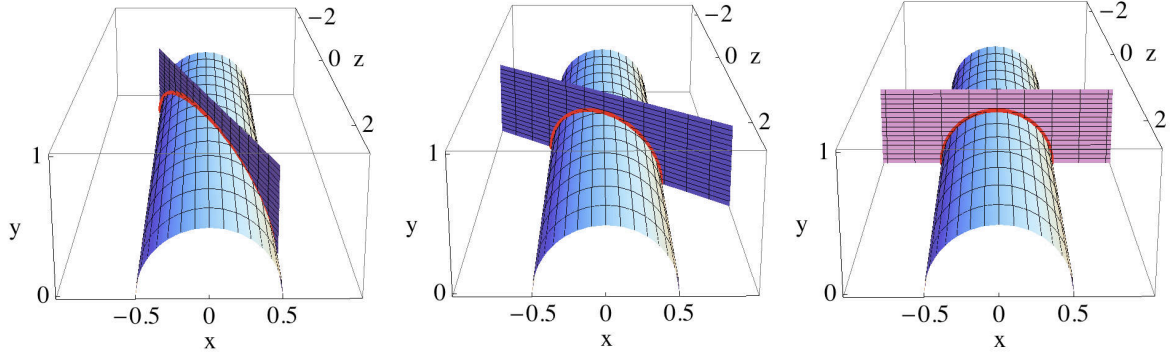


FIG. 5.2 – Représentation de l’intersection entre un cylindre (tige) et le plan. La ligne rouge correspond à l’ellipse. De gauche à droite, augmentation de l’angle d’attaque $\alpha = 15 \rightarrow 45 \rightarrow 90$. Dans le cas $\alpha = 0$, la solution elliptique dégénère en une ligne droite. Au contraire pour $\alpha = \pi/2$ elle devient un arc de cercle.

des interactions non-locales toujours délicates à négocier dans le cadre d’une théorie des champs et il semble trop difficile de chercher à complètement interdire les auto-intersections. Le problème est alors de trouver un mécanisme physique réaliste qui permet de pénaliser les auto-intersections tout en restant tractable analytiquement. Onsager a montré qu’il existe une pénalisation énergétique donnée par [105] :

$$Y_{\text{volume exclu}} \propto |\sin(\alpha)|, \quad (5.5)$$

lorsque deux parties d’un polymère se touchent selon un angle d’attaque α (figure 5.1). La présence de la valeur absolue dans cette expression reste toutefois difficile à manipuler et nous nous sommes penchés sur la question de trouver une formulation mieux adaptée à notre situation.

Nous modélisons la tige par un cylindre de section transverse de rayon h représentant l’épaisseur de la tige ($h \ll \varepsilon \ll L$). Supposons que la tige est libre de se croiser. L’idée est de minimiser la longueur de la partie de la tige qui, sortant du plan (i.e. $y \neq 0$), crée une auto-intersection. Dans ce cas, la forme du croisement peut être analysée comme l’intersection entre un cylindre et un plan pour lequel $y \neq 0$. La ligne d’intersection entre ces deux surfaces correspond à la forme de la section inférieure de la tige qui se trouve forcée de passer au dessus ou en dessous d’un autre morceau de tige (voir la ligne rouge sur la figure 5.2). Une fois que nous aurons déterminé la forme de cette ligne d’intersection, nous pourrons calculer son énergie de flexion :

$$Y_{\text{auto-évitement}} = \varepsilon \int_{\text{intersection}} \kappa^2 ds, \quad (5.6)$$

où κ est la courbure *hors du plan* de la ligne d’intersection. Commençons par regarder la figure 5.1 pour se faire une idée de deux cas limites que doit contenir l’équation (5.6). Si l’angle d’attaque $\alpha = 0$ alors, il n’y a pas d’intersection et la tige reste dans le plan. Cela signifie que $\kappa = 0$ et donc $Y_{\text{auto-évitement}}(\alpha = 0) = 0$. Au contraire, si $\alpha = \pi/2$, la tige se croise à angle droit et un des morceaux adopte une courbure $\kappa = 1/h$ hors du plan. Puisque la tige se déforme, au minimum, sur une longueur $ds \sim \varepsilon$, la formule (5.6) donne

la loi échelle suivante : $Y_{\text{auto-évitement}}(\alpha = \pi/2) \sim (\varepsilon/h)^2$. Pour déterminer la dépendance de l'énergie d'auto-évitement en fonction de l'angle α , il faut maintenant calculer la forme de la ligne d'intersection. Pour cela, il suffit de représenter une seule moitié du cylindre puisque la tige n'a que deux possibilités (haut ou bas) pour contourner l'autre morceau. Les équations paramétriques du demi-cylindre sont :

$$x = \frac{h}{2} \cos \theta, \quad y = \frac{h}{2} \sin \theta, \quad z = z,$$

avec $\theta \in [0, \pi]$ et $z \in \mathbb{R}$. Le plan est paramétré par :

$$x = \lambda \sin \alpha, \quad y = y, \quad z = \lambda \cos \alpha,$$

où α représente l'angle d'attaque et $\{\lambda, y\} \in \mathbb{R}^2$. Il suffit d'identifier chacune des composantes pour obtenir les coordonnées de l'ellipse décrivant l'intersection entre le cylindre et le plan :

$$x = \frac{h}{2} \cos \theta, \quad y = \frac{h}{2} \sin \theta, \quad z = \frac{h \cos \theta}{2 \tan \alpha}.$$

On peut ensuite effectuer une rotation d'angle α autour de l'axe (Oy) pour ramener l'ellipse dans un plan. Son équation explicite dans ce nouveau repère est donnée par :

$$y(x) = \frac{h}{2} \sqrt{1 - \frac{4 \sin^2 \alpha}{h^2} x^2}.$$

Les points de raccords de l'ellipse avec le plan $y = 0$ (plan dans lequel se trouvent les tiges) sont donnés par :

$$x_{\pm} = \pm \frac{h}{2 \sin \alpha}.$$

En se limitant aux petites courbures : $\kappa \approx d^2 y / dx^2$ et on trouve :

$$\kappa^2 = \frac{\sin^4 \alpha}{h^2} \frac{4}{\left(1 - \frac{4x^2 \sin^2 \alpha}{h^2}\right)^3}.$$

On voit que κ^2 diverge au niveau des raccords x_{\pm} . Ceci vient du fait que l'on essaie de raccorder une solution purement géométrique (ligne géodésique) qui se termine à la perpendiculaire avec un morceau de tige qui lui se trouve à l'horizontale (figure 5.2). Ce raccord demande la présence d'un coin ("*kink*") qui doit être régularisé par l'élasticité de la tige. Cela signifie que la tige perd contact avec le morceau qu'elle est en train de chevaucher bien avant d'arriver aux points de raccords et la solution (5.2.3) n'est valable que près du centre du cylindre $x \approx 0$ (figure 5.3). À l'ordre le plus bas, cette approximation nous donne :

$$\kappa^2 = \frac{\sin^4 \alpha}{h^2}.$$

En utilisant l'équation (5.6), on obtient finalement l'énergie de pénalisation des auto-intersections :

$$Y_{\text{auto-évitement}} = \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^2 \sin^4 \alpha. \quad (5.7)$$

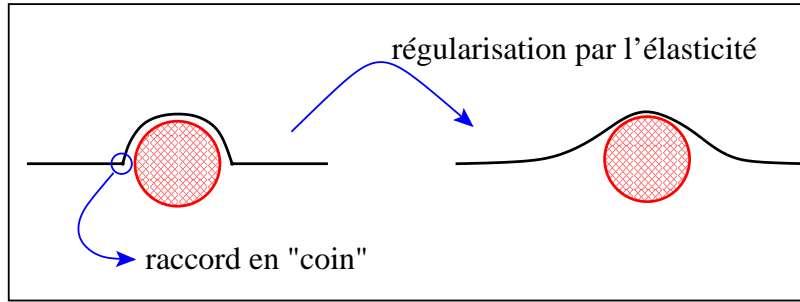


FIG. 5.3 – Régularisation de la divergence géométrique par l'élasticité de la tige. La zone, de taille linéaire b où des déformations plastiques ont lieu, définit la taille microscopique de coupure où une description continue doit être remplacée par une description discrète.

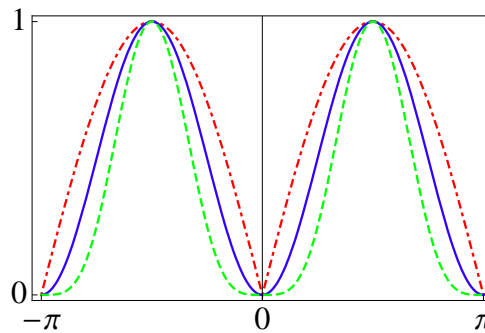


FIG. 5.4 – Comparaison entre les différentes possibilités pour l'implémentation de l'auto-évitement. La courbe continue (bleue) représente l'interaction en $\sin^2 \alpha$. La courbe en pointillé (verte) correspond au raisonnement présenté dans le texte qui prédit une interaction en $\sin^4 \alpha$. Finalement la courbe en pointillé courts alternés (rouge) est la forme proposée par Onsager en $|\sin \alpha|$. Le graphe montre que les trois termes partagent les mêmes propriétés.

Cette expression contient bien les comportements limites que nous avons vus précédemment grâce à la dépendance en $\sin \alpha$ de l'angle d'attaque. D'autre part, le préfacteur $(\varepsilon/h)^2 \gg 1$ assure que les auto-intersections sont fortement pénalisées. Cependant, l'exposant 4, comme la valeur absolue dans l'équation (5.5) proposée par Onsager, introduit encore des difficultés pour développer une théorie analytique. C'est pour cela que nous avons finalement décidé d'utiliser une énergie de type Maier-Saupe [106] très employé dans la théorie des cristaux liquides [107] où l'exposant de $\sin \alpha$ est simplement 2 :

$$\gamma_{\text{auto-évitement}} = \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^2 \sin^2 \alpha. \quad (5.8)$$

Ce changement est, qualitativement, sans conséquences : il suffit de regarder la figure 5.4 pour se rendre compte que quelle que soit l'expression utilisée, (5.5)-(5.7) ou (5.8), les trois possibilités partagent les mêmes propriétés mathématiques (minima, maxima, zéros...) et que leurs formes sont très proches les unes des autres.

Il faut maintenant traduire le fait que le terme d'auto-évitement ne peut contribuer à l'énergie totale de la tige que s'il y a effectivement un point de contact, c'est

à dire $\mathbf{R}(s_1) = \mathbf{R}(s_2)$. En incluant cette contrainte, l'équation (5.8) peut se ré-écrire sous la forme suivante :

$$Y_{\text{auto-évitement}} = u \iint ds_1 ds_2 [\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2)]^2 \delta(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2)). \quad (5.9)$$

où $u = (\varepsilon/h)^2$ et où nous avons préalablement utilisé la contrainte liée à la représentation en abscisse curviligne qui montre que $|\mathbf{R}'(s_1)|^2 |\mathbf{R}'(s_2)|^2 = 1$ (cf équation (5.3)). Malgré cette superbe simplification de la norme, cette formulation reste non-quadratique à cause du produit vectoriel. En fait, nous allons utiliser une astuce mathématique qui permet de reformuler (5.9) de manière quadratique grâce à l'introduction de champs conjugués. Le point important est que cette expression découle d'un mécanisme physique sous-jacent d'exclusion de volume et qu'il ne s'agit pas simplement d'un terme, mis à la main, pour modéliser l'interaction d'auto-évitement.

5.2.4 Confinement

Pour pouvoir finaliser notre théorie, il ne reste plus qu'à introduire la contrainte de confinement de la tige. Le chapitre précédent a montré qu'il suffisait d'utiliser un potentiel de confinement quadratique pour retrouver des propriétés statistiques génériques portant sur l'énergie de la tige. Toutefois, plutôt que d'exprimer le confinement comme une contribution supplémentaire à l'énergie de la tige, nous décidons de le modéliser directement par une contrainte géométrique de la forme suivante :

$$\text{“confinement”} \implies \delta\left(\int_0^L \frac{ds}{L} (\mathbf{R}^2 - \ell^2)\right). \quad (5.10)$$

Le paramètre ℓ va nous servir à étudier le comportement de la tige en fonction de l'intensité du confinement. En effet, comme le rayon de gyration de la tige est défini par :

$$R_{\text{gyra}}^2 = \frac{1}{L} \int_0^L \mathbf{R}^2 ds,$$

nous voyons qu'augmenter le paramètre de contrôle ℓ revient à laisser plus d'espace disponible tandis que diminuer ℓ force la tige dans une aire plus petite. Typiquement, l'aire disponible est donnée par $A = k\ell^2$ où k est un nombre d'ordre 1 et nous définissons la densité c de la tige par :

$$c = \frac{L}{A}. \quad (5.11)$$

Bien qu'à ce stade ce terme ne soit pas exactement équivalent à un potentiel quadratique, nous verrons qu'en fait, les deux formulations ne sont pas si différentes et finissent par se rejoindre après l'approximation de champ moyen (voir section suivante).

5.3 Fonction de partition

Une fois que tous les ingrédients introduits dans la section précédente sont regroupés dans la fonction de partition $Z = \exp(-Y)$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \exp(-Y) &= \int D[\mathbf{R}] \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2} \int_0^L ds \mathbf{R}''^2\right) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{u}{2} \iint_{[0 \times L]^2} ds_1 ds_2 [\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2)]^2 \delta(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2))\right) \\ &\quad \times \delta\left(\frac{1}{L} \int_0^L ds \mathbf{R}^2\right) \delta(\mathbf{R}'^2 - 1). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Il s'agit d'une intégrale fonctionnelle portant sur toutes les fonctions $\mathbf{R}(s)$ représentant les configurations de la tige. Avant de la calculer explicitement, il est important d'introduire deux quantités importantes que nous serons amenés à manipuler :

1. **Existence d'une échelle de longueur microscopique.** La fonction de partition peut laisser croire que les seuls paramètres physiques présents dans la théorie sont :
 - La longueur totale de la tige L .
 - La longueur de persistance ε .
 - L'intensité de l'interaction d'auto-évitement u .

Il existe cependant une longueur microscopique cachée qui n'apparaît pas directement dans l'équation (5.12). Quand une tige est courbée au delà d'un rayon de courbure b , elle commence à se déformer de manière plastique (voir figure 5.3). Les nouveaux phénomènes physiques mis en jeu une fois que ce seuil est dépassé ne sont pas pris en compte dans la fonction de partition. C'est à dire qu'il faut voir la tige comme un ensemble de N points séparés d'une longueur $b \ll L$ le long de la tige. (Pour un polymère, b représenterait la taille des monomères.) Dans ce cas, nous introduisons la transformée de Fourier discrète :

$$\mathbf{R}(s) = \frac{2\pi}{\sqrt{L}} \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \hat{\mathbf{R}}(n) \exp(iq_n s) \quad \text{avec} \quad q_n = \frac{2\pi n}{L}.$$

Le mode de Fourier maximal est directement relié à cette échelle de coupure microscopique $q_{\max} = \pi/b$.

2. **Tenseur d'orientation.** Avant de nous lancer dans l'évaluation de la fonction de partition, il est important d'introduire une quantité qui sera très utile par la suite. Il s'agit du tenseur d'orientation σ_{ij} que l'on définit par :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \int ds R'_i R'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) \quad (5.13)$$

C'est un tenseur symétrique $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ de rang 2 qui va nous servir de paramètre d'ordre. Détaillons un peu plus ce que σ mesure. Tout d'abord, il convient de remarquer que toutes ses composantes sont nulles sauf quand $\mathbf{r} \neq \mathbf{R}(s)$. Cela signifie que si nous évaluons le tenseur d'orientation en un point $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^2$ où il n'y a pas de morceau de tige alors $\sigma_{ij} \equiv 0$. Plaçons nous sur la tige, c'est à dire dans une

situation où le tenseur d'orientation n'est pas identiquement nul, il peut alors se ré-écrire :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{L^2} \int ds R'_i(s) R'_j(s).$$

On voit que le tenseur d'orientation représente la fonction de corrélation des composantes du vecteur tangent. Supposons par exemple que $\mathbf{R}'(s)$ soit un vecteur aléatoire. Dans ce cas, les composantes de \mathbf{R}'_1 et \mathbf{R}'_2 sont des variables aléatoires décorréliées et on a $\sigma_{12} = \sigma_{21} = 0$. Les composantes diagonales de σ se déterminent en remarquant que la condition (5.3) impose $\mathbf{R}'_1{}^2 = \mathbf{R}'_2{}^2 = 1/2$ ce qui donne $\sigma_{11} = \sigma_{22} = 1/2L$. Dans le cas où la forme de la tige est aléatoire, il n'y a pas de corrélation dans l'orientation du vecteur tangent : le tenseur d'orientation est diagonal et s'écrit :

$$\sigma_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{2L}.$$

Revenons maintenant au cas général où $\mathbf{R}'(s)$ n'est pas forcément une variable aléatoire. Les valeurs propres σ_{\pm} du tenseur d'orientation nous renseignent sur la présence ou non de directions privilégiées dans l'orientation de la tige. On peut paramétrer les valeurs propres en notant que :

$$\text{Tr } \sigma = \int ds \underbrace{\sum_i R'_i{}^2}_{\equiv 1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) = c,$$

où c est la densité de la tige (cf équation (5.11)). On peut alors représenter les valeurs propres de σ par :

$$\sigma_{\pm} = \frac{c}{2} (1 \pm \xi), \quad (5.14)$$

où $\xi \in [0, 1]$ dépend, *a priori*, de tous les paramètres physiques. En plus de servir de paramètre d'ordre, le tenseur d'orientation va nous permettre de ré-écrire sous une forme quadratique le terme d'auto-évitement.

5.3.1 Évaluation des différents termes - Champ moyen

Nous disposons maintenant de presque tous les outils nécessaires pour évaluer la fonction de partition (5.12). L'idée est de transformer les fonctions δ portant sur des fonctions (et non pas sur des scalaires) de manière à les rendre plus facilement manipulables analytiquement. Pour cela, nous allons utiliser des transformées de Fourier généralisées dont le principe est expliqué dans l'appendice 7.3. Nous allons aussi directement utiliser l'approximation de champ moyen (expliquée dans le même appendice) pour évaluer un par un les différents termes contenus dans (5.12). Nous suivons le même ordre que celui introduit dans la présentation des ingrédients minimaux.

1) Inextensibilité Commençons par ré-écrire la contrainte (5.3) grâce à une transformée de Fourier généralisée :

$$\delta(\mathbf{R}'^2 - 1) = K_1 \int D[\lambda] \exp\left(-i \int ds \lambda(s) (\mathbf{R}'^2 - 1)\right), \quad (5.15)$$

où K_1 est une constante de normalisation. On peut alors développer \mathbf{R}' sur les modes de Fourier discrets décrits dans la section précédente pour obtenir :

$$\mathbf{R}'^2 = -\frac{(2\pi)^2}{L} \sum_{n,m} q_n q_m \hat{\mathbf{R}}(n) \cdot \hat{\mathbf{R}}(m) e^{i(q_n+q_m)s}.$$

Nous utilisons ensuite l'approximation de champ-moyen $\lambda(s) \rightarrow \lambda$. Cela signifie que \mathbf{R}'^2 n'est plus exactement égal à 1 partout mais seulement en moyenne le long de la tige. Cette approximation nous permet de calculer l'intégrale dans l'équation (5.15) :

$$\begin{aligned} \int ds \mathbf{R}'^2 &= -\frac{2\pi}{L} \sum_{n,m} q_n q_m \hat{\mathbf{R}}(n) \cdot \hat{\mathbf{R}}(m) \int_0^L ds e^{i(q_n+q_m)s}, \\ &= -\frac{2\pi}{L} \sum_{n,m} q_n q_m \hat{\mathbf{R}}(n) \cdot \hat{\mathbf{R}}(m) \delta\left(\frac{2\pi}{L}(n+m)\right), \\ &= 2\pi \sum_n q_n^2 \hat{R}_i(n) \hat{R}_i(-n). \end{aligned}$$

On utilisera partout la convention usuelle de sommation sur les indices répétés. Grâce à l'approximation de champ moyen, l'intégrale fonctionnelle dans l'équation (5.15) se réduit à une intégrale sur la valeur moyenne λ du champ conjugué $\lambda(s)$ et on a :

$$\delta(\mathbf{R}'^2 - 1) = K_1 \int d\lambda \exp(i\lambda L) \exp\left(-2i\pi\lambda \sum_n q_n^2 \hat{R}_i(n) \hat{R}_i(-n)\right). \quad (5.16)$$

2) Flexion Passons maintenant à l'évaluation de l'énergie de flexion :

$$Y_{\text{flex}} = \frac{\varepsilon}{2} \int \mathbf{R}''^2(s) ds.$$

Ce terme se calcule en développant \mathbf{R}'' sur les modes de Fourier discrets, exactement comme dans le paragraphe précédent. On obtient alors facilement :

$$\exp(-Y_{\text{flex}}) = \exp\left(-\pi\varepsilon \sum_n q_n^4 \hat{R}_i(n) \hat{R}_i(-n)\right) \quad (5.17)$$

3) Auto-évitement Passons au terme d'interaction géométrique permettant de pénaliser les auto-intersections. De manière à alléger la notation, nous le désignerons par :

$$\aleph = \exp\left(-\frac{u}{2} \iint_{[0 \times L]^2} ds_1 ds_2 [\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2)]^2 \delta(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2))\right). \quad (5.18)$$

La première étape consiste à développer le produit vectoriel et la fonction δ contenus dans \aleph de la manière suivante :

$$\begin{aligned} (\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2))^2 &= (\delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}) R'_i(s_1) R'_m(s_1) R'_j(s_2) R'_n(s_2), \\ \delta(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2)) &= \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_1)) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_2)). \end{aligned}$$

En insérant ces transformations dans l'équation (5.18), on voit que le terme d'auto-évitement s'écrit :

$$\aleph = \exp \left(-\frac{u}{2} \int d\mathbf{r} \iint ds_1 ds_2 \left[R'_i(s_1) R'_i(s_1) R'_j(s_2) R'_j(s_2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_1)) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_2)) \right. \right. \\ \left. \left. - R'_i(s_1) R'_j(s_1) R'_j(s_2) R'_i(s_2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_1)) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s_2)) \right] \right).$$

La formule ci-dessus montre clairement que \aleph n'est pas quadratique en $\mathbf{R}(s)$. Comme la fonction de partition que nous souhaitons calculer fait intervenir une intégrale de chemin portant sur $\mathbf{R}(s)$, le terme d'auto-évitement devrait être pratiquement impossible à évaluer (cf équation (5.12)). L'astuce consiste à utiliser le tenseur d'orientation σ par l'intermédiaire de l'identité suivante :

$$1 = \int D[\sigma] \delta \left(\int ds R'_i R'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) - \sigma_{ij} \right).$$

On peut alors multiplier \aleph par l'équation précédente et ré-écrire les produits des composantes de \mathbf{R}' pour trouver que le terme d'auto-évitement est donné par :

$$\aleph = \int D[\sigma] \exp \left(-\frac{u}{2} \int d\mathbf{r} (\sigma_{ii} \sigma_{jj} - \sigma_{ij} \sigma_{ji}) \right) \delta \left(\int ds R'_i R'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) - \sigma_{ij} \right).$$

Il ne reste plus qu'à transformer la nouvelle contrainte δ , associée à l'introduction du tenseur d'orientation, en introduisant un champ tensoriel conjugué $\psi_{ij}(\mathbf{r})$:

$$\delta \left(\int ds R'_i R'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) - \sigma_{ij} \right) = K_2 \int D[\psi] \exp \left(-i \int d\mathbf{r} \psi_{ij}(\mathbf{r}) \left[\int ds R'_i R'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)) - \sigma_{ij} \right] \right).$$

On peut alors développer l'expression précédente, avant de la ré-introduire dans \aleph , pour finalement obtenir :

$$\aleph = K_2 \int D[\sigma] \int D[\psi] \exp \left(-\frac{u}{2} \int d\mathbf{r} (\sigma_{ii} \sigma_{jj} - \sigma_{ij} \sigma_{ji}) - i \int ds R'_i \psi_{ij}(\mathbf{R}(s)) R'_j + i \int d\mathbf{r} \psi_{ij} \sigma_{ji} \right).$$

Jusqu'ici, nous n'avons fait aucune approximation et cette formulation est équivalente à celle de l'équation (5.18), sauf que \aleph présente maintenant l'avantage d'être quadratique en σ et en \mathbf{R} . Cependant, comme pour l'évaluation de la contrainte d'inextensibilité, nous allons nous replier sur l'approximation de champ moyen pour pouvoir finir de calculer le terme d'auto-évitement. Cela consiste à remplacer les valeurs propres de σ et de ψ par leurs valeurs propres moyennes, notées $\sigma_{\alpha=\pm}$ et $\psi_{\alpha=\pm}$, qui ne dépendent plus de \mathbf{r} . Dans ce cas, les intégrales fonctionnelles se simplifient en intégrales sur des réels et on trouve :

$$\aleph = K_2 \int d\sigma_\alpha \int d\psi_\alpha \exp \left(-\frac{uA}{2} \left[\left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right)^2 - \sum_\alpha \sigma_\alpha^2 \right] + iA\psi_\alpha \sigma_\alpha - 2i\pi \sum_n q_n^2 R_i(n) \psi_{ij} R_j(-n) \right), \quad (5.19)$$

où A est l'aire disponible (cf équation (5.2.4)) et où nous avons développé les composantes de \mathbf{R}' sur les modes de Fourier discrets.

4) Confinement Le dernier ingrédient composant la fonction de partition correspond à la contrainte de confinement. L'évaluation de ce terme est assez simple car il suffit de faire une transformée de Fourier classique pour ramener la fonction δ à :

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{1}{L}\int ds \mathbf{R}^2 - \ell^2\right) &= K_3 \int d\chi \exp\left(-i\chi\left(\frac{1}{L}\int ds \mathbf{R}^2 - \ell^2\right)\right), \\ &= K_3 \int d\chi \exp\left(i\chi\ell^2\right) \exp\left(-\frac{2i\pi\chi}{L}\sum_n \hat{R}_i(n)\hat{R}_i(-n)\right). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Énergie libre Nous pouvons maintenant regrouper tous ces termes calculés dans l'approximation de champ moyen lors des paragraphes précédents (équations (5.16), (5.17), (5.19) et (5.20)). De manière à alléger la notation, nous utiliserons $\tilde{\lambda} = i\lambda$, $\tilde{\psi}_\alpha = i\psi_\alpha$ et $\tilde{\chi} = i\chi$ où toutes les quantités tildées sont dans \mathbb{R} . En absorbant les constantes K_1 , K_2 et K_3 dans une nouvelle constante K , la fonction de partition entière s'écrit :

$$\begin{aligned} \exp(-Y) &= K \int d\tilde{\lambda} \int d\sigma_\alpha \int d\tilde{\psi}_\alpha \int d\tilde{\chi} \int D[\mathbf{R}] \exp\left(-2\pi\sum_n R_i(n) M_{ij} R_j(-n)\right) \\ &\quad \times \exp\left(\tilde{\lambda}L - \frac{uA}{2}\left[\left(\sum_\alpha \sigma_\alpha\right)^2 - \sum_\alpha \sigma_\alpha^2\right] + A\tilde{\psi}_\alpha\sigma_\alpha + \tilde{\chi}\ell^2\right) \end{aligned} \quad (5.21)$$

où les éléments de la matrice M sont donnés par :

$$M_{ij} = \left(\frac{\varepsilon}{2}q_n^4 + \tilde{\lambda}q_n^2 + \frac{\tilde{\chi}}{L}\right)\delta_{ij} + \tilde{\psi}_{ij}q_n^2.$$

L'intégrale de chemin portant sur les fonctions \mathbf{R} :

$$W = \int D[\mathbf{R}] \exp\left(-2\pi\sum_n R_i(n) M_{ij} R_j(-n)\right)$$

est gaussienne et donc se détermine facilement :

$$\begin{aligned} W &= \prod_n \sqrt{\frac{\pi}{\text{Det } M}} \\ &= \pi^{N/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_n \log(\text{Det } M)\right). \end{aligned}$$

En revenant à la limite continue $\sum_n \rightarrow L/2\pi \int_{-\pi/b}^{\pi/b}$, et en utilisant la symétrie $q \leftrightarrow -q$ des éléments de M , on obtient :

$$W = \pi^{N/2} \exp\left(-\frac{L}{2\pi}\sum_\alpha \int_0^{\pi/b} dq \log\left(\frac{\varepsilon}{2}q^4 + (\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_\alpha)q^2 + \frac{\tilde{\chi}}{L}\right)\right).$$

Il suffit alors d'insérer W dans l'équation (5.21) pour pouvoir extraire l'expression de l'énergie libre :

$$\begin{aligned} Y &= \frac{L}{2\pi}\sum_\alpha \int_0^{\pi/b} dq \log\left(1 + \frac{2(\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_\alpha)}{\varepsilon q^2} + \frac{2\tilde{\chi}}{\varepsilon L q^4}\right) \\ &\quad - \tilde{\lambda}L - A\sum_\alpha \tilde{\psi}_\alpha\sigma_\alpha + \frac{uA}{2}\left(\sum_\alpha \sigma_\alpha\right)^2 - \frac{uA}{2}\sum_\alpha \sigma_\alpha^2 - \tilde{\chi}\ell^2 \end{aligned} \quad (5.22)$$

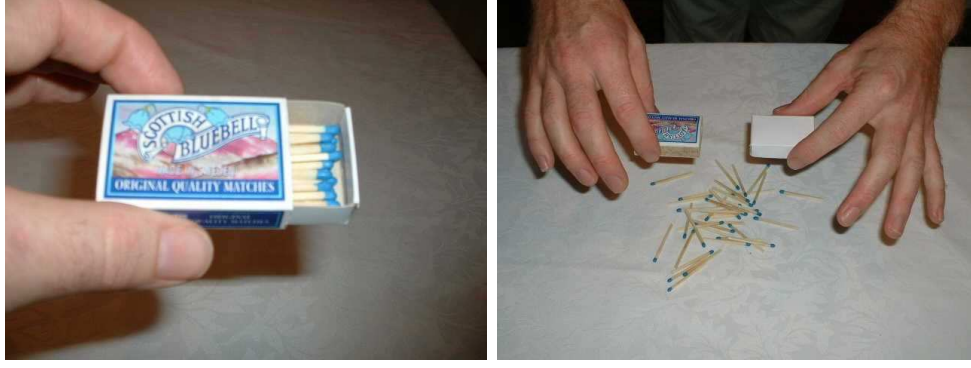


FIG. 5.5 – Illustration de la transition entre une phase ordonnée (à gauche) et désordonnée (à droite). La présence d’une boîte, qui restreint le volume accessible aux allumettes, induit une auto-organisation de l’orientation des allumettes qui s’alignent toutes entre elles. Dans le cas d’une tige confinée dans un espace restreint, cette phase nématique correspond à une configuration “spirale” (voir l’article joint).

5.3.2 Approximation point col

La dernière étape du calcul consiste à utiliser l’approximation point col (“*saddle point*”). Cette méthode permet de déterminer les contributions principales à l’énergie libre en cherchant les points stationnaires de Y par rapport à la valeur moyenne des champs conjugués $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\psi}_\alpha$, σ_α et $\tilde{\chi}$. En cherchant les points où s’annulent les dérivées partielles de Y par rapport à ces variables, nous obtenons les équations suivantes :

$$\frac{1}{\pi\varepsilon} \sum_\alpha \int_0^{\pi/b} \frac{q^2 dq}{q^4 + \frac{2(\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_\alpha)}{\varepsilon} q^2 + \frac{2\tilde{\chi}}{\varepsilon L}} = 1, \quad (5.23)$$

$$\frac{1}{\pi\varepsilon} \int_0^{\pi/b} \frac{q^2 dq}{q^4 + \frac{2(\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_\alpha)}{\varepsilon} q^2 + \frac{2\tilde{\chi}}{\varepsilon L}} = \frac{A}{L} \sigma_\alpha, \quad (5.24)$$

$$\frac{1}{\pi\varepsilon} \sum_\alpha \int_0^{\pi/b} \frac{dq}{q^4 + \frac{2(\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_\alpha)}{\varepsilon} q^2 + \frac{2\tilde{\chi}}{\varepsilon L}} = \ell^2, \quad (5.25)$$

$$\tilde{\psi}_\alpha = u(c - \sigma_\alpha). \quad (5.26)$$

Cette procédure donne les 6 équations ci-dessus qui fixent la valeur de $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\psi}_+$, $\tilde{\psi}_-$, σ_+ , σ_- et $\tilde{\chi}$ ce qui, par conséquent, fixe également la valeur de l’énergie libre Y . Comme la fonction de partition est donnée par $Z = \exp(-Y)$, on voit que nous disposons maintenant de tous les outils pour calculer toutes les quantités que l’on souhaite en prenant des dérivées de l’énergie libre. Notre description des ingrédients du modèle et de l’évaluation de la fonction de partition s’achèvent donc ici.

5.4 Article reproduit - Bilan

Comme nous l’avons indiqué dans l’introduction, tous les résultats relatifs à ce chapitre sont présentés dans l’article reproduit et nous renvoyons le lecteur à cette référence. Nous

nous limitons, ici, à un bref résumé de ces résultats de manière à aider la lecture de l'article original. L'avantage de l'approche développée est qu'elle nous a permis d'étudier simultanément les aspects géométriques, par l'intermédiaire du tenseur d'orientation σ , et les aspects mécaniques de la compaction de la tige. Les deux propriétés mécaniques les plus importantes sont la pression exercée par la tige confinée sur le récipient et la force d'injection nécessaire pour augmenter la densité c . Une fois que le système [5.23-5.26] est résolu, c'est à dire que l'énergie libre Y est déterminée, la pression P et la force d'injection F sont données par :

$$P = - \left(\frac{\partial Y}{\partial A} \right)_L \quad \text{et} \quad F = \left(\frac{\partial Y}{\partial L} \right)_A . \quad (5.27)$$

Dans la limite $b \rightarrow 0$, c'est à dire que la longueur de coupure microscopique est négligeable, nous avons pu résoudre ce système d'équations exactement. Nous avons trouvé qu'il existe une transition de phase du deuxième ordre entre des configurations désordonnées (phase isotrope $\sigma_+ = \sigma_-$, cf équation (5.14)) et des configurations ordonnées (phase nématique $\sigma_+ \neq \sigma_-$). Intuitivement, cette transition peut se comprendre en regardant la figure 5.5. À l'intérieur de leur boîte, toutes les allumettes sont alignées les unes avec les autres (phase nématique). Au contraire, si on les laisse tomber, elles prennent des orientations aléatoires (phase isotrope). Cela signifie qu'il existe un volume de confinement critique en dessous duquel les allumettes vont spontanément s'ordonner pour former une phase nématique. Dans notre cas, la densité critique est donnée par :

$$c_{\text{crit}} = \frac{2}{\varepsilon u}$$

Pour des concentrations inférieures à c_{crit} , la tige ne présente aucune direction privilégiée et elle se trouve dans la phase isotrope. Au delà de c_{crit} , les effets de confinement deviennent plus importants et la tige s'auto-aligne et devient ordonnée (cf figure 1 de l'article). De telles configurations nématiques sont cohérentes avec les configurations spiralées que nous avons déjà rencontrées à la fin du chapitre 3. Cette transition vers une phase nématique quand la densité augmente, est accompagnée d'une diminution relative de la pression et de la force d'injection (cf figure 2 de l'article). Cela signifie qu'il est mécaniquement avantageux d'abandonner la phase isotrope pour la phase nématique de manière à pouvoir continuer à accommoder une densité de tige plus grande à l'intérieur du récipient. Nous avons aussi trouvé que notre théorie prédit une deuxième transition pour de très grandes densités. Cette transition de "blocage" est contrôlée par la taille microscopique b . Nous avons développé une analyse asymptotique du système d'équations [5.23-5.26] dans la limite où $c \gg 1$ et $b \neq 0$. Les résultats de ce calcul mettent en évidence l'existence d'une singularité en taille finie de l'énergie (cf figure 4 de l'article), de la pression et de la force d'injection quand la taille linéaire accessible à la tige s'approche de :

$$\ell_{\text{blocage}} = \sqrt{\frac{b^2}{\pi^2} + \frac{b}{8uc}} .$$

Cette longueur est très petite car elle est de l'ordre de grandeur de b . Cependant, il est intéressant de noter que cette transition de "blocage", non triviale, persiste malgré l'approximation de champ moyen. Même si nous trouvons qu'un ordre de grandeur de ℓ_{blocage} ,

le fait que cette 2^{ème} transition reste présente indique qu'il s'agit d'un phénomène robuste. Nous renvoyons maintenant le lecteur à l'article reproduit pour le détail de ces résultats ainsi qu'un bilan du chapitre.

Erratum. *Dans l'équation 33 de l'article qui suit, il faut lire $k\varepsilon^3P/L$ à la place de $k\varepsilon P$.*

Folding of flexible rods confined in 2D space

LAURENT BOUÉ and EYTAN KATZAV

Laboratoire de Physique Statistique de l'École Normale Supérieure, CNRS UMR 8550 - 24 rue Lhomond,
75231 Paris Cedex 05, France

received 12 June 2007; accepted in final form 9 October 2007
published online 31 October 2007

PACS 46.32.+x – Static buckling and instability
PACS 46.65.+g – Random phenomena and media
PACS 45.70.Qj – Pattern formation

Abstract – We propose a statistical field theory to study the properties of elastic rods confined in 2D containers. Using a mean-field evaluation of the path integral, we show how a self-reorganization of the folding pattern between disordered and ordered configurations above a critical density leads to a more efficient packing. In addition, we predict the existence of a jamming transition for higher densities. The nature of this jamming transition is compared with similar observations in experiments on packing of flexible structures. The advantage of this approach is that it puts on an equal footing the geometrical features (such as self-avoidance) and the mechanical response to confinement.

Copyright © EPLA, 2007

Introduction. – A large variety of elastic structures naturally seem to be confined into environments too small to accommodate them. Whether it is tree leaves growing inside buds, electronic cables folded up in a box, compacted viral DNA within capsids or even a simple piece of crumpled paper, these structures span a whole variety of different length-scales. They usually consist of thin sheets or rods constrained to undergo large deformations. Because of their biological and technological importance, the properties of confined low-dimensional objects are now the subject of increasingly growing attention.

In this letter, we focus on a particular case of packing: an elastic rod confined into a two-dimensional cell. The main objective is to obtain simultaneous information about the geometry of folded rod configurations as well as their associated mechanical response without having an *a priori* knowledge of either one. Our approach follows that of equilibrium statistical mechanics. The pioneering work of Edwards on granular matter [1] has shown how the powerful arsenal of statistical physics can be extended to athermal systems. This method has proven its applicability to other fields as well [2]. Because there is no thermal averaging due to Brownian motion, this approach requires the presence of a macroscopic tapping (analog to an effective temperature) allowing the system to explore its entire phase space.

Formulation of the model. – We consider an elastic rod of total length L confined in a 2D container of

linear size ℓ . Spatial configurations are represented by the vector $\mathbf{R}(s)$ parameterized by the arclength $s \in [0, L]$. In analogy with semi-flexible polymers (or wormlike chains), abrupt changes of direction are regularized via the persistence length ε introduced by the bending energy. We also consider the existence of a microscopic cut-off length-scale b . In the context of polymers b would be the monomer size and for a continuous (but thick) rod, b is related to the greatest curvature elastically allowed by the rod thickness (below which, for example, plasticity becomes important). b is taken into account by assuming a lower cutoff in all the integrals over the arclength s that follow. The partition function describing this confined rod is written as path integral over all possible configurations:

$$e^{-Y} = \int D[\mathbf{R}] e^{-\varepsilon/2 \int ds \mathbf{R}'^2} \times e^{-u/2 \int ds_1 \int ds_2 [\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2)]^2 \delta^2(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2))} \times \delta\left(\int ds \mathbf{R}^2 / L - \ell^2\right) \delta(\mathbf{R}'^2 - 1), \quad (1)$$

where Y is the (dimensionless) reduced free energy, which can be dimensionalized by the characteristic energy scale of the tapping. Our model is composed of a number of ingredients which we now specify. Two types of interaction contributing to the rod energy can be separated: i) Elasticity theory shows that bending deformations increase the rod energy proportionally to \mathbf{R}'^2 . ii) Topological self-avoidance. This constraint is dealt with by introducing an

Onsager-like term [3]: the local excluded volume created by self-intersections is proportional to $|\sin \alpha|$ where α is the angle between touching segments. Here we take $\sin^2 \alpha$ which shares the same properties as $|\sin \alpha|$ but allows more advanced calculations. The dimensionless parameter u fixes the intensity of this interaction. Finally, the radius of gyration of the rod set to ℓ through a δ -constraint. This term encodes the presence of an outer rigid container. The area, A , occupied by the rod is then given by $A = k\ell^2$ (k being a constant of order unity). Decreasing ℓ is equivalent to increasing the rod density inside the cell. Since $\mathbf{R}(s)$ and its first derivative $\mathbf{R}'(s)$ are well-defined the geometric constraint $\mathbf{R}'^2 = 1$ has to be satisfied all along the rod. This constraint ensures the inextensibility of the rod and simply stems from Pythagoras' theorem. In the following, we will re-write the partition function in terms of the 2D orientation tensor $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ defined as

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \int ds R'_i R'_j \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s)). \quad (2)$$

This collective coordinate will serve as our order parameter measuring the local orientation of the rod. Its eigenvalues, σ_+ and σ_- yield the two principal directions of the rod. By denoting $c = L/A$ the rod density inside the cell, we can parameterize these eigenvalues by

$$\sigma_{\pm} = \frac{c}{2} (1 \pm \xi) \quad \text{with} \quad \xi \in [0, 1]. \quad (3)$$

Evaluation of the free energy. – Our aim in this part is to extract the free energy Y (see [2] for more technical details). First, we exponentiate the awkward δ -constraints by introducing the conjugate fields $\lambda(s)$ and χ through the Fourier transforms:

$$\delta(\mathbf{R}'^2 - 1) = K \int D[\lambda] e^{-i \int ds \lambda(s) (\mathbf{R}'^2 - 1)}, \quad (4)$$

$$\delta\left(\int ds \mathbf{R}^2 / L - \ell^2\right) = K' \int d\chi e^{-i\chi(\int ds \mathbf{R}^2 / L - \ell^2)}, \quad (5)$$

where K and K' are normalization constants. Similarly, the definition of the orientation tensor in eq. (2) is introduced through a δ -function which is then exponentiated using the conjugate tensorial field $\psi_{ij}(\mathbf{r})$, whose eigenvalues are ψ_{α} ($\alpha = +, -$). We illustrate this operation by explicitly writing down the geometric self-interaction:

$$\begin{aligned} e^{-u/2 \int ds_1 \int ds_2 [\mathbf{R}'(s_1) \times \mathbf{R}'(s_2)]^2 \delta^2(\mathbf{R}(s_1) - \mathbf{R}(s_2))} = \\ K'' \int D[\sigma] D[\psi] e^{-u/2 \int d^2 r (\sigma_{ii} \sigma_{jj} - \sigma_{ij} \sigma_{ji})} \\ \times e^{-i \int ds R'_i \psi_{ij}(\mathbf{R}(s)) R'_j + i \int d^2 r \psi_{ij} \sigma_{ji}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Incorporating eqs. (4)–(6) into eq. (1), we can write the partition function as

$$e^{-Y} = \underbrace{\int D[\sigma] D[\psi] D[\lambda] d\chi}_{V} e^{-Y_{\text{fields}}} \underbrace{\int D[\mathbf{R}]}_W e^{-Y_{\mathbf{R}}}, \quad (7)$$

separating it into a \mathbf{R} -independent integral denoted V and a \mathbf{R} -dependent one denoted W . To make the calculations tractable, we turn to the mean-field approximation. The fields $\lambda(s)$, $\psi_{ij}(\mathbf{r})$ and $\sigma_{ij}(r)$ are replaced by their mean values disregarding fluctuations. For clarity we will contract the notation by defining: $\tilde{\lambda} = i\lambda$, $\tilde{\psi}_{\alpha} = i\psi_{\alpha}$ and $\tilde{\chi} = i\chi$. Within this approximation, one can verify that

$$V = e^{-\tilde{\lambda}L - A \sum_{\alpha} \tilde{\psi}_{\alpha} \sigma_{\alpha} + \frac{uA}{2} [(\sum_{\alpha} \sigma_{\alpha})^2 - \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2] - \tilde{\chi} \ell^2}. \quad (8)$$

In order to determine W , we take the discrete Fourier transform of $\mathbf{R}(s) = \sum_n \hat{\mathbf{R}}(n) e^{iq_n s}$ with $q_n = 2\pi n/L$. The total length L can be counted in units of the cutoff length b so that $L = Nb$ and the maximum value of q_n is $q_{\text{max}} = \pi/b$. Therefore W can be written as

$$W = \int D[\mathbf{R}] e^{-2\pi \sum_n \hat{\mathbf{R}}_i(n) M_{ij} \hat{\mathbf{R}}_j(-n)}, \quad (9)$$

with $M_{ij}(n) = (\varepsilon q_n^4 / 2 + \tilde{\lambda} q_n^2 + \tilde{\chi} / L) \delta_{ij} + \tilde{\psi}_{ij} q_n^2$. Since δ_{ij} commutes with all operators, we write $\tilde{\psi}_{ij}$ in terms of its eigenvalues $\tilde{\psi}_{\alpha}$. Going back to the continuous limit, this Gaussian integral reads

$$W = e^{-L/2\pi \sum_{\alpha} \int_0^{\text{qmax}} dq \ln(\varepsilon q^4 / 2 + (\tilde{\lambda} + \tilde{\psi}_{\alpha}) q^2 + \tilde{\chi} / L)}. \quad (10)$$

At this point it seems convenient to introduce the dimensionless variables and parameters which will be used throughout the rest of the letter:

$$\Lambda = \varepsilon \tilde{\lambda}, \quad \tau = 2\varepsilon^3 \tilde{\chi} / L, \quad (11)$$

$$\beta = b/\pi\varepsilon, \quad \gamma = \varepsilon u c / 2, \quad \phi = (\ell/\varepsilon)^2. \quad (12)$$

The microscopic length-scale b is rescaled by the persistence length ε to give a dimensionless small parameter β . The second parameter γ is a measure of the rod density c and ϕ represents the size ℓ of the container counted in units of ε . A more condensed notation is achieved by defining

$$z_{\pm} = 2 \left(\Lambda + \varepsilon \tilde{\psi}_{\mp} \right). \quad (13)$$

Incorporating these results in eq. (7) and after some calculations, we extract the following expression for the field-dependent free energy:

$$\begin{aligned} Y = \frac{L}{2\pi\beta\varepsilon} \sum_{+,-} \int_0^1 dq \ln \left[1 + \frac{z_{\pm} \beta^2}{q^2} + \frac{\beta^4 \tau}{q^4} \right] \\ - \frac{L\Lambda}{\varepsilon} - \frac{L\gamma}{2\varepsilon} (1 - \xi^2) - \frac{L\tau\phi}{2\varepsilon}. \end{aligned} \quad (14)$$

The next step is to perform the saddle-point approximation (also called the stationary-phase approximation) that amounts to identifying the points that contribute the most to the integral in eq. (7). Looking for stationary points of Y with respect to Λ , ψ_{α} , χ and σ_{α} yields a system of three equations determining Λ , τ and ξ (defined in eq. (3)):

$$\beta \int_0^1 \frac{y^2 dy}{y^4 + z_- \beta^2 y^2 + \beta^4 \tau} = \frac{\pi}{2} (1 + \xi), \quad (15)$$

$$\beta \int_0^1 \frac{y^2 dy}{y^4 + z_+ \beta^2 y^2 + \beta^4 \tau} = \frac{\pi}{2} (1 - \xi), \quad (16)$$

$$\beta^3 \sum_{+,-} \int_0^1 \frac{dy}{y^4 + z_{\pm} \beta^2 y^2 + \beta^4 \tau} = \pi \phi, \quad (17)$$

and directly fixes the eigenvalues of $\tilde{\psi}_{ij}$:

$$\tilde{\psi}_{\pm} = \frac{uc}{2} (1 \mp \xi) \Rightarrow z_{\pm} = 2[\Lambda + \gamma(1 \pm \xi)]. \quad (18)$$

Configurational phase transition. – In the limit $\beta \rightarrow 0^+$ corresponding to infinitesimally small b , equations (15)–(17) can be solved exactly in two classes of solutions: $\xi = 0$ (isotropic phase) and $\xi \neq 0$ (nematic phase). Once Y is determined for both phases, we will be interested in two physical quantities: i) the mechanical pressure P exerted by the rod on the container and ii) the injection force F . P is given by the variation of Y with respect to small changes in the occupied area $A = k\ell^2$ keeping the total length L constant. Similarly F is given by the variation of Y associated with small changes in L (this time keeping A constant):

$$P = - \left(\frac{\partial Y}{\partial A} \right)_L \quad \text{and} \quad F = \left(\frac{\partial Y}{\partial L} \right)_A. \quad (19)$$

The transition between $\xi = 0$ and $\xi \neq 0$ is controlled by the critical radius t :

$$t^2 \equiv \frac{L\varepsilon u}{2k} = \gamma \ell^2, \quad (20)$$

where γ was defined in eq. (12).

Isotropic phase. If $\ell > t$, we are in the isotropic regime with $\xi = 0$. In this case both eigenvalues of the orientation tensor are equal: there is no preferred orientation. Exact solutions in this phase are

$$\xi = 0, \quad \Lambda = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon^2}{\ell^2} - \frac{t^2}{\ell^2}, \quad \tau = \frac{\varepsilon^4}{\ell^4}.$$

This allows us to determine Y , P and F using eq. (19):

$$\begin{aligned} Y_{\text{isotropic}} &= \frac{L}{2\varepsilon} \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{\ell^2} + \frac{t^2}{\ell^2} \right), \\ P_{\text{isotropic}} &= \frac{L}{2k\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon^2}{\ell^4} + \frac{t^2}{\ell^4} \right), \\ F_{\text{isotropic}} &= \frac{1}{2\varepsilon} \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{\ell^2} + \frac{2t^2}{\ell^2} \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Nematic phase. If $\ell < t$, we are interested in the case $\xi \neq 0$. Solutions for the fields are given by

$$\xi = \sqrt{1 - \frac{\ell}{t}}, \quad \Lambda = -\frac{\varepsilon^2}{\ell^2} - \frac{t}{2\ell}, \quad \tau = \frac{\varepsilon^4}{\ell^4},$$

from which we determine the mechanical properties:

$$\begin{aligned} Y_{\text{nematic}} &= \frac{L}{2\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon^2}{\ell^2} + \frac{2t}{\ell} \right), \\ P_{\text{nematic}} &= \frac{L}{2k\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon^2}{\ell^4} + \frac{t}{\ell^3} \right), \\ F_{\text{nematic}} &= \frac{1}{2\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon^2}{\ell^2} + \frac{3t}{\ell} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

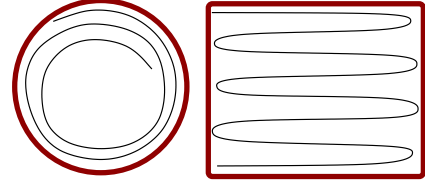


Fig. 1: Schematic representation of a nematic ordering in axi-symmetric (left) and rectangular geometries (right).

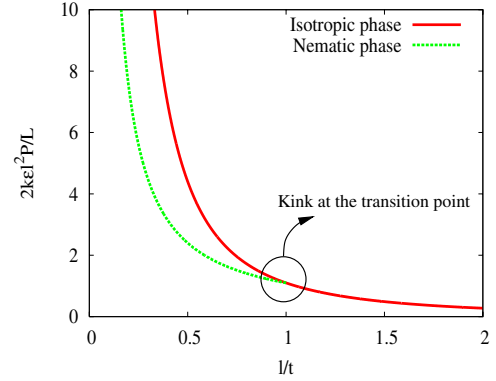


Fig. 2: Pressure for the isotropic and the nematic phases, with $(\varepsilon/t)^2 = 0.1$. Note that above the transition (*i.e.* for $\ell/t \leq 1$), the pressure of the nematic phase is lower.

One can visualize this nematic order as the rod aligning itself with the largest macroscopic size of its container. The rod develops large areas of self-contact. Depending on the geometry of the system, possible nematic arrangements are spirals (axisymmetric containers observed in [4]) or layered loops (rectangular containers and directed packing of metallic wires observed in [5]) shown schematically in fig. 1.

Transition. Nematic configurations are well-defined only for $\ell \leq t$ (*i.e.* $\gamma \geq 1$). It turns out that for $\ell = t$, the nematic and isotropic arrangements are equally favorable energetically. As ℓ is further decreased, the pressure varies continuously from isotropic to nematic but presents a kink at the transition point (see fig. 2). This makes it a second-order phase transition. Due to an organized folding pattern in the nematic phase, one can also see that the injection force and the mechanical pressure increase more slowly than what would have happened with an isotropic arrangement. This self-organization of the rod above a critical density $c = 2/\varepsilon u$ allows for a more efficient packing.

Role of the microscopic length-scale. – Now we turn our attention to the high-density regime where ordered configurations have already been reached. Intuitively, one expects that for $\ell \ll t$ (or equivalently $\gamma \gg 1$) the microscopic length scale b can no longer be ignored (recall the physical meaning of b discussed in the formulation of the model). We would like to understand the influence of such a finite b on the results derived above.

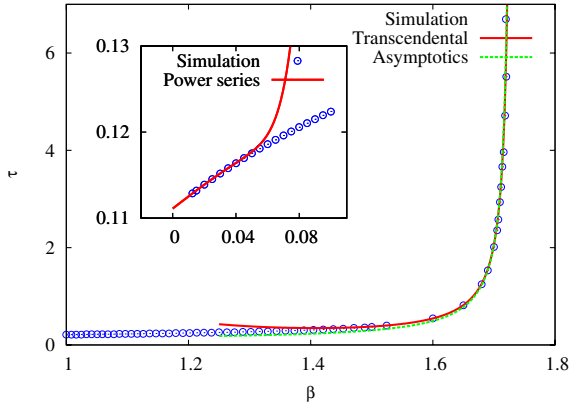


Fig. 3: Comparison of the theoretical results for τ (transcendental refers to eq. (29) and asymptotics to eq. (30)) with a direct simulation ($\phi = 3$ and $\gamma = 100$). Equation (31) predicts the jamming transition at $\beta_{\text{crit}} = 1.73$ in agreement with the simulation. The inset shows the perturbative solution up to the 10th order. Its radius of convergence agrees with $\beta = 1/2\sqrt{\gamma} = 0.05$.

Perturbation theory. As a first step we limit ourselves to small values of b and expand eqs. (15)–(17) as a power series in the small parameter $\beta = b/\pi\varepsilon$. We have solved these equations iteratively up to the 10th order in β . As an illustration we write down the perturbative form of the energy up to the second order:

$$Y = Y_{\text{nematic}} \left(1 + \frac{2(2 + \sqrt{\gamma}\phi - 2\gamma\phi)}{\pi(1 + 2\sqrt{\gamma}\phi)} \beta + \frac{4 - \sqrt{\gamma}\phi - 4\gamma\phi}{\pi^2(1 + 2\sqrt{\gamma}\phi)} \beta^2 + \mathcal{O}(\beta^3) \right). \quad (23)$$

A simple ratio test on terms of higher order indicates a finite radius of convergence at $\beta_{\text{crit}} \approx 0.5/\sqrt{\gamma}$. This limits of course the perturbative approach, but more importantly hints at a nonanalytic behavior for larger values of b . The origin of this finite radius of convergence is in the rational integrands of the form $f_\alpha(q) = q^\alpha/(q^4 + zq^2 + \tau)$ in eqs. (15)–(17) that can be expanded as

$$\int_0^{\beta^{-1}} f_\alpha(q) dq = \int_0^{+\infty} f_\alpha(q) dq - \int_{\beta^{-1}}^{+\infty} dq q^{\alpha-4} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \left(\frac{zq^2 + \tau}{q^4} \right)^n. \quad (24)$$

This expansion will be valid as long as $(z\beta^{-2} + \tau)/\beta^{-4} < 1$. Inserting the actual expressions for z and τ , we find an upper bound beyond which a breakdown of the series should occur for $\beta < \frac{1}{2\sqrt{\gamma}}$. We performed direct numerical resolutions of eqs. (15)–(17) using Newton's method for multiple sets of parameters $\{\beta, \gamma, \phi\}$ to verify this analysis. The results for τ presented in fig. 3 show a good agreement between the predicted radius of convergence and the actual failure of the perturbative solutions. What is interesting is that a breakdown of a perturbative

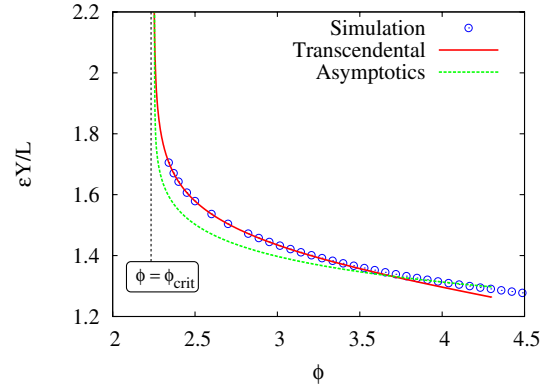


Fig. 4: Comparison of the free energy as a function of the container size between direct numerical simulations ($\beta = 1.5$ and $\gamma = 100$) and theory (transcendental refers to eq. (29) and asymptotics to eq. (32)). The prediction of eq. (31): $\phi_{\text{crit}} = 2.25$ is consistent with the numerical results.

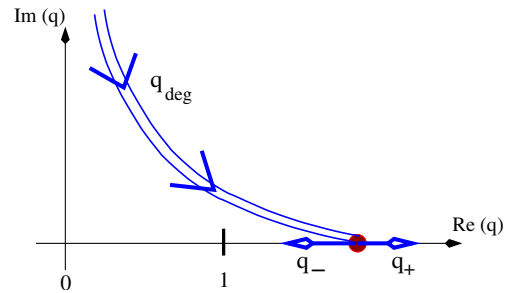


Fig. 5: Motion of the poles of $f_\alpha(q)$ as β is increased.

calculation often foreshadows significant and non-trivial changes ahead. Indeed, the numerical solutions reveal a finite-size blow up for τ and Λ (while ξ remains bounded). This leads to a divergence of the free energy (see fig. 4), indicating a blow-up of the pressure as well. This solid-like behavior signals the emergence of a new transition: the density is reaching an ultimate value beyond which rod configurations are blocked, resulting in a diverging pressure and injection force. This jamming transition is however reached for large values of β that cannot be captured by the small β expansion.

Onset of the jamming transition. In fact it is the poles of the rational functions $f_\alpha(q)$ (see eqs. (15)–(17)) that are responsible for this new transition. Because we have no information on the values of z and τ at such large β 's, we first track down the position of the poles numerically. This allows us to draw a diagram of their position as a function of β shown in fig. 5. As β is increased, a degenerate pole initially appears in the imaginary upper half plane, $q_{\text{deg}} = \beta\sqrt{-z_-}/2$, reaching the real axis when $4\tau = z_-^2$. There, it splits into 2 new singularities q_\pm which remain on the real axis, but still away from the integration interval $q \in [0, 1]$:

$$q_\pm = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sqrt{-z_- \pm \sqrt{z_-^2 - 4\tau}} \in \mathbb{R}^+. \quad (25)$$

While q_+ moves safely away from the integration interval, q_- approaches 1^+ dangerously. A crucial step is to try an expansion in small η near the transition point: $q_- = 1 + \eta$ with $\eta \ll 1$. We will see that this “bootstrap” assumption is indeed justified since η vanishes exponentially fast close to the divergence (see fig. 6). The analogous quantities associated with z_+ are found to stay safely away from the real axis and do not bring any difficulties. It is therefore useful to rewrite $f_\alpha(q)$ as $f_\alpha(q) = q^\alpha / (q - q_-)(q + q_-)(q^2 - q_+^2)$, and then decompose it as a sum of rational functions. The only problem comes from terms of the form $\propto 1/(q - q_-)$ since the functions $f_\alpha(q)$ are integrated in $q \in [0, 1]$. The goal is now to expand equations (15)–(17) in terms of the small parameter η . After some manipulations we find a set of three coupled equations determining τ , Λ and ξ :

$$\frac{1}{2(\beta^4\tau - 1)} \left(\log \frac{2}{\eta} - 2\beta^2\sqrt{\tau} \operatorname{arctanh} \frac{1}{\beta^2\sqrt{\tau}} \right) = \frac{\pi}{2\beta}(1 + \xi), \quad (26)$$

$$\frac{1}{4\beta^2\gamma} = \frac{\pi}{2\beta}(1 - \xi), \quad (27)$$

$$\frac{1}{2(\beta^4\tau - 1)} \left(\log \frac{2}{\eta} - \frac{2}{\beta^2\sqrt{\tau}} \operatorname{arctanh} \frac{1}{\beta^2\sqrt{\tau}} \right) + \frac{\pi}{4\beta^3\sqrt{\tau\gamma}} - \frac{1}{4\beta^2\gamma} = \frac{\pi\phi}{\beta^3}. \quad (28)$$

Equation (27) directly determines ξ and by combining eq. (26) with eq. (28), we obtain a transcendental equation for τ :

$$\frac{1}{\sqrt{\tau}} \left(\frac{\pi}{4\beta\sqrt{\gamma}} + \operatorname{arctanh} \frac{1}{\beta^2\sqrt{\tau}} \right) = \frac{\pi}{\beta}(\phi - \beta^2). \quad (29)$$

The validity of this “bootstrap” approach is verified by solving eq. (29) numerically and comparing it to the numerical resolution described above (see fig. 3). Since we are interested in the limit where solutions disappear, we solve eq. (29) for asymptotically vanishing r.h.s. Near the transition τ and Λ are related to each other through: $z_- \beta^2 + \tau \beta^4 + 1 \rightarrow 0$. To leading order, we find

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{\pi\beta\sqrt{\phi - \beta^2}(\sqrt{\phi - \beta^2} - \sqrt{\pi\beta/16\gamma})}, \\ \Lambda &= \frac{-1}{2\pi} \left(\frac{1}{\beta} + \frac{\pi}{\beta^2} + \frac{\beta}{\sqrt{\phi - \beta^2}(\sqrt{\phi - \beta^2} - \sqrt{\pi\beta/16\gamma})} \right), \\ \xi &= 1 - \frac{1}{2\pi\gamma\beta}. \end{aligned} \quad (30)$$

These asymptotic solutions compare well with the numerical solutions (τ presented in fig. 3). From these expressions, we identify the critical container size:

$$\phi_{\text{crit}} = \beta^2 + \frac{\pi\beta}{16\gamma} \iff \ell_{\text{crit}} = \sqrt{\frac{b^2}{\pi^2} + \frac{b}{8uc}}. \quad (31)$$

In order to check the self-consistency of this asymptotic analysis in terms of η , one can use eqs. (26)–(28) to see that

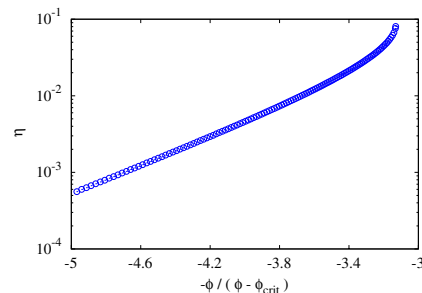


Fig. 6: Log-lin plot of the expansion parameter η . It collapses onto a straight line confirming an exponential decay.

$\eta \propto \exp(-\phi/(\phi - \phi_{\text{crit}}))$. This exponential decay of η as we approach the jamming transition is verified numerically in fig. 6 validating our results. We are now in a position to determine the energy of the rod close to the jamming transition using eq. (14) (recall the definition of β , γ and ϕ in eq. (12) to translate this to the physical values):

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon Y}{L} &\approx \frac{1}{2\pi\beta} \left(\frac{1}{2} + \frac{\pi}{\beta} + \ln \frac{32\beta^5\gamma}{\pi} + \frac{\pi\beta}{8\gamma(\phi - \phi_{\text{crit}})} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{\pi\beta}{2\gamma(\phi - \phi_{\text{crit}})} - \ln(\phi - \phi_{\text{crit}})} \right). \end{aligned} \quad (32)$$

Because the singularity is extremely close to the integration interval numerical simulations become more tedious but there is still a fairly good agreement with our predictions. Proceeding on to the pressure, we find

$$\begin{aligned} k\varepsilon^2 P &\approx \frac{1}{16\gamma(\phi - \phi_{\text{crit}})^2} - \frac{1}{4\sqrt{2\pi\beta\gamma}(\phi - \phi_{\text{crit}})^{3/2}} \\ &\quad + \frac{1}{2\pi\beta(\phi - \phi_{\text{crit}})}. \end{aligned} \quad (33)$$

This expression has a complex structure that cannot be fitted by a simple power law. This is because $\gamma \gg 1$ makes it impossible to drop out subdominant terms. We postpone an interpretation of this result to the discussion.

Discussion and outlook. – The isotropic-nematic transition shown here has been the subject of intense recent experimental work. This is particularly true in the context of shaken granular chains [6,7]. We believe this class of experiments (exemplified by a bouncing dimer [8]) to be especially relevant to our model because the shaking can be considered as the effective temperature giving rise to an energy scale central to our analysis. On the other hand, quasi-static experiments on the compaction of rods [4,5] also display the various nematic arrangements justified in this letter. Now that the geometrical properties of this transition are well understood, it would be nice to measure the mechanical ones to test them against our predictions. Numerical Hamiltonian walks [9–11] may be a promising candidate where such measurements could be achieved. In addition, we predict the existence of a second transition at very high density. The blow-up of

the pressure associated with this jamming transition has a complex structure. It turns out to be in qualitative agreement with previous predictions obtained in similar contexts: packed elastic polygons [12] and a phenomenological conjecture in quasi-static rod compaction experiments [4]. In any case, our result puts the existence of this jamming transition on firm ground. It may also help understand the lack of clear consensus between experiments looking for one single exponent (ranging between $1/3$ in [13] and $1/2$ in [14,15]). We would also like to point out an interesting connection with recent field-theoretical results for the Flory model. It can be shown [16] that a compact self-avoiding polymer on a 2-D lattice undergoes a melting transition (from an ordered, solid-like phase to a disordered, fluid-like phase) when the bending rigidity of the polymer is increased. Unlike previous mean-field predictions, the transition is found to be continuous which is consistent with our prediction despite significant differences between the two approaches.

The model put forward in this letter is open to a number of refinements. First of all, more realistic containers can be established by imposing stronger constraints. For example, using $\delta(\int ds \mathbf{R}^m/L - \ell^m)$ with $m \rightarrow +\infty$ represents a much sharper confining potential. Another possibility is to put a direct restriction on the available area in the spirit of [17]. The importance of plastic bending in real materials in the high-density regime will also be investigated in future work. Finally, one may wonder how far the mean-field theory is valid and find ways to go beyond this approximation (through Monte Carlo simulations for example.)

While we left out the dynamical behavior [10,18], certain aspects already suggest some similitude with glassy systems. Because of self-avoidance, some regions of the rod might get trapped in a given direction (phenomenon referred to as caging/reptation in the context of granular matter/polymers) preventing the rod from reaching its true ground state. On top of an extremely intricate energetic landscape this geometrical frustration will dramatically increase the relaxation times. We already understand that the dimensionless order parameter ξ (see eq. (30)) almost never becomes unity indicating a fundamental source of disorder at high packing density.

Yet, this disorder does not result from a quenching mechanism, but is self-generated. Anyway, this work falls into a new and growing avenue of research: the examination of athermal systems (dynamical systems in general) through the use of classical statistical physics tools.

We want to thank M. ADDA-BEDIA and A. BOUDAUD for encouraging discussions. This work was supported by the European Union Marie Curie PatForm (to EK). Laboratoire de Physique Statistique is associated with Universities Paris VI and Paris VII.

REFERENCES

- [1] EDWARDS S. F. and OAKESHOTT R. B. S., *Physica A*, **157** (1989) 1080.
- [2] KOGA T. and EDWARDS S. F., *J. Chem. Phys.*, **120** (2004) 8283; KATZAV E., ADDA-BEDIA M. and BOUDAUD A., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **103** (2006) 18900.
- [3] ONSAGER L., *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, **51** (1949) 627.
- [4] BOUÉ L. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **97** (2006) 166104.
- [5] BRITO V. P. *et al.*, *Physica A*, **342** (2004) 419; DONATO C. C., GOMES M. A. F. and DE SOUZA R. E., *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 026110.
- [6] BLAIR D. L., NEICU T. and KUDROLLI A., *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 031303.
- [7] GALANIS J. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **96** (2006) 028002.
- [8] DORBOLO S. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **95** (2005) 044101.
- [9] OBERDORF R. *et al.*, *Phys. Rev. E*, **74** (2006) 051801.
- [10] RAHMANI A. *et al.*, *J. Stat. Mech.* (2007) P09022.
- [11] DHAR D. and GHOSH A., *EPL*, **78** (2007) 20003.
- [12] DONEV A. *et al.*, *Phys. Rev. B*, **73** (2006) 054109.
- [13] SULTAN E. and BOUDAUD A., *Phys. Rev. Lett.*, **96** (2006) 136103.
- [14] MATAN K. *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **88** (2002) 076101.
- [15] ASTROM J. A., TIMONEN J. and KARTTUNEN M., *Phys. Rev. Lett.*, **93** (2004) 244301.
- [16] JACOBSEN J. L. and KONDEV J., *Phys. Rev. Lett.*, **92** (2004) 210601; *Phys. Rev. E*, **69** (2004) 066108.
- [17] DUPLANTIER B., *J. Phys. A: Math. Gen.*, **22** (1989) 3033.
- [18] JACOBSEN J. L., READ N. and SALEUR H., *Phys. Rev. Lett.*, **93** (2004) 038701.

The rabbit-hole went straight on like a tunnel for some way, and then dipped suddenly down, so suddenly that Alice had not a moment to think about stopping herself before she found herself falling down what seemed a deep well. Either the well was very deep, or she fell very slowly, for she had plenty of time as she went down to look about her, and to wonder what would happen next. Lewis Carroll (Alice's Adventures in Wonderland).

Cette thèse montre que le confinement d'une tige élastique dans un espace à 2 dimensions abonde de phénomènes physiques surprenants qui, jusque là, n'avaient jamais été explorés. En nous basant exclusivement sur quelques ingrédients fondamentaux (théorie de l'élasticité et contrainte d'auto-évitement), nous avons réussi à étudier de manière simultanée les propriétés mécaniques et géométriques du repliement de la tige dans plusieurs régimes de confinement. Cela nous a permis de mettre en évidence qu'en partant d'une situation idéale où la tige ne contient qu'un seul pli, les configurations se complexifient très rapidement au fur et à mesure que l'intensité du confinement augmente. Bien que ce système se place naturellement dans le domaine de la physique hors-équilibre, nous avons découvert que son paysage énergétique possède une mesure statistique sous-jacente très proche de la loi de Boltzmann. Cette observation laisse supposer que les structures plissées générées lors du confinement de la tige peuvent s'étudier dans le cadre de la physique statistique traditionnelle, démarche que nous avons adoptée à la fin de la thèse. Nous pensons que ces résultats constituent les premiers pas dans l'étude de ce système original et qu'ils ne pourront que contribuer au développement d'une théorie unifiée de la physique statistique des systèmes athermiques. Dans ce but, nous souhaitons conclure en proposant quelques prolongements que nous jugeons particulièrement attrayants :

1) Arrangement optimal - Condensation de Bose-Einstein ? Le but de l'expérience numérique du chapitre 4 était d'explorer le paysage énergétique de la tige. C'est pour cela que nous avons choisi d'augmenter brusquement le paramètre de contrôle Λ sélectionnant le rayon de gyration accessible à la tige (cf équation (4.8)). Cette opération, semblable à une trempe ("*quenching*") nous avait permis de faire des statistiques sur les configurations métastables de la tige et d'y établir de rôle principal joué par les branches. Toutefois, comme nous l'avons mentionné dans la section 4.2.6, il est aussi possible d'augmenter Λ

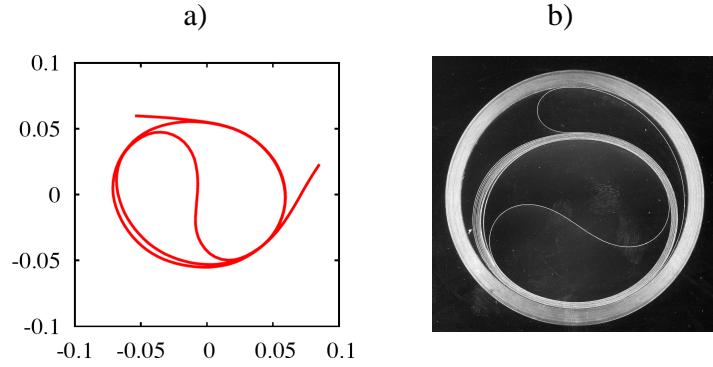


FIG. 6.1 – **a)** Configuration spiralée obtenue grâce à l’expérience numérique du chapitre 4 en diminuant infiniment doucement (quasi-statique) l’aire accessible à la tige. **b)** Configuration obtenue grâce à l’expérience décrite dans l’article reproduit à la fin du chapitre 3. Toutes les branches se superposent les unes sur les autres pour donner une configuration de type “Yin-Yang”.

très lentement, de manière à laisser la tige relaxer vers le minimum global de l’énergie. Après avoir implémenté cette nouvelle procédure, nous avons trouvé qu’il semble n’y avoir plus qu’un seul type de configuration possible : les configurations spirales en forme de “Yin-Yang” (figure 6.1 **a**). Ces configurations, où la tige s’enroule sur elle-même pour former une coque flexible spiralée enfermant une courbe en S, correspondent précisément aux configurations que nous avons découvertes à la fin de la cascade de bifurcations du chapitre 3 (figure 6.1 **b**). D’ailleurs, la transition entre la phase isotrope et la phase nématique (chapitre 5) prédit que pour des confinements suffisamment grands, les configurations deviennent ordonnées ce qui est cohérent avec l’émergence de configurations spirales. Tous ces résultats suggèrent que les configurations de type “Yin-Yang” constituent l’arrangement optimal de la tige élastique confinée, c’est à dire l’état de plus faible énergie. Ce résultat nous permet, d’une part, de fermer la boucle ouverte au début de la thèse, lors de la présentation des arrangements optimaux de sphères dures, en proposant les configurations “Yin-Yang” comme arrangement optimal des tiges élastiques confinées en 2D. (L’énergie de ces configurations est calculée dans l’appendice 7.4.) D’autre part, rappelons nous que l’élément “branche” est apparu à plusieurs reprises au cours de la thèse comme jouant le rôle de sous-constituant élémentaire de la tige (cf chapitre 3 et 4) nous permettant de construire la théorie statistique présentée dans le chapitre 5. Dans le cas d’une configuration “Yin-Yang”, toutes les branches sont superposées les unes aux autres (figure 6.1) et se retrouvent exactement dans le même état (même énergie, même longueur, même courbure). Cette observation est assez réminiscente de la statistique de Bose-Einstein où des particules de spins entiers peuvent occuper simultanément le même état quantique. Dès lors, il n’y a plus qu’un pas à franchir pour commencer à soupçonner que les branches puissent se comporter comme des “bosons” et que leurs propriétés statistiques soient décrites par une distribution de Bose-Einstein. Comme le nombre de branches n’est pas fixé à l’avance mais est auto-déterminé par le système, nous avons comparé la densité de probabilité (PDF) de l’énergie des branches \tilde{E}_{br} à une distribution de Bose-Einstein de potentiel chimique nul. En conservant les notations du chapitre 4, la

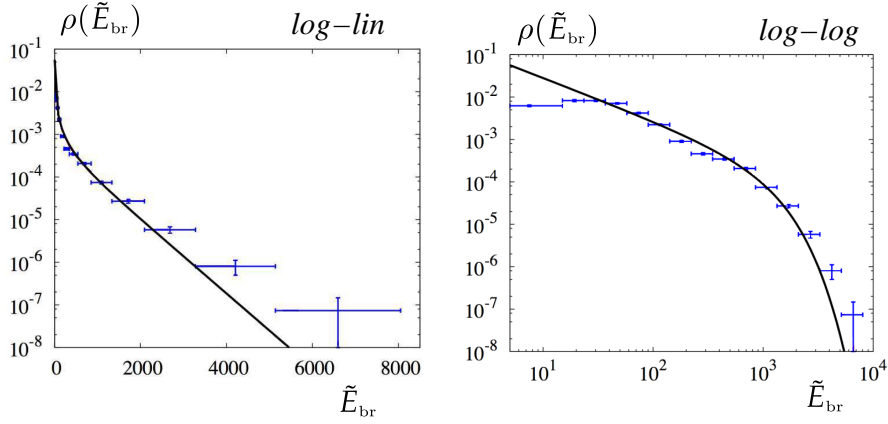


FIG. 6.2 – L’histogramme de l’énergie des branches est exactement le même que celui de la figure 4.12. La ligne continue montre qu’une distribution de Bose-Einstein décrit relativement bien les données numériques.

PDF de \tilde{E}_{br} est donnée par :

$$\rho(\tilde{E}_{\text{br}}) = \frac{\alpha}{\exp(\beta\tilde{E}_{\text{br}}) - 1} \quad \{\alpha = 0.56 \times 10^{-3}, \beta = 2 \times 10^{-3}\}.$$

Comme dans le chapitre 4, les paramètres α et β sont directement fixés par les données numériques et nous ne faisons que choisir un ajustement des données par une loi de Bose-Einstein. La figure 6.2 montre qu’il y a un bon accord, qualitativement comparable à celui de la figure 4.12. Cela signifie qu’en plus d’être dans l’état fondamental, les configurations “Yin-Yang” pourraient correspondre à un condensat de toutes les branches dans le même état et être “analogues” à un condensat de Bose-Einstein en physique quantique. Bien que cette observation soit encourageante, il ne s’agit, à ce stade, que d’une conjecture qui méritera d’être plus approfondie dans le futur de manière à mieux comprendre les possibles ressemblances entre les deux phénomènes.

2) Origine de la température effective ? Le chapitre 4 montre qu’il existe une échelle d’énergie caractéristique donnant naissance à une queue exponentielle dans la distribution de l’énergie des branches. Ce résultat indique que même en l’absence de bruit thermique le paysage énergétique de la tige continue à être exploré, ce qui a motivé notre approche sous l’angle de la physique statistique. Pour l’instant, il s’agit d’une température “effective” que nous sommes capables de mesurer, mais pas encore d’associer clairement à un phénomène physique permettant de la sélectionner. Il reste beaucoup de travail pour déterminer l’influence de l’intensité du confinement, de la friction inter-branches et de l’élasticité de la tige (à travers son module de rigidité) avant de savoir à quoi cette énergie caractéristique correspond vraiment.

Du point de vue de l’expérience numérique, un prolongement intéressant serait de faire des cycles d’oscillations du paramètre de contrôle Λ . Ceci permettrait d’éclaircir cette question en utilisant des relations de fluctuation-dissipation. D’autre part, les expériences associées aux simulations numériques du chapitre 4 (décrites plus en détail dans [100]) montrent déjà que cette température effective s’équilibre entre des sous-systèmes géo-



FIG. 6.3 – “Crumpled paper” (J. H. Waterborg, University of Missouri-Kansas City.)

métriquement différents. Afin de s’assurer qu’il s’agit bien de l’équivalent d’une vraie température, il reste à déterminer si notre température effective est aussi intensive.

3) Vieillessement - Aspects dynamiques ? Comme nous l’avons expliqué dans l’article joint au chapitre 5, la complexité du paysage énergétique, associée à la frustration géométrique de non-interpénétrabilité, suggère que le comportement d’une tige élastique confinée rentre naturellement dans la classe des systèmes vitreux. Il serait intéressant de voir comment généraliser notre théorie de manière à inclure une évolution dynamique. Dans cette optique, il serait avantageux de définir un nouveau tenseur d’orientation de la forme suivante :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) = \int ds R'_i(s, t) R'_j(s, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(s, t))$$

Dans ce cas, la quantité sur laquelle il faudrait se concentrer serait la fonction de corrélation du tenseur d’orientation dynamique entre un temps t_w (temps d’attente) et le temps final t grâce à une fonction à quatre points du type :

$$G_4(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t_w) = \langle \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) \sigma_{\ell m}(\mathbf{r}', t + t_w) \rangle$$

En raison de l’importance du confinement et de l’auto-évitement dans cette géométrie bi-dimensionnelle, nous nous attendons à ce que les propriétés dynamiques possèdent des caractéristiques originales et non-triviales comparées aux modèles de reptation de polymères. Une telle généralisation de notre théorie permettrait de comprendre l’origine des temps de relaxation effectivement très longs observés dans les expériences de vibration de tiges que nous avons présentées dans la section 1.3.4.

4) Généralisation à des dimensions supérieures ? Nous avons commencé à développer une nouvelle théorie des champs pour étudier les propriétés statistiques d’une plaque élastique (figure 6.3). L’idée est de suivre une approche similaire à celle du chapitre 5 en écrivant une fonction de partition ne prenant en compte que les ingrédients minimaux. Contrairement au cas des tiges (1D), le froissement d’une surface (2D) produit des singularités géométriques (plis et d-cones, voir section 1.3.3). En plus de l’exposant de rugosité, il serait intéressant de trouver les équations d’état d’une feuille de papier froissée (pression en fonction du volume par exemple...).

7.1 Instabilité de flambage

Cet appendice présente les détails de l'instabilité de flambage d'une tige élastique plongée dans un potentiel quadratique (cf chapitre 4).

Euler-Lagrange De manière à rester fidèle aux notations utilisées dans le texte, les configurations de la tige sont représentées par le vecteur $\mathbf{R}(s) = \{x(s), y(s)\}$ paramétrisé par l'abscisse curviligne s . L'énergie totale de la tige s'écrit comme la somme de son énergie de flexion et de son énergie de confinement (cf équation (4.1)) :

$$E_{\text{total}} = \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 ds + \frac{\lambda}{2} \int_0^L \mathbf{R}^2(s) ds, \quad (7.1)$$

où $\theta(s)$ représente l'angle entre le vecteur tangent à la tige au point s et l'axe fixe \mathbf{x} . Les coordonnées de $\mathbf{R}(s)$ sont données par :

$$\frac{dx}{ds} = \cos \theta \quad \text{et} \quad \frac{dy}{ds} = \sin \theta. \quad (7.2)$$

On peut alors ré-écrire l'énergie (7.1) en introduisant deux multiplicateurs de Lagrange $\gamma(s)$ et $\eta(s)$:

$$\begin{aligned} E_{\text{total}} &= \frac{B}{2} \int_0^L \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 ds + \frac{\lambda}{2} \int_0^L (x^2 + y^2) ds \\ &+ \int_0^L \gamma(s) \left(\frac{dx}{ds} - \cos \theta \right) ds + \int_0^L \eta(s) \left(\frac{dy}{ds} - \sin \theta \right) ds. \end{aligned} \quad (7.3)$$

La minimisation de l'équation ci-dessus par rapport à $\theta(s)$, $x(s)$ et $y(s)$ donne les équations suivantes :

$$B \frac{d^2\theta}{ds^2} - \gamma \sin \theta + \eta \cos \theta = 0, \quad (7.4)$$

$$\frac{d\gamma}{ds} = \lambda x, \quad (7.5)$$

$$\frac{d\eta}{ds} = \lambda y. \quad (7.6)$$

Stabilité linéaire Comme nous ne nous intéressons qu'au seuil de flambage, il suffit de considérer les petites déflexions autour de $\theta = 0$. À l'ordre le plus bas, on peut écrire $x = s$ et utiliser l'approximation linéaire $d\theta/ds = d^2y/dx^2$. Dans ce cas, $\eta = 0$ et on obtient :

$$\gamma = \frac{-\lambda}{2} (L^2 - x^2), \quad (7.7)$$

où nous avons utilisé la condition au bord $\gamma(0) = -\lambda L^2/2$ pour intégrer l'équation (7.5). Cette condition sur la force $\lambda(s)$ signifie qu'une des extrémités de la tige se trouve au centre $\{x = 0, y = 0\}$ du potentiel quadratique. L'équation (7.4) devient alors :

$$\frac{d^3y}{dx^3} + \frac{\lambda}{2B} (L^2 - x^2) \frac{dy}{dx} = 0. \quad (7.8)$$

En introduisant la fonction intermédiaire :

$$\omega(x) = y'(x) \quad (7.9)$$

et en faisant les changement de variables suivants :

$$X = \sqrt{2} \left(\frac{\lambda}{2B} \right)^{1/4} x \quad \text{et} \quad \nu = -\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{\frac{\lambda L^4}{2B}} \right), \quad (7.10)$$

on peut alors ré-écrire l'équation (7.8) sous la forme d'une équation de Weber :

$$\omega''(X) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{X^2}{4} \right) \omega(X) = 0. \quad (7.11)$$

Les solutions s'expriment à l'aide des fonctions du cylindre parabolique [108] :

$$\omega(X) = c_1 D_\nu(X) + c_2 D_{-\nu-1}(iX). \quad (7.12)$$

Les conditions aux bords à prescrire pour déterminer les constantes c_1 et c_2 sont :

- **Orientation de la tangente.** Grâce à la symétrie de rotation du potentiel quadratique, il suffit d'imposer $\omega(0) = 0$ ce qui donne :

$$\frac{2^\nu c_1}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} + \frac{c_2}{\sqrt{2} \Gamma\left(\frac{2+\nu}{2}\right)} = 0 \quad (7.13)$$

- **Extrémité libre.** Puisque la tige n'est soumise à aucun moment localisé en son autre extrémité, on impose que ω' doit s'annuler en $x = L$. Avec les changements de variables (7.10), cela signifie que :

$$\omega'(\sqrt{2(2\nu+1)}) = 0. \quad (7.14)$$

En ré-insérant (7.13) dans (7.14), on obtient une équation complexe aux valeurs propres

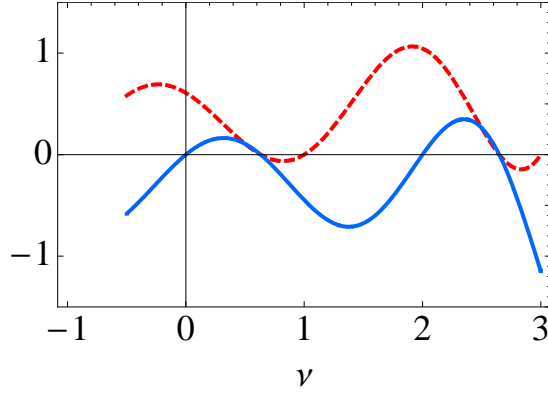


FIG. 7.1 – Graphe des équations [7.15-7.16]. Les deux fonctions s’annulent simultanément en $\nu_{\text{crit}} \approx 0.63$. ce qui détermine le seuil de flambage de la tige.

déterminant ν . Dans ce cas, il s’agit de trouver la première valeur de ν qui annule simultanément les parties réelles et imaginaires. La partie réelle de l’équation découlant de la condition (7.14) donne :

$$\begin{aligned} & \frac{2^\nu \Gamma\left(\frac{2+\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} \left(\sqrt{1+2\nu} \operatorname{Re} \left[D_{-\nu-1} \left(i\sqrt{2+4\nu} \right) \right] - \sqrt{2} \operatorname{Im} \left[D_{-\nu} \left(i\sqrt{2+4\nu} \right) \right] \right) \\ & + \frac{\sqrt{2+4\nu}}{2} \operatorname{Re} \left[D_\nu \left(\sqrt{2+4\nu} \right) \right] - \operatorname{Re} \left[D_{\nu+1} \left(\sqrt{2+4\nu} \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Sa partie imaginaire donne :

$$\begin{aligned} & \frac{2^\nu \Gamma\left(\frac{2+\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} \left(\sqrt{1+2\nu} \operatorname{Im} \left[D_{-\nu-1} \left(i\sqrt{2+4\nu} \right) \right] + \sqrt{2} \operatorname{Re} \left[D_{-\nu} \left(i\sqrt{2+4\nu} \right) \right] \right) \\ & + \frac{\sqrt{2+4\nu}}{2} \operatorname{Im} \left[D_\nu \left(\sqrt{2+4\nu} \right) \right] - \operatorname{Im} \left[D_{\nu+1} \left(\sqrt{2+4\nu} \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (7.16)$$

On détermine alors numériquement, par la méthode de Newton, la première valeur de ν qui satisfait simultanément aux équations (7.15) et (7.16) (voir figure 7.1) :

$$\nu_{\text{crit}} \approx 0.63. \quad (7.17)$$

En utilisant la définition de ν (cf équation (7.10)) on retrouve bien le seuil de flambage annoncé dans le chapitre 4 (cf équation (4.5)) :

$$L_{\text{crit}} \approx 1.8 \left(\frac{B}{\lambda} \right)^{1/4}. \quad (7.18)$$

7.2 Géométrie statistique

Distribution exponentielle Considérons une tige de longueur ℓ_0 sur laquelle on distribue des points de manière aléatoire. Nous imposons, tout de même, un nombre moyen

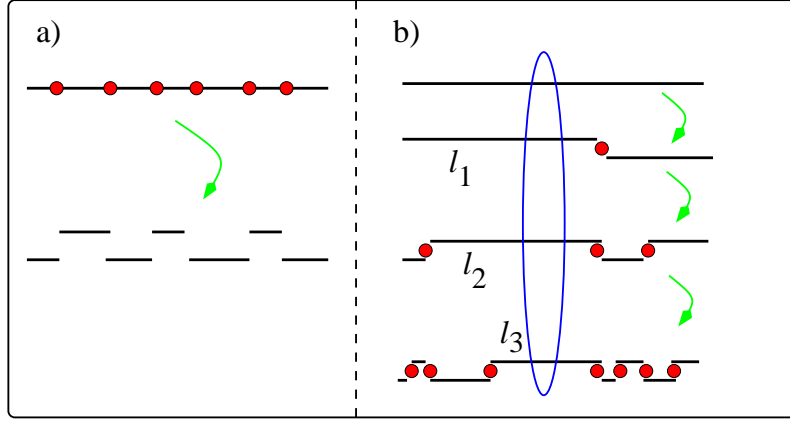


FIG. 7.2 – Les points rouges désignent les emplacements de points de coupure de la tige. **a)** La position des points est aléatoire mais distribuée avec un nombre moyen de points N_0 par unité de longueur (voir texte). Ce découpage résulte en une distribution exponentielle de la taille des segments. **b)** Découpage hiérarchique de l'intervalle initial. Nous avons représenté les 3 premières étapes du découpage. La longueur du segment contenue dans l'ellipse bleue est : $\ell = \ell_1 \ell_2 \ell_3$. Après $n \gg 1$ étapes on obtient 2^n segments dont la taille suit une distribution log-normale.

de points par unité de longueur noté N_0 . La quantité intéressante est la statistique des longueurs des segments de la tige situés entre deux points successifs (voir figure 7.2 a). Il est possible de montrer que cette “fragmentation” stochastique de l'intervalle initial suit un processus de Poisson [109, 110]. Ceci implique que la probabilité de trouver exactement n points à l'intérieur d'un segment de longueur ℓ , notée $P(n|\ell)$, est donnée par des statistiques binomiales. Dans la limite $\ell \ll \ell_0$ (approximation de la tige infinie, équivalente à la limite de grand nombre d'essais), les statistiques binomiales se réduisent à la distribution de Poisson et l'on a :

$$P(n|\ell) = (N_0 \ell)^n \frac{e^{-N_0 \ell}}{n!}. \quad (7.19)$$

Calculons tout d'abord la probabilité de ne trouver aucun point à l'intérieur d'un segment de taille ℓ . Il suffit de prendre $n = 0$ dans l'équation (7.19) pour trouver :

$$P(0|\ell) = e^{-N_0 \ell}.$$

Concentrons nous maintenant un élément de longueur infinitésimale $d\ell$ situé à l'une des extrémités du segment considéré ci-dessus. La probabilité pour que cette extrémité contienne un point est donnée par :

$$P(1|d\ell) = N_0 d\ell.$$

La position d'un point étant complètement décorrélée de la position des autres, la probabilité de trouver un segment dont la longueur est comprise entre ℓ et $\ell + d\ell$ est simplement :

$$dP = P(0|\ell) P(1|d\ell) = N_0 e^{-N_0 \ell} d\ell.$$

Ceci permet de déterminer immédiatement la densité de probabilité de longueur des segments $\rho(\ell) = dP/d\ell$, soit :

$$\rho(\ell) = N_0 e^{-N_0 \ell}. \quad (7.20)$$

La densité de probabilité de longueur des segments issus d'un découpage aléatoire d'une tige décroît selon une exponentielle avec une distance caractéristique $1/N_0$.

Distribution log-normale Considérons maintenant un mécanisme de “fragmentation” stochastique différent. Il s'agit de la division hiérarchique illustrée sur la figure (7.2 **b**). Contrairement au cas discuté dans le paragraphe précédent, la tige est maintenant découpée itérativement en morceaux de tailles différentes [111]. La longueur de coupure ℓ_i de ces segments est une variable aléatoire issue d'une densité de probabilité possédant une moyenne μ et une variance σ^2 bien définis. Commençons par diviser l'intervalle initial en deux morceaux de tailles inégales. Ces deux morceaux sont ensuite eux mêmes re-découpés en deux nouveaux morceaux plus petits. Au bout de n itérations nous obtenons finalement 2^n segments. Si l'on isole un de ces segments (bas de l'ellipse bleue sur la figure 7.2 **b**), sa longueur est :

$$\ell = \prod_{i=1}^n \ell_i \quad (7.21)$$

où les ℓ_i mis en jeu ne correspondent qu'aux segments des $n - 1$ générations de coupure précédentes contenus dans l'ellipse bleue (les “*ancêtres*” du segment que nous avons isolé). On peut alors prendre le logarithme de ℓ qui devient une somme de variables aléatoires :

$$\log \ell = \sum_{i=1}^n \ell_i$$

D'après le théorème centrale limite, cette somme converge vers une distribution normale de moyenne $\bar{\mu} = n\mu$ et de variance $\bar{\sigma}^2 = n\sigma^2$ quand $n \rightarrow \infty$. La densité de probabilité converge donc vers :

$$\rho(\log \ell) = \frac{1}{\bar{\sigma}^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\log \ell - \bar{\mu})^2}{2\bar{\sigma}^2}\right).$$

Il suffit de faire un changement de variable $\ell \rightarrow \exp(L)$ pour obtenir la densité de probabilité de longueur des segments. La probabilité contenue dans un élément différentiel devant être invariante du changement de variable :

$$|\rho(\ell)d\ell| = |\rho(L)dL|,$$

on obtient alors immédiatement la distribution des longueurs :

$$\rho(L) = \frac{1}{L \bar{\sigma}^2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\log L - \bar{\mu})^2}{2\bar{\sigma}^2}\right). \quad (7.22)$$

La distribution log-normale apparaît comme une conséquence de la division hiérarchique la tige en morceau de plus en plus petit. C'est ce mécanisme de formation et subdivision des plis dans une boulette de papier froissé qui avait été proposé dans [112] avant d'être observé expérimentalement dans [48, 59, 58]. De manière générale, cette distribution s'applique dès que la quantité d'intérêt résulte d'un produit d'un grand nombre de variables aléatoires indépendantes.

Distribution gamma Considérons un ensemble de n variables aléatoires indépendantes $\{X_1, \dots, X_n\}$ distribuées selon une loi exponentielle de moyenne λ . Comme dans l'équation (7.20), leur densité de probabilité est donnée par :

$$f_i(t) = \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) \quad i = \{1, \dots, n\}.$$

Notons Z la variable aléatoire définie comme la somme des n variables aléatoires précédentes :

$$Z = \sum_{i=1}^n X_i$$

Puisque nous supposons les X_i toutes indépendantes les unes des autres, la densité de probabilité de Z , notée $h(z)$, est donné par la multi-convolution :

$$h(z) = \iint \dots \int f_1(t_1) f_2(t_2) \dots f_k(z - t_1 - t_2 \dots - t_{k-1}) dt_1 dt_2 \dots dt_{k-1}.$$

On peut alors montrer que $h(z)$ correspond à une distribution gamma déterminée par deux paramètres n (paramètre de forme) et λ (paramètre d'échelle) [113] :

$$h(z) = \frac{z^{n-1} \exp(-z/\lambda)}{\Gamma(n) \lambda^n}, \quad (7.23)$$

où $\Gamma(n)$ est la fonction gamma. Le cas particulier d'un seul élément dans la somme ($n = 1$) redonne bien une distribution exponentielle de moyenne $1/\lambda$. Cela montre qu'une distribution gamma est compatible avec l'interaction de n sous-systèmes distribués selon une loi exponentielle. La formule (7.23) définissant une distribution gamma est aussi valable pour des n non-entiers. Dans ce cas l'interprétation en terme d'interactions entre sous-systèmes est moins évidente.

7.3 Transformée de Fourier généralisée

Au cours du chapitre 5, nous sommes amenés à utiliser des transformées de Fourier qui, au lieu de porter sur un scalaire, portent directement sur une fonction. Cet appendice est consacré à une explication intuitive de l'idée de base derrière ces transformées de Fourier généralisées.

Supposons que l'on dispose d'une fonction à une variable $x(s)$. Si l'on souhaite imposer que cette fonction soit identiquement nulle, il faut écrire une contrainte du type :

$$x(s) = 0 \quad \forall s \in \mathbb{R} \quad \implies \quad \delta(x(s)). \quad (7.24)$$

De manière générale, les fonctions δ sont difficiles à manipuler et il est avantageux de les remplacer par une transformée de Fourier. Cependant, ceci n'est pas possible dans l'équation (7.24) car x dépend continûment du paramètre s . L'idée consiste alors à discrétiser le paramètre s avec $ds = 1/N$ avant de prendre la limite $N \rightarrow +\infty$ pour se replacer dans la limite continue. Dans ce cas, la contrainte peut se ré-écrire sous la forme :

$$\delta(x(s)) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{i=-N}^{i=N} \delta(x_i), \quad (7.25)$$

où $x_i = x(s_i)$. Il est possible, maintenant, de transformer toutes les fonctions δ de manière classique car x_i est un scalaire. En introduisant $q_i = q(s_i)$, on obtient immédiatement :

$$\delta(x) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{i=-N}^{i=N} \int dq_i \exp(iq_i x_i), \quad (7.26)$$

$$= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\prod_{i=-N}^{i=N} \int dq_i \right) \exp \left(i \sum_{i=-N}^{i=N} q_i x_i \right). \quad (7.27)$$

En ré-écrivant la somme dans l'exponentielle sous forme continue, les modes de Fourier deviennent un champ conjugué $q(s)$ et on a :

$$\delta(x) = \int D[q] \exp \left(i \int q(s) x(s) \right). \quad (7.28)$$

Nous retrouvons bien la formule que nous utilisons au cours du chapitre 5. Les propriétés de convergence dépassent le cadre de cet appendice et nous renvoyons le lecteur à [114] pour plus de détails sur la théorie et les applications des intégrales de chemin.

Approximation de champ moyen L'approximation de champ moyen consiste à supposer que le champ conjugué $q(s)$ est en fait indépendant de s : $q(s) = q$. Dans ce cas, l'équation (7.28) s'écrit :

$$\delta(x) = \int dq \exp \left(iq \int ds x(s) \right). \quad (7.29)$$

et ressemble un peu plus à une transformée de Fourier classique sauf qu'elle contient une intégrale à l'intérieur de l'exponentielle. Ceci signifie qu'au lieu que $x(s) \equiv 0$, c'est maintenant seulement la valeur moyenne de x qui doit s'annuler :

$$\int ds x(s) = \langle x \rangle = 0. \quad (7.30)$$

Dans cette approximation, les fluctuations de $x(s)$ autour de sa valeur moyenne sont négligées et seule la valeur moyenne contribue.

7.4 Configurations Yin-Yang

Cet appendice est consacré à une étude plus détaillée des configurations de type Yin-Yang. Supposons qu'une tige fermée, de longueur totale L et d'épaisseur h se replie en tournant sur elle-même à l'intérieur d'un disque rigide de rayon R . Au bout de N tours elle donne un arrangement en forme de spirale laissant un "cœur" vide de rayon R_c (voir figure 7.3) :

$$R_c = \sqrt{(S - Lh)/\pi} \quad (7.31)$$

où $S = \pi R^2$ est l'aire accessible à l'intérieur du disque. En additionnant le "cœur" vide et la partie occupée par la tige spiralée, on obtient la relation géométrique :

$$R = Nh + R_c. \quad (7.32)$$

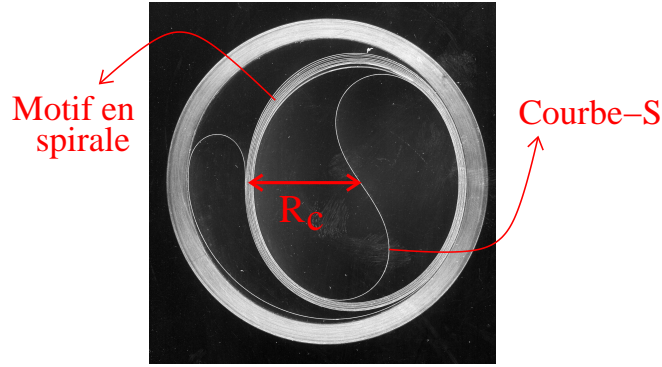


FIG. 7.3 – Exemple expérimental d'une configuration yin-yang obtenue lors du chapitre 3.

Grâce à la symétrie de révolution de la spirale on peut effectuer un changement de variable pour exprimer le nombre de tours en fonction de l'angle radial $\theta = 2\pi N$. Pour chaque tour effectué autour de R_c le rayon de la spirale augmente de h . On peut donc écrire :

$$r(\theta) = \frac{\theta h}{2\pi} + R_c. \quad (7.33)$$

L'énergie élastique du motif en spirale est alors donnée par :

$$E_{\text{spiral}} = \frac{B}{2} \int_0^L \frac{ds}{r^2(\theta)} = \frac{B}{2} \int_0^{2\pi N} \frac{d\theta}{r(\theta)}. \quad (7.34)$$

ce qui donne après intégration :

$$E_{\text{spiral}} = \frac{B\pi}{h} \log \left(1 + \frac{Nh}{R_c} \right). \quad (7.35)$$

Il ne reste plus qu'à déterminer le nombre de tours nécessaire pour produire ce motif pour obtenir E_{spiral} . On utilise, pour cela, la conservation de la longueur totale de la tige :

$$L = \int_0^L ds = \int_0^{2\pi N} \frac{d\theta}{\kappa(\theta)}. \quad (7.36)$$

Cette identité donne une équation polynomiale du deuxième degré en N :

$$N^2 + \frac{2R_c}{h}N = \frac{L}{\pi h} \Rightarrow N = \frac{1}{h} \sqrt{R_c^2 + \frac{Lh}{\pi}} - \frac{R_c}{h}. \quad (7.37)$$

En ré-injectant la valeur de N dans l'expression (7.35), on obtient :

$$E_{\text{spiral}} = \frac{B\pi}{2h} \log \left(1 + \frac{Lh}{\pi R_c^2} \right). \quad (7.38)$$

Nous définissons une mesure du taux de compaction ρ basée sur la proportion d'aire occupée par la tige :

$$\rho = \frac{Lh}{S} \quad (7.39)$$

En utilisant l'expression de R_c nous pouvons finalement écrire l'énergie élastique de la spirale en fonction du taux d'occupation ρ :

$$E_{\text{spirale}} = \frac{B\pi}{2h} \log \frac{1}{1-\rho}. \quad (7.40)$$

La deuxième partie des configurations Yin-Yang correspond à la courbe en forme de S piégée à l'intérieur de la coquille spiralée. Puisque la taille linéaire accessible à cette courbe est R_c , son énergie élastique est proportionnelle à B/R_c . En faisant intervenir le taux d'occupation, cela donne :

$$E_{\text{courbe-S}} = \alpha \frac{\sqrt{\pi}B}{\sqrt{S}} \frac{1}{\sqrt{1-p}}, \quad (7.41)$$

où le préfacteur $\alpha \approx 17.44$ est déterminé numériquement par la méthode du tir comme dans le chapitre 3. En additionnant l'énergie du motif spiral et celle de la courbe S, l'énergie totale des configurations Yin-Yang est donnée par :

$$E_{\text{total}} = \frac{B\pi}{2h} \log \frac{1}{1-\rho} + \alpha \frac{\sqrt{\pi}B}{\sqrt{S}} \frac{1}{\sqrt{1-p}}. \quad (7.42)$$

Nous retrouvons bien l'expression qui était présentée dans l'article joint au chapitre 3.

7.5 Communications scientifiques

Publications

- Laurent Boué, Mokhtar Adda-Bedia, Arezki Boudaoud, Davide Cassani, Yves Couder, Antonin Eddi et Miguél Trejo, *Physical Review Letters* **97**, 166104 (2006).
- Laurent Boué et Eytan Katzav, *Europhysics Letters* **80**, 54002 (2007).

Interventions dans des conférences

- International Symposium on Trends in Applications of Mathematics to Mechanics @ Vienne, Autriche (2006).
- Rencontres du non-linéaire @ Institut Henri Poincaré, Paris (2006,2007).
- Journées de physique statistique @ ESPCI, Paris (2006,2007).
- MechPlant Meeting @ Berne, Suisse (2007).
- American Physical Society Meeting @ New Orleans, USA (2008).
- GDR, Mécanique et Physique Multi-Échelle @ ESPCI, Paris (2008).
- Institute for Mathematics and its Applications, Geometrical Singularities and Singular Geometries @ Minneapolis, USA (2008).

Séminaires invités

- Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences @ Leipzig, Allemagne (2006).
- Hebrew University, Racah Institute of Physics @ Jérusalem, Israël (2007).
- University of Arizona, Department of Applied Mathematics @ Tucson, USA (2008).
- Harvard University, Widely Applied Mathematics @ Boston, USA (2008).

Bibliographie

- [1] J. Kepler, “The Six-Cornered Snowflake” (1611), traduction par L. L. Whyte, Oxford Univ. Press (1966).
- [2] T. C. Hales, “A Proof of the Kepler Conjecture”, *Annals of Mathematics* **162**, 1065-1185 (2005) + *Discrete and Computational Geometry* **36** #1, 5-265 (2006).
- [3] J.H. Conway et N. J. A. Sloane, “Sphere Packings, Lattices and Groups”, A Series of Comprehensive Studies in Mathematics Springer-Verlag (1998).
- [4] C. E. Shannon, “A Mathematical Theory of Communication” *Bell System Technical Journal* **27**, 379-423 623-656 (1948).
- [5] A. Scardicchio, F. H. Stillinger and S. Torquato, “Estimates of the Optimal Density of Sphere Packings in High Dimensions” *Journal of Mathematical Physics* **49** 043301 (2008).
- [6] F. Soddy, “The Kiss Precise”, *Nature* **137**, 1021 (1936).
- [7] B. B. Mandelbrot, “The Fractal Geometry of Nature”, New York, NY : W. H. Freeman and Company, (1982).
- [8] R. Mahmoodi Baram, H.J. Herrmann, N. Rivier, “A space filling bearing in three dimensions”, *Physical Review Letters* **92**, 044301 (2004).
- [9] G. Lind, R. Mahmoodi Baram, H.J. Herrmann, “Obtaining the size distribution of fault gauges with polydisperse bearings”, *Physical Review E* **77**, 021304 (2008).
- [10] H.J. Herrmann, G. Mantica, D. Bessis, “Space-filling bearings”, *Physical Review Letters* **65**, 3223-3226 (1990).
- [11] S.S. Manna, H.J. Herrmann, “Precise determination of the fractal dimensions of Apollonian packing and space-filling bearings”, *Journal of Physics A : Mathematical and General* **24**, L481-L490 (1991).
- [12] J. D. Bernal et J. Mason, “Packing of Spheres : Co-ordination of Randomly Packed Spheres”, *Nature* **188**, 910-911 (1960).
- [13] G. Y. Onoda et E. G. Liniger, “Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset” *Physical Review Letters* **64**, 2727-2730 (1990).

- [14] E. R. Nowak, J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger et S. R. Nagel, “Density fluctuations in vibrated granular materials” *Physical Review E* **57**, 1971-1982 (1998).
- [15] A. J. Liu et S. R. Nagel, “Nonlinear dynamics : Jamming is not just cool any more” *Nature* **396**, 21-22 (1998).
- [16] G. Parisi et F. Zamponi, “Replica approach to glass transition and jammed states of hard spheres” à paraître dans *Reviews of Modern Physics* (2009), disponible sur arXiv 0802.2180.
- [17] S. Torquato, T. M. Truskett et P. G. Debenedetti, “Is Random Close Packing of Spheres Well Defined?”, *Physical Review Letters* **84**, 2064 (2000).
- [18] A. Donev, I. Cisse, D. Sachs, E. A. Variano, F. H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato et P. M. Chaikin, “Improving the Density of Jammed Disordered Packings Using Ellipsoids”, *Science* **303**, 990-993 (2004).
- [19] M Sedegah, R Hedstrom, P Hobart et S L Hoffman, “Protection against malaria by immunization with plasmid DNA encoding circumsporozoite protein” *The Proceedings of the National Academy of Sciences USA* **91**, 9866-9870 (1994).
- [20] O. Stüve, T. N. Eagar, E. M. Frohman et P. D. Cravens, “DNA Plasmid Vaccination for Multiple Sclerosis” *Archives of Neurology* **64**, 1385-1386 (2007).
- [21] D’Arcy W. Thompson, “On Growth and Form” Dover edition 1992.
- [22] E.Farge, “Mechanical Induction of Twist in the Drosophila Fore-Gut/Stomodéal Primordium” *Current Biology* **13** 1365-1377 (2003).
- [23] J. Dumais, “Can mechanics control pattern formation in plants?” *Current Opinion in Plant Biology* **10**, 58-62 (2007).
- [24] J. H. Brackenbury, “Wing folding and free-flight kinematics in Coleoptera (Insecta) : a comparative study” *Journal of Zoology (London)* **232**, 253-283 (1994).
- [25] H. Kobayashi, B. Kresling et J. F. V. Vincent, “The geometry of unfolding tree leaves” *Proceedings of the Royal Society B* **265**, 147-154.
- [26] N. Bowden, S. Brittain, A. G. Evans, J. W. Hutchinson et G. M. Whitesides, “Spontaneous formation of ordered structures in thin films of metals supported on an elastomeric polymer” *Nature* **393**, 146-149 (1998).
- [27] B. Audoly et A. Boudaoud, “Buckling of a stiff film bound to a compliant substrate—Part III : Herringbone solutions at large buckling parameter” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **56**, 2444-2458 (2008).
- [28] D. S. A. De Focatiis et S. D. Guest, “Deployable membranes designed from folding tree leaves” *Philosophical Transactions of the Royal Society A* **360**, 227-238 (2002).
- [29] K. Kuribayashi, K. Tsuchiya, Z. You, D. Tomus, M. Umemoto, T. Ito et M. Sasaki, “Self-deployable origami stent grafts as a biomedical application of Ni-rich TiNi shape memory alloy foil” *Materials Science and Engineering A* **419**, 131-137 (2006).
- [30] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, “Course of Theoretical Physics, volume 7 : Theory of Elasticity” 3rd edn. London : Butterworth-Heinemann (1997).
- [31] A. E. Love, “A treatise on the mathematical theory of elasticity” New York : Dover (1944).

- [32] E. M. Kramer, “The von Karman equations, the stress function, and elastic ridges in high dimensions” *Journal of Mathematical Physics* **38**, 830 (1997).
- [33] H. Brezis et F. Browder, “Partial Differential Equations in the 20th Century” *Advances in Mathematics* **135**, 76-144 (1998).
- [34] J. Nash, “ C^1 -isometric embeddings” *Annals of Mathematics* **60**, 383-396 (1954).
- [35] E. M. Kramer et T. A. Witten, “Stress Condensation in Crushed Elastic Manifolds” *Physical Review Letters* **78**, 1303-1306 (1997).
- [36] S. C. Venkataramani, T. A. Witten, E. M. Kramer, R. P. Geroch, “Limitations on the smooth confinement of an unstretchable manifold” *Journal of Mathematical Physics* **41**, 5107-5128 (2000).
- [37] B. A. DiDonna, T. A. Witten, S. C. Venkataramani et E. M. Kramer, “Singularities, structures, and scaling in deformed m-dimensional elastic manifolds” *Physical Review E* **65** 016603 (2001).
- [38] S. S. Antman, “Nonlinear Problems of Elasticity” Springer, New York (1995).
- [39] T. A. Witten, “Stress Focusing in Elastic Sheets” *Reviews of Modern Physics* **79**, 643 (2007).
- [40] A. Lobkovsky, S. Gentges, H. Li, D. Morse et T. A. Witten, “Scaling Properties of Stretching Ridges in a Crumpled Elastic Sheet” *Science* **270** 1482-1485 (1995).
- [41] A. E. Lobkovsky, “Boundary Layer Analysis of the Ridge Singularity in a Thin Plate” *Physical Review E* **53**, 3750-3760 (1996).
- [42] A. E. Lobkovsky et T. A. Witten, “Properties of Ridges in Elastic Membranes” *Physical Review E* **55**, 1577-1589 (1997).
- [43] M. Ben Amar et Y. Pomeau, “Crumpled paper” *Proceedings of the Royal Society A* **453** #1959, 729-755 (1997).
- [44] M. Ben Amar et Y. Pomeau, “Anatomie du papier froissé” *La Recherche* **282**, 45-47 (1995).
- [45] S. Chaïeb, F. Melo et J. C. Giéminard, “Experimental Study of Developable Cones” *Physical Review Letters* **80** 2354-2357 (1998).
- [46] S. Chaïeb et F. Melo, “Crescent singularities and stress focusing in a buckled thin sheet : Mechanics of developable cones” *Physical Review E* **60**, 6091-6103 (1999).
- [47] E. Cerda, S. Chaïeb, F. Melo et L. Mahadevan, “Conical dislocations in crumpling” *Nature* **401** 46-49 (1999).
- [48] D.L. Blair et A. Kudrolli, “The geometry of crumpled paper” *Physical Review Letters* **94**, 166107 (2005).
- [49] S. C. Venkataramani, “Lower bounds for the energy in a crumpled elastic sheet - A minimal ridge” *Nonlinearity* **17**, 301-312 (2004).
- [50] E. Cerda et L. Mahadevan, “Conical Surfaces and Crescent Singularities in Crumpled Sheets” *Physical Review Letters* **80** 2358-2361 (1998).
- [51] T. Mora et A. Boudaoud, “Thin elastic plates : On the core of developable cones” *Europhysics Letters* **59**, 41-47 (2002).

- [52] G. A. Vliegenthart et G. Gompper, “Forced crumpling of self-avoiding elastic sheets” *Nature Materials* **5**, 216-221 (2006).
- [53] A. Boudaoud, P. Patrício, Y. Couder et M. Ben Amar, “Dynamics of singularities in a constrained elastic plate” *Nature* **407**, 718-720 (2000).
- [54] E. Hamm, B. Roman et Francisco Melo, “Dynamics of developable cones under shear” *Physical Review E* **70**, 026607 (2004).
- [55] K. Matan, R. B. Williams, T. A. Witten et S. R. Nagel, “Crumpling a Thin Sheet” *Physical Review Letters* **88**, 076101 (2002).
- [56] A. D. Cambou et N. Menon, “Inside a Ball of Crumpled Aluminum Foil” 2008 APS March Meeting Abstract A39.00013.
- [57] H. Aharoni, E. Efrati et E. Sharon, “Dynamic Measurements of Crumpling in Isotropically Confined Elastic Sheets” Poster au worksop IMA Geometrical Singularities and Singular Geometries July 2008.
- [58] E. Sultan et A. Boudaoud, “Statistics of crumpled paper” *Physical Review Letters* **96**, 136103 (2006).
- [59] C. A. Andresen, A. Hansen et J. Schmittbuhl, “Ridge network in crumpled paper” *Physical Review E* **76**, 026108 (2007).
- [60] C. C. Donato, M. A. F. Gomes et R. E. de Souza, “Crumpled wires in two dimensions” *Physical Review E* **66**, 015102 (2002).
- [61] C. C. Donato, M. A. F. Gomes et R. E. de Souza, “Scaling properties in the packing of crumpled wires” *Physical Review E* **67**, 026110 (2003).
- [62] C. C. Donato, F. A. Oliveira et M. A. F. Gomes, “Anomalous diffusion on crumpled wires in two dimensions” *Physica A* **368**, 1 (2006).
- [63] C. C. Donato et M. A. F. Gomes, “Condensation of elastic energy in two-dimensional packing of wires” *Physical Review E* **75**, 066113 (2007).
- [64] N. Stoop, F.K. Wittel et H.J. Herrmann, “Morphological Phases of Crumpled Wire” *Physical Review Letters* **101**, 094101 (2008).
- [65] R.E. Ecke, Z.A. Daya, M.K. Rivera, et E. Ben-Naim, “Spontaneous spirals in vibrated granular chains” *Materials Research Society Symposium Proceedings* **759**, 129 (2003).
- [66] K. Safford, Y. Kantor, M. Kardar et A. Kudrolli, “Structure and dynamics of a bead chain” Séminaire au worksop IMA Geometrical Singularities and Singular Geometries July 2008.
- [67] M. E. Tuckerman, C. J. Mundy et G. J. Martyna, “On the classical statistical mechanics of non-Hamiltonian systems”, *Europhysics Letters* **45**, 149-155 (1999).
- [68] E.M. Sevick, R. Prabhakar, S. R. Williams et D. J. Searles, “Fluctuation Theorems”, *Annual Review of Physical Chemistry* **59**, 603-633 (2008).
- [69] P. Bergé, Y. Pomeau et C. Vidal, “L’ordre dans le Chaos”, Hermann Paris (1984).
- [70] Y. G. Sinai, “Introduction to Ergodic Theory” Princeton, New Jersey (1977).
- [71] M. D. Ediger, C. A. Angell et S. R. Nagel, “Supercooled Liquids and Glasses” *Journal of Physical Chemistry* **100**, 13200 -13212 (1996).

- [72] J. P. Eckmann et I. Procaccia, “Ergodicity and slowing down in glass-forming systems with soft potentials : No finite-temperature singularities” *Physical Review E* **78**, 011503 (2008).
- [73] F. H. Stillinger et T. A. Weber, “Inherent structure theory of liquids in the hard-sphere limit” *Journal of Chemical Physics* **83**, 4767-4775 (1985).
- [74] S. F. Edwards et R. B. S. Oakeshott, “Theory of powders” *Physica A : Statistical and Theoretical Physics* **157**, 1080-1090 (1989).
- [75] H. A. Makse, J. Brujic et Sam F. Edwards, “Statistical Mechanics of Jammed Matter”, *The physics of Granular Media*, Wiley-VCH, (2004).
- [76] S. F. Edwards, J. Brujic, H. A. Makse, “A basis for the statistical mechanics of granular systems”, *Unifying Concepts in Granular Media and Glasses*, Elsevier, Amsterdam, (2004).
- [77] F. Lechenault, F. da Cruz, O. Dauchot et E. Bertin, “Free volume distributions and compactivity measurement in a bidimensional granular packing” *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, P07009 (2006).
- [78] R. Blumenfeld et S. F. Edwards, “Geometric partition functions of cellular systems : Explicit calculation of the entropy in two and three dimensions” *The European Physical Journal E* **19**, 23-30 (2006).
- [79] J. Brujić, S. F. Edwards, I. Hopkinson et H. A. Makse, “Measuring the distribution of interdroplet forces in a compressed emulsion system” *Physica A* **327**, 201-212 (2003).
- [80] M. Schröter, D. I. Goldman et H. L. Swinney, “Stationary state volume fluctuations in a granular medium” *Physical Review E* **71**, 030301(R) (2005).
- [81] P. Richard, P. Philippe, F. Barbe, S. Bourls, X. Thibault et D. Bideau, “Analysis by x-ray microtomography of a granular packing undergoing compaction” *Physical Review E* **68** 020301 (2003).
- [82] T. Aste, M. Saadatfar et T. J. Senden, “Geometrical structure of disordered sphere packings” *Physical Review E* **71**, 061302 (2005).
- [83] H. A. Makse et J. Kurchan, “Testing the thermodynamic approach to granular matter with a numerical model of a decisive experiment” *Nature* **415**, 614-617 (2002).
- [84] C. Song, P. Wang et H. A. Makse, “A phase diagram for jammed matter” *Nature* **453**, 629-632 (2008).
- [85] S. F. Edwards et R. B. S. Oakeshott, “Theory of powders” *Physica A* **157**, 1080-1090 (1989).
- [86] A. M. Gupta et S. F. Edwards, “Mean-field theory of phase transitions in liquid-crystalline polymers” *Journal of Chemical Physics* **98**, 1588-1596 (1993).
- [87] T. Koga et S. F. Edwards, “Jamming concepts in cold polymeric glasses” *Journal of Chemical Physics* **120**, 8283-8291 (2004).
- [88] E. Kreyszig, “Differential Geometry” Dover Publications, New York (1991).
- [89] A. Chajes, “Principles of Structural Stability Theory” Waveland Pr Inc (1993).
- [90] C. J. Benham et S. P. Mielke, “DNA Mechanics” *Annual Review of Biomedical Engineering* **7**, 21-53 (2005).

- [91] F. Bertails, B. Audoly, M. P. Cani, B. Querleux, F. Leroy et J. L. Lévêque, “Super-helices for predicting the dynamics of natural hair” *ACM Transactions on Graphics (SIGGRAPH’06)*, 1180-1187 (2006).
- [92] A. Goriely et S. Neukirch, “The mechanics of attachment in twining plants” *Physical Review Letters* **97**, 184302 (2006).
- [93] E. Lauga, “Floppy swimming : Viscous locomotion of actuated elastica” *Physical Review E* **75**, 041916 (2007).
- [94] B. Audoly, N. Clauvelin et S. Neukirch, “Elastic knots”, *Physical Review Letters* **99**, 164301 (2007).
- [95] C. L. Dym “Theory of shells” New York : Hemisphere (1990).
- [96] M. Nizette et A. Goriely, “Towards a classification of Euler-Kirchhoff filaments” *Journal of Mathematical Physics* **40**, 2830-2866 (1999).
- [97] A. Goriely, R. Vandiver et M. Destrade, “Nonlinear Euler buckling” *Proceedings of the Royal Society A*, sous presse (2008).
- [98] E. Cerda and L. Mahadevan, “Confined Elastic Developable Surfaces : Cylinders, Cones and the Elastica” *Proceedings of the Royal Society A* **461**, 671-700 (2005).
- [99] E. Cerda, L. Mahadevan et J. Passini, “Elements of Draping” *Proceedings of the National Academy of Sciences (USA)*, **101**, 1806-1810 (2004).
- [100] S. Debœuf, M. Adda-Bedia et A. Boudaoud, “Energy distributions and effective temperatures in the packing of elastic sheets” arXiv :0804.3149 (2008).
- [101] J. O’Rourke, “Computational Geometry in C”, Cambridge University Press, 1998
- [102] R. P. Brent, “Algorithms for Minimization without Derivatives” Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1973).
- [103] M. Doi et S.F. Edwards, “The Theory of Polymer Dynamics” Oxford University Press, Oxford (1986).
- [104] R.H. Crowell et R.H. Fox, “An Introduction to Knot Theory” Ginn and Co., Boston (1963).
- [105] L. Onsager, “The effects of shape on the interaction of colloidal particles” *Annals of the New York Academy of Sciences* **51**, 627-659 (1949).
- [106] W. Maier et A. Z. Saupe, “A Simple molecular statistical theory of the nematic crystalline-liquid phase” *I. Z. Naturforsch* **14 A**, 882-889 (1959).
- [107] G. R. Luckhurst et C. Zannoni, “Why is the Maier Saupe theory of nematic liquid crystals so successful ?” *Nature* **267**, 412-414 (1977).
- [108] H. Buchholz, “The Confluent Hypergeometric Function With Special Emphasis on Its Applications ”, New York : Springer-Verlag, 1969.
- [109] D. E. Grady et M. E. Kipp, “Geometric statistics and dynamic fragmentation” *Journal of Applied Physics* **58**, 1210-1222 (1985).
- [110] M. G. Kendall et P. A. P. Moran, “Geometric Probability” Hafner, New York (1963).
- [111] A. N. Kolmogorov, “On the logarithmically normal distribution law of particle sizes at the subdivision” *Doklady Akademii Nauk SSSR* **31**, 99-101 (1941, Russe).
- [112] A. J. Wood, Editor, “Witten’s lectures on crumpling” *Physica A* **313**, 83-109 (2002).

- [113] J. Pitman, "Probability" Springer-Verlag, New York (1993).
- [114] H. Kleinert, "Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets" World Scientific Publishing, Singapore (2004).