



**HAL**  
open science

# Application de la Thermodynamique de Histoires aux Systèmes Vitreux

Kristina van Duijvendijk

► **To cite this version:**

Kristina van Duijvendijk. Application de la Thermodynamique de Histoires aux Systèmes Vitreux. Physique [physics]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2009. Français. NNT : 2009PA077250 . tel-00430803

**HAL Id: tel-00430803**

**<https://theses.hal.science/tel-00430803>**

Submitted on 9 Nov 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.

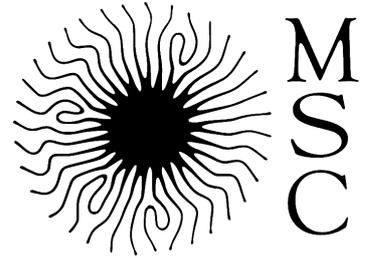
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

UNIVERSITÉ PARIS DIDEROT  
U.F.R. DE PHYSIQUE

LABORATOIRE MATIÈRE ET SYSTÈMES  
COMPLEXES



## THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : PHYSIQUE THÉORIQUE

E.D. : CONSTITUANTS ÉLÉMENTAIRES - SYSTÈMES COMPLEXES

Présentée par : **Kristina van Duijvendijk**

Sujet :

# Applications de la thermodynamique des histoires aux systèmes vitreux

Jury composé de :

Mme <i>Cécile Monthus</i>	Rapporteur
M. <i>Henk Hilhorst</i>	Rapporteur
Mme <i>Cristina Toninelli</i>	Examineur
M. <i>Eric Bertin</i>	Examineur
M. <i>Frédéric van Wijland</i>	Directeur de thèse

30 Septembre 2009



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>v</b>
0.1 But et résultats de la thèse . . . . .	vii
0.2 Plan de la thèse . . . . .	viii
<b>1 Systèmes Vitreux</b>	<b>1</b>
1.1 Caractérisation de la dynamique vitreuse . . . . .	1
1.1.1 Vieillessement . . . . .	3
1.2 Images physiques de la dynamique vitreuse . . . . .	4
1.2.1 Paysage énergétique . . . . .	5
1.2.2 Coopérativité . . . . .	6
1.2.3 Hétérogénéités dynamiques . . . . .	8
<b>2 Modélisation</b>	<b>11</b>
2.1 Modèles cinétiquement contraints . . . . .	13
2.1.1 Modèles sans loi de conservation . . . . .	13
2.1.2 Modèles avec loi de conservation locale . . . . .	19
2.2 Modèles avec désordre gelé . . . . .	23
2.2.1 Verres de spin . . . . .	23
2.2.2 Modèles de pièges . . . . .	27
2.2.3 Modèle à énergies aléatoires . . . . .	29
<b>3 Thermodynamique des histoires</b>	<b>33</b>
3.1 Analogie avec la construction de Boltzmann-Gibbs . . . . .	33
3.2 Histoire de la thermodynamique des histoires . . . . .	36
3.2.1 Formalisme thermodynamique de Ruelle . . . . .	36

3.2.2	Approche de Gaspard : temps discret . . . . .	38
3.3	Formalisme des histoires : dynamique markovienne en temps continu . . . . .	38
3.3.1	Statistique sur les histoires . . . . .	39
3.3.2	Entropie de Kolmogorov-Sinai . . . . .	41
3.3.3	Fonction de grandes déviations d'une observable . . . . .	42
3.4	États $s$ et liaison avec la dynamique vitreuse . . . . .	44
3.4.1	Transition de phase dynamique . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Modèles cinétiquement contraints</b>	<b>49</b>
4.1	Transition dynamique dans le modèle FA en champ moyen . . . . .	50
4.1.1	Fonction de grandes déviations . . . . .	51
4.1.2	Énergie libre variationnelle . . . . .	54
4.1.3	Modèle sans contrainte cinétique . . . . .	58
4.1.4	Réductibilité et états- $s$ . . . . .	59
4.2	Résultats numériques en dimension finie . . . . .	60
4.2.1	Algorithme de clonage . . . . .	61
4.2.2	Résultats . . . . .	64
<b>5</b>	<b>Modèles de pièges et à énergies aléatoires</b>	<b>73</b>
5.1	Modèle de pièges . . . . .	73
5.1.1	Transition dynamique . . . . .	74
5.2	Modèle à énergies aléatoires . . . . .	79
5.2.1	Transition dynamique . . . . .	80
5.3	Relation avec la statistique des extrêmes . . . . .	84
5.3.1	Modèle à facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement . . . . .	86
5.3.2	Modèle à facteurs de Boltzmann distribués uniformement . . . . .	86
5.3.3	Fonctions de corrélation . . . . .	88
5.4	Conclusion . . . . .	92
<b>6</b>	<b>Modèle à <math>p</math> spins avec <math>p = 2</math></b>	<b>95</b>
6.1	Application du formalisme thermodynamique des histoires . . . . .	96
6.1.1	Formulation en termes d'intégrales fonctionnelles . . . . .	98
6.2	Diagramme des phases . . . . .	101
6.2.1	Phases statiques . . . . .	102

6.2.2	Phases dynamiques . . . . .	104
6.2.3	Transition de phase dynamique . . . . .	109
6.3	Formulation en termes d'un opérateur hermitien . . . . .	111
6.4	Discussion des résultats . . . . .	113
6.5	Perspectives . . . . .	116
	<b>Conclusion</b>	<b>115</b>
	<b>A Modèle Ferromagnétique</b>	<b>119</b>
A.1	Application du formalisme thermodynamique des histoires . . . . .	120
A.2	Diagramme des phases . . . . .	121
A.2.1	Phases statiques . . . . .	121
A.2.2	Transition de phase dynamique . . . . .	122
	<b>Bibliographie</b>	<b>127</b>
	<b>Publications</b>	<b>135</b>



# Introduction

La physique statistique d'équilibre s'occupe de déterminer les lois qui régissent le comportement de systèmes macroscopiques en équilibre thermique, à partir des lois microscopiques auxquelles obéissent ses constituants. L'idée centrale de la physique statistique est qu'à un état macroscopique donné, déterminé par la valeur que les quantités physiques en jeu y prennent, correspondent plusieurs états microscopiques. Il s'ensuit que la valeur des observables dans un état macroscopique doit être moyennée sur tous les états microscopiques correspondants.

La distribution de probabilité des configurations microscopiques  $\mathcal{C}$  nécessaire au calcul des moyennes est connue à l'équilibre, et se trouve être, pour un système en équilibre thermique à une température  $1/\beta$  :

$$p(\mathcal{C}) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})}}{Z}, \quad (1)$$

où  $\mathcal{H}(\mathcal{C})$  est l'énergie du système dans la configuration  $\mathcal{C}$  et  $Z = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})}$  est la fonction de partition du système. La connaissance de cette distribution, dite distribution de Gibbs, permet en principe le calcul de toutes les observables physiques d'intérêt, la prévision et la description du comportement des systèmes à l'équilibre.

Les systèmes hors l'équilibre, qui constituent la très grande majorité des systèmes existants, ne sont pas si facilement décrits pour plusieurs raisons. La définition de quantités thermodynamiques telles que l'entropie ou la température pose déjà un problème. De plus, même les observables physiques bien définies ou la mesure de probabilité sur les configurations microscopiques, deviennent des quantités dynamiques qui dépendent de façon non négligeable des détails microscopiques du système considéré et ne peuvent

être déterminées de façon générale. Par conséquent l'analogie dynamique de la mesure de probabilité (1) n'a pas encore été déterminé et la construction d'une théorie qui décrive les propriétés macroscopiques des systèmes hors l'équilibre progresse très lentement.

Le premier résultat à caractère général obtenu en physique hors l'équilibre est le travail de Onsager et Machlup [94] où la probabilité qu'un système suive une certaine trajectoire de relaxation vers l'état d'équilibre est donnée en termes d'une fonction de grandes déviations, sous hypothèse de réversibilité dans le temps. Un deuxième résultat très important a été obtenu par Gallavotti et Cohen [46] avec recours à une hypothèse plus faible de symétrie sous renversement du temps : il s'agit d'un théorème de fluctuation qui établit, pour les systèmes qui ont des propriétés de chaotité suffisamment fortes, une symétrie de la fonction de grandes déviations des trajectoires hors l'équilibre. Cette fonction acquiert hors l'équilibre un rôle analogue à la production d'entropie le long de la trajectoire considérée.

Plus récemment quelques résultats à caractère moins général ont aussi vu le jour : des fonctionnelles thermodynamiques hors d'équilibre ont été définies via la théorie des grandes déviations. Dans les systèmes où le calcul explicite de ces fonctionnelles est possible, la valeur attendue de quantités macroscopiques dynamiques telles que le courant peut être déterminée.

En particulier Bertini et al. [12, 13] et séparément Bodineau et Derrida [18, 19], ont défini la fonctionnelle thermodynamique qui permet de calculer la valeur moyenne *instantanée* d'une observable dynamique. Cette fonctionnelle doit satisfaire une équation de diffusion indépendante du temps dont les coefficients dépendent du système ou modèle considéré.

D'autre part, Lecomte et al. [80] ont défini la fonctionnelle thermodynamique qui, une fois calculée en tenant compte des spécificités dynamiques du système considéré, donne la valeur moyenne d'observables mesurées sur un grand intervalle de temps  $[0, t]$ . Dans ce cas les moyennes sont faites en considérant toutes les histoires possibles du système à partir de  $t = 0$  jusqu'à l'instant  $t$ , donc les réalisations temporelles du système sont prises en compte plutôt que les seules configurations microscopiques de la physique d'équilibre. Cette méthode de moyennage dynamique se trouve à la base du formalisme thermodynamique des histoires développé par Ruelle et collaborateurs en [96] dans le contexte des systèmes dynamiques, et adapté aux systèmes à dynamique markovienne

en [79, 80]. Le formalisme thermodynamique des histoires permet de classifier les régimes dynamiques que le système peut suivre : cet aspect de la thermodynamique des histoires constitue le point de départ de cette thèse, qui explore à travers ce formalisme la dynamique des systèmes vitreux.

Les systèmes vitreux sont des systèmes physiques qui, si refroidis assez brusquement au dessous d'une certaine température, plongent dans un état hors d'équilibre sur des échelles de temps expérimentales, appelé "état vitreux", caractérisé par une phénoménologie dynamique très particulière : par exemple à différentes régions spatiales du système correspondent différentes échelles de temps de relaxation.

Ces systèmes méritent beaucoup d'attention puisqu'ils constituent une grande partie des matériaux qui nous entourent. Cependant une théorie non-phénoménologique capable de prédire leur comportement tel qu'on l'observe expérimentalement est loin d'être établie en raison du fait qu'aucune description de nature statique ne peut être utilisée, est que la physique statistique hors l'équilibre ne donne pas encore de moyens d'analyse adaptables à tous les systèmes comme en physique statistique d'équilibre.

## 0.1 But et résultats de la thèse

Donner une description purement dynamique de l'état vitreux est l'objectif principal de cette thèse.

Le formalisme thermodynamique des histoires permet d'explorer les différents régimes dynamiques qu'un système a suivi et de les classifier selon leurs propriétés dynamiques : par exemple une classification est possible sur la base du temps de relaxation caractérisant le régime suivi. Dans le cas où les histoires du système sont nettement séparées en régimes dynamiques différents on dit qu'une "transition dynamique" a lieu dans le système.

Le but de cette thèse est de prouver qu'une coexistence entre différentes phases dynamiques suivies, qui se manifeste à travers une transition dynamique, résulte en une dynamique vitreuse. On veut donc prouver qu'un état vitreux est la conséquence de l'histoire dynamique du système.

Pour atteindre cet objectif plusieurs modèles, avec et sans désordre, ont été pris en considération sur la base des propriétés vitreuses de leur dynamique, déjà connues auparavant.

Les premiers modèles considérés sont des systèmes cinétiquement contraints, où les contraintes dynamiques rendent à elles seules la dynamique vitreuse. Pour ces systèmes il a été prouvé numériquement en dimension finie qu’une transition de phase dynamique a lieu et que donc différents régimes dynamiques coexistent. Ce résultat confirme les résultats analytiques qu’on a obtenus sur ces modèles en [48], où il a été prouvé qu’une transition dynamique a lieu pour un modèle avec contrainte cinétique en champ moyen, mais pas pour un modèle analogue sans contrainte cinétique et donc à dynamique non vitreuse.

Ensuite on a considéré des modèles avec désordre gelé : les modèles de pièges, ou *trap models*, et deux modèles de verres de spin, le modèle à énergies aléatoires (REM) dans la phase à basse température et le  $p$ -spin. Pour chacun de ces modèles il a été prouvé analytiquement qu’une transition dynamique a bien lieu *dans la phase où la dynamique du système est vitreuse*. En particulier pour le  $p$ -spin on a montré que cette transition disparaît dans la phase où le système n’est pas vitreux, *i.e.* pour  $T > T_g$  ; de même on a montré qu’elle disparaît dans l’analogie non-vitreux du modèle à énergies aléatoires dans la phase à basse température.

L’application de la thermodynamique des histoires aux modèles considérés a demandé l’application de techniques variées et a suscité beaucoup de réflexions sur les systèmes vitreux, comme on le verra tout au long du manuscrit.

## 0.2 Plan de la thèse

Les trois premiers chapitres de ce manuscrit introduisent la problématique qui est à l’origine de cette thèse et donnent les outils nécessaires à comprendre le travail effectué.

Le but de la thèse étant de décrire un système dans un état vitreux, le chapitre 1 passe en revue les caractéristiques d’une dynamique vitreuse et donne des interprétations physiques de l’état vitreux proposées dans la littérature.

Le chapitre 2 justifie notre choix des modèles analysés en soulignant leur intérêt et leurs propriétés dynamiques.

Enfin dans le chapitre 3 on rappelle le formalisme thermodynamique des histoires tel qu’il s’applique à des systèmes à dynamique Markovienne en temps continu [80]. En particulier, on relie dans ce chapitre les propriétés de la fonction de grandes déviations, opportunément définie, d’observables extensives en temps, aux différents régimes dyna-

miques qu'un système peut suivre, et on pose l'hypothèse que ce travail veut confirmer : la séparation nette entre plusieurs régimes dynamiques dans l'espace des histoires que le système a suivies est une signature de l'état vitreux dans lequel se trouve le système.

Les trois derniers chapitres contiennent l'application de la thermodynamique des histoires aux modèles de verres considérés et consistent le travail effectué pendant la thèse.

Le chapitre 4 contient l'analyse des modèles cinétiquement contraints : en particulier on y trouve le calcul analytique de la fonction de grandes déviations pour un modèle particulier [48] et la relation explicite entre la discontinuité de cette fonction et l'état vitreux du système. La deuxième partie du chapitre est centrée sur les résultats obtenus au cours de cette thèse pour les modèles cinétiquement contraints : s'agissant de résultats purement numériques, l'algorithme de calcul employé est expliqué, et les tracés des fonctions de grandes déviations obtenues pour différents modèles sont présentés et commentés.

La deuxième phase du travail de thèse est représentée par l'application du formalisme thermodynamique des histoires à des modèles désordonnés de verres. Les techniques employées pour mener à bien ce travail sont très différentes de celles qui ont été utilisées pour les modèles cinétiquement contraints. Le calcul de la fonction de grandes déviations pour le modèle de pièges et pour le modèle à énergies aléatoires, qui fait l'objet du chapitre 5, a été fait en résolvant numériquement une équation aux valeurs propres, tandis que le calcul pour le  $p$ -spin avec  $p = 2$  a été effectué en utilisant un formalisme fonctionnel employé en théorie des champs, décrit dans le chapitre 6. Ces deux chapitres contiennent donc les résultats analytiques obtenus pendant cette thèse.

Pour tous les modèles analysés une séparation entre plusieurs régimes dynamiques dans l'espace des histoires, marquée par une discontinuité de la fonction de grandes déviations ou de ses dérivées, est détectée dans la phase où le système est dans un état vitreux. Une discussion sur l'interprétation et les implications de ces résultats, ainsi qu'un panorama sur les perspectives qu'ouvre ce travail, se trouvent dans les conclusions.



# Chapitre 1

## Systemes Vitreux

Dans la nature il existe des matériaux, au nombre desquels figure le verre, qui suite à une variation de température n'atteignent que sur des temps anormalement longs l'équilibre thermique avec leur environnement. Ce ralentissement exceptionnel de la dynamique est accompagné d'une série de phénomènes dynamiques particuliers qui constituent la *dynamique vitreuse* propre à ce type de matériaux.

Dans ce chapitre on décrit sommairement les principaux éléments de la dynamique vitreuse, en se focalisant ensuite sur une caractéristique particulière des verres qui est l'hétérogénéité dynamique et sur les discussions dont a fait l'objet la signification de transition vitreuse.

### 1.1 Caractérisation de la dynamique vitreuse

Normalement les liquides cristallisent quand la température atteint une valeur assez basse, mais certains d'entre eux peuvent être refroidis brusquement et atteindre, au dessous d'une certaine température  $T_g$  appelée *température de transition vitreuse*, une phase solide amorphe dans laquelle le liquide ne coule plus et peut être considéré en pratique comme un solide. Dans cette *phase vitreuse* le système est par définition hors l'équilibre puisque la dynamique est tellement ralentie que l'équilibre n'est jamais atteint sur des échelles de temps expérimentales.

Une des preuves expérimentales de ce ralentissement anormal de la dynamique est que la viscosité de ces liquides augmente très brusquement à l'approche de la phase vitreuse. Sur la Fig. 1.1 sont représentés en échelle logarithmique les résultats expéri-

mentaux [4] de mesures de viscosité pour plusieurs matériaux vitreux en fonction de la température inverse  $T_g/T$ . On remarque que pour certains matériaux la viscosité augmente de 17 ordres de grandeur quand la température diminue d'un facteur 2.

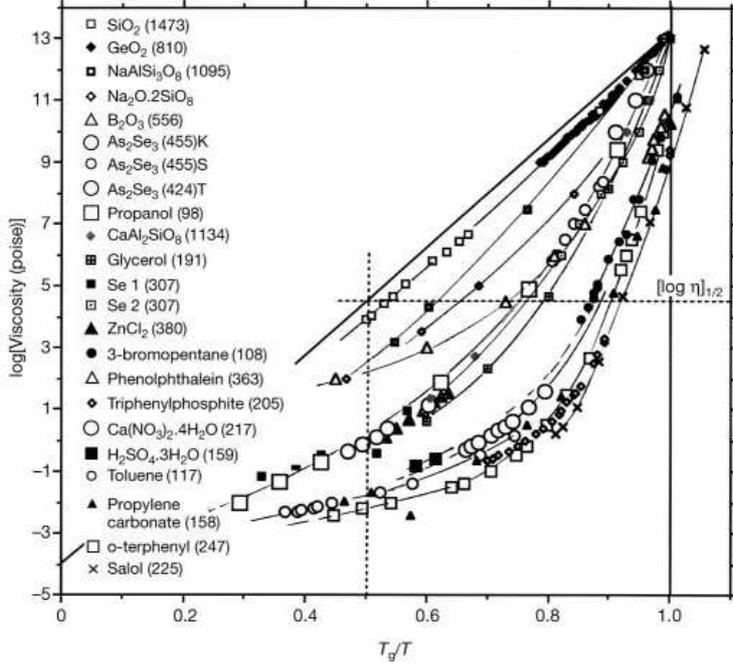


FIG. 1.1 – Graphique de la viscosité  $\eta(T)$  en fonction de la température inverse en échelle logarithmique pour plusieurs matériaux vitreux (Martinez et Angell [83]). Quand la température s'approche de la température de transition vitreuse  $T_g$ , la viscosité augmente de plusieurs ordres de grandeur. En particulier quand  $T$  passe de  $2T_g$  à  $T_g$  la viscosité augmente de plus de dix ordres de grandeur.

La fragilité, introduite en [5], indique la vitesse à laquelle la viscosité augmente quand la température s'approche de  $T_g$ . Dans les verres *forts*, avec des valeurs basses de fragilité, la dépendance en température de la viscosité est souvent décrite par une loi d'Arrhenius

$$\eta(T) = \eta_0 e^{\frac{A}{T}}, \quad (1.1)$$

où  $A$ ,  $\eta_0$  sont des paramètres qui dépendent du système. Par contre dans les verres *fragiles*, la viscosité dépend fortement de la température et peut être décrite par la loi phénoménologique de Vogel-Fulcher-Tammann

$$\eta(T) = \eta_0 e^{\frac{A}{T-T_0}}. \quad (1.2)$$

Cette expression prédit une divergence de la viscosité à une certaine température  $T_0 < T_g$ .

La viscosité mesure la réponse du liquide à une force de cisaillement, en quantifiant le changement de vitesse qui en dérive. Elle est reliée au temps de relaxation correspondant par l'équation de Maxwell :

$$\eta(T) = G_\infty \tau \quad (1.3)$$

où  $G_\infty$  est le module de cisaillement propre au matériau considéré et  $\tau$  est le temps de relaxation moyen du système après sa réponse au cisaillement. En mécanique statistique  $\tau$  peut être exprimé à travers l'intégrale de la fonction d'autocorrélation du tenseur des contraintes, mesurable expérimentalement. Dans les verres fragiles, où le temps de relaxation ne suit pas une loi d'Arrhenius en fonction de la température (voir Eq. (1.2)), cette fonction d'autocorrélation  $C(t)$  n'est pas exponentielle mais a la forme d'une exponentielle étirée :

$$C(t) = \exp(-(t/\tau)^\delta), \quad (1.4)$$

où  $\delta$  diminue quand la température diminue. Le comportement non-exponentiel des fonctions d'autocorrélation et la forme particulière de la viscosité  $\eta(T)$  caractérisent l'approche à la phase vitreuse.

Une troisième caractéristique est la non-linéarité de la relaxation [92], ou *vieillessement* du système.

### 1.1.1 Vieillessement

Au dessous de  $T_g$ , le système se trouve dans un état vitreux. Le temps de relaxation  $\tau$  excède le temps d'observation et le système n'atteint pas l'équilibre mais *viellit*. Cela veut dire que les propriétés dynamiques du système, comme son temps de relaxation, dépendent de l'âge du système, qui est défini comme le temps d'attente  $t_w$  entre le refroidissement et l'observation du système, c'est-à-dire le temps passé dans la phase vitreuse. Un système plus vieux relaxe plus lentement qu'un système jeune. Le vieillissement est observé expérimentalement à travers le suivi des fonctions de corrélation et des fonctions de réponse dans le temps.

La fonction d'autocorrélation à deux temps pour une observable  $\phi$  s'écrit

$$C(t, t_w) = \langle \phi(t)\phi(t_w) \rangle - \langle \phi(t) \rangle \langle \phi(t_w) \rangle, \quad (1.5)$$

avec  $t \geq t_w$ , et la fonction de réponse correspondante s'écrit :

$$R(t, t_w) = T \left. \frac{\partial \langle \phi(t) \rangle}{\partial h(t_w)} \right|_{h=0}. \quad (1.6)$$

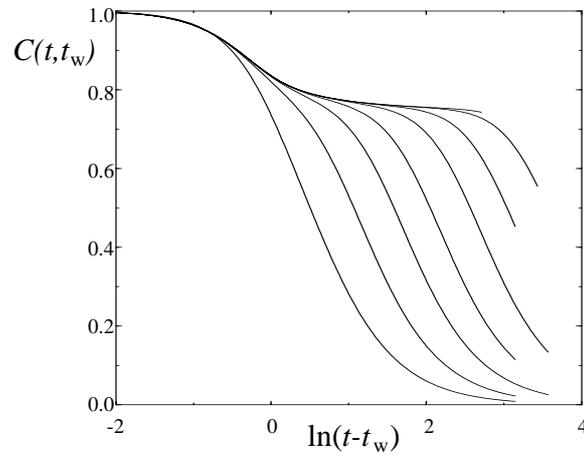


FIG. 1.2 – Forme typique d’une fonction de corrélation à deux temps, tracée en échelle logarithmique en fonction de  $t - t_w$  (Ritort et Sollich [98]). L’âge du système augmente de gauche à droite : quand le système est jeune la relaxation est indépendante du temps d’attente et est invariante par translation temporelle, tandis que quand le système vieillit la relaxation dépend de son âge.

À l’équilibre, les fonctions de corrélation et les fonction de réponse sont reliées entre elles par le théorème de Fluctuation-Dissipation (FDT), par contre hors l’équilibre, les fonctions de corrélation à deux temps n’ont pas de raison de satisfaire une telle relation ; on introduit donc une fonction  $X(t, t_w)$  définie par

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial}{\partial t_w} C(t, t_w), \quad (1.7)$$

qui quantifie le degré de violation du théorème de Fluctuation-Dissipation.

Ce qui rend particulièrement intéressant le phénomène du vieillissement, et a contribué à rendre la dynamique vitreuse un sujet tellement exploré, est que dans ces systèmes l’invariance par translation dans le temps est violée même si la dynamique microscopique est totalement réversible.

## 1.2 Images physiques de la dynamique vitreuse

Pour expliquer physiquement et analytiquement le comportement des liquides à des températures proches de  $T_g$ , plusieurs interprétations sont proposées dans la littérature.

On décrit ici brièvement celles qui sont pertinentes par rapport à la description donnée dans cette thèse : l'interprétation en termes de paysage énergétique ou espace des phases, l'interprétation en termes de réarrangement coopératif de différentes régions du matériau, et celle en termes d'hétérogénéités dynamiques. Ces trois interprétations se recoupent en plusieurs points.

### 1.2.1 Paysage énergétique

Dans une représentation en termes de paysage énergétique la dynamique est décrite de façon *topographique* comme l'évolution d'un système dans un paysage d'énergie potentielle très accidenté.

L'idée de cette représentation, déjà formulée qualitativement en [59], formalisée par Stillinger et Weber [105] et abondamment développée ensuite (voir [107]), est née de l'observation que l'énergie potentielle d'un liquide brusquement refroidi a un très grand nombre de minima locaux. Cette approche, adoptée plus largement dans les modèles de verres en champ moyen, présente l'avantage de pouvoir utiliser les instruments de calcul de la mécanique statistique d'équilibre et de se servir de quantités *thermodynamiques* dont le sens physique est bien clair.

L'espace des configurations est séparé en différents bassins, ou structures inhérentes (IS) du paysage énergétique. Chaque bassin est défini comme l'ensemble des configurations qui arrivent à une configuration donnée en suivant une dynamique de relaxation à température nulle ; cette dynamique est déterministe donc ces bassins ne se recouvrent pas. Chaque bassin est étiqueté par l'énergie par particule  $e_{IS}$  de la configuration qui se situe au minimum du bassin. Le logarithme du nombre  $\mathcal{N}(e_{IS})$  de bassins d'énergie  $e_{IS}$  va être proportionnel au nombre de particules  $N$  et à l'entropie configurationnelle  $s_c(e_{IS})$  qui est considérée plus pertinente dans la dynamique vitreuse que l'entropie thermodynamique sur toutes les configurations. En supposant  $\mathcal{N}(e_{IS}) = \exp[Ns_c(e_{IS})]$  la fonction de partition va pouvoir s'écrire :

$$Z = \sum_{IS} \sum_{\mathcal{C} \in IS} e^{-\beta E(\mathcal{C})} = \int e^{[s_c(e_{IS}) - \beta e_{IS} - \beta \Delta f(\beta, e_{IS})]} de_{IS} \quad (1.8)$$

où le terme

$$\Delta f(\beta, e_{IS}) = -\frac{T}{N} \ln \sum_{\mathcal{C} \in IS} e^{-\beta[E(\mathcal{C}) - Ne_{IS}]} \quad (1.9)$$

est l'énergie libre relative au minimum  $e_{IS}$  du bassin et en mesure la largeur effective.

Un raffinement de cette représentation compte les bassins en fonction de leur énergie libre  $f = e_{IS} + \Delta f$  [32], où le poids additionnel  $\exp(-\beta\Delta f)$  dans la fonction de partition rend compte de la largeur des bassins.

On précise que la largeur des bassins  $\Delta f$  et l'entropie configurationnelle  $s_c(f, \beta)$  dépendent de la température, mais restent des quantités statiques, et donc inadaptées à décrire des caractéristiques purement dynamiques des systèmes vitreux. Des versions dynamiques de l'entropie configurationnelle ont été toutefois introduites heuristiquement pour expliquer le vieillissement [71], ou pour relier l'idée de paysage énergétique à celle de coopérativité dynamique [28, 3] décrite dans la prochaine section.

### 1.2.2 Coopérativité

Depuis que la communauté a commencé à s'intéresser aux phénomènes vitreux, la question est apparue de savoir si l'établissement de la phase vitreuse dans un matériau refroidi brusquement constitue ou pas une transition de phase thermodynamique. Si c'en était une, cette transition devrait être marquée par la divergence d'un paramètre statique, tout comme le ralentissement dynamique autour d'une transition de phase du second ordre à l'équilibre est marqué par la divergence d'une longueur de corrélation statique.

Il semble pour le moment qu'aucun paramètre statique, que ce soit la longueur de corrélation ou autre, ne change de façon significative quand la dynamique bascule dans sa phase vitreuse. Par exemple il a été montré à travers la simulation d'un système de sphères dures [77], dont la dynamique devient vitreuse au delà d'une densité critique  $\rho_c$ , que la structure statique de la phase vitreuse, mesurée par l'amplitude des fluctuations de densité, ne change presque pas quand le temps de relaxation augmente de plusieurs ordres de grandeur, et que donc la phase liquide ne peut être distinguée de la phase vitreuse d'un point de vue thermodynamique.

Cependant le ralentissement anormal de la dynamique à l'approche de la phase vitreuse et les phénomènes qui l'accompagnent, ont fait penser qu'une transition de phase *dynamique* pourrait avoir lieu à  $T = T_g$ , c'est-à-dire une transition marquée par la divergence d'une échelle de longueur tout autant dynamique, i.e. dépendante du temps. La représentation de la dynamique vitreuse en terme de coopérativité constitue une voie possible pour la définition de cette longueur de corrélation dynamique.

Cette approche, introduite par Adam et Gibbs [1] pour expliquer la divergence des

temps de relaxation, se base sur l'idée que dans la phase vitreuse le matériau est constitué par des *cages* qui bougent très lentement de façon coopérative, à l'intérieur desquelles le mouvement est rapide. La coopérativité naît du fait que quand ces cages sont serrées entre elles, le mouvement d'une cage sur une longueur de l'ordre de son diamètre nécessite le mouvement des cages voisines, qui nécessite celui d'autres cages, et ainsi de suite. L'existence de ce phénomène a été vérifiée expérimentalement dans les colloïdes vitreux [112] et numériquement dans des simulations de liquides binaires interagissant via un potentiel de Lennard-Jones bien au dessus de  $T_g$  [39].

Analytiquement la coopérativité de la dynamique d'un système vitreux à température  $T > T_G$  peut être détectée en calculant la fonction de corrélation à quatre points [69] :

$$G_4(\vec{r}, t) = \langle \rho(\vec{0}, 0)\rho(\vec{0}, t)\rho(\vec{r}, 0)\rho(\vec{r}, t) \rangle - \langle \rho(\vec{0}, 0)\rho(\vec{0}, t) \rangle \langle \rho(\vec{r}, 0)\rho(\vec{r}, t) \rangle, \quad (1.10)$$

où  $\rho(\vec{r}, t)$  représente la fluctuation de densité au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ . Cette quantité mesure la corrélation dans l'espace des fonctions de corrélation locales  $C(t) = \langle \rho(\vec{0}, 0)\rho(\vec{0}, t) \rangle$ . C'est-à-dire que si en un point 0 un événement est survenu qui corréle les fluctuations de densité sur un temps  $t$ ,  $G_4(\vec{r}, t)$  mesure la probabilité qu'un événement similaire soit survenu en un point  $\vec{r}$  dans le même intervalle de temps  $t$ . La susceptibilité dynamique correspondante  $\chi_4(t)$  est définie comme l'intégrale de volume de la fonction  $G_4(\vec{r}, t)$  et joue un rôle équivalent à celui de la fonction d'autocorrélation  $C(t)$  à l'équilibre. Une série de simulations (voir par exemple [108]) montre que pour un système refroidi à une température  $T \gtrsim T_g$ , la susceptibilité dynamique  $\chi_4(t)$  n'est pas monotone dans le temps et atteint une valeur maximale quand  $t = t^*$  où  $t^*$  est le temps de relaxation du liquide dans la phase considérée. Cette valeur maximale  $\chi_4(t^*)$  augmente quand la température approche  $T_g$ , et donc peut être considérée comme une longueur de corrélation dynamique, appelée  $\xi(t)$ , où longueur de coopérativité.

Selon cette interprétation, la longueur de corrélation dynamique diverge en approchant la phase où le système se trouve dans un état vitreux, et donc pour  $T = T_g$  on a une transition *dynamique* entre un état non-vitreux et un état vitreux. La mesure expérimentale [11] de la susceptibilité  $\chi_4(t)$  dans des liquides moléculaires et des suspensions de colloïdes montre aussi que la formation du verre est accompagnée par l'accroissement significatif de la longueur de corrélation dynamique correspondante.

### 1.2.3 Hétérogénéités dynamiques

L'idée de coopérativité est étroitement liée à l'apparition des *hétérogénéités dynamiques*, *i.e.* des régions du matériau avec des différentes échelles de temps de relaxation dont la taille caractéristique constitue une autre possible définition de longueur dynamique variant à l'approche de la phase vitreuse. Le caractère non-exponentiel des fonctions d'autocorrélation (1.4) des systèmes vitreux est imputé dans ce contexte aux différents temps de relaxation, cette fois à caractère exponentiel, des régions constituant le matériau.

Ces structures hétérogènes [101] se manifestent expérimentalement comme des ensembles d'atomes qui ont une dynamique manifestement lente comparée au reste du système : on observe des structures transitoires gelées qui se forment au milieu du matériau sur des échelles de temps de l'ordre ou plus grandes que les échelles de temps expérimentales. Ces structures sont passées longtemps inaperçues parce que les mesures expérimentales standards font des moyennes spatiales des quantités dynamiques qui ne relèvent pas d'hétérogénéités locales. Récemment des techniques plus raffinées comme la résonance magnétique (NMR) multidimensionnelle, la spectroscopie diélectrique et d'autres mesures optiques (pour une revue voir [103, 40]), ont permis de détecter les hétérogénéités dynamiques et même d'évaluer l'échelle de longueur des hétérogénéités [106]. Il a été suggéré que les hétérogénéités sont une manifestation directe de la nature coopérative du processus de nucléation [100], mais la relation entre la taille des hétérogénéités et la longueur de coopérativité reste encore à préciser.

Numériquement les hétérogénéités dynamiques ont été explorées à travers des simulations de dynamique moléculaire de plusieurs types [72, 56].

Les zones de matériau à dynamique plus lente doivent se réarranger de façon coopérative pour que le matériau coule dans son ensemble. On relie donc l'hétérogénéité dynamique d'un matériau aux paramètres définissant une dynamique coopérative. La distance typique entre hétérogénéités peut être ainsi calculée en faisant recours à la fonction de corrélation à quatre points donnée en équation 1.10.

Du point de vue théorique ce comportement structural semble ne pas pouvoir être décrit par des théories en champ moyen ni de couplage des modes parce que celles-ci traitent le système de façon homogène. Une description phénoménologique des hétérogénéités dynamiques en termes de paysage énergétique a été donnée en [28], où la formation d'hétérogénéités dynamiques est reliée à une dissipation d'énergie libre et

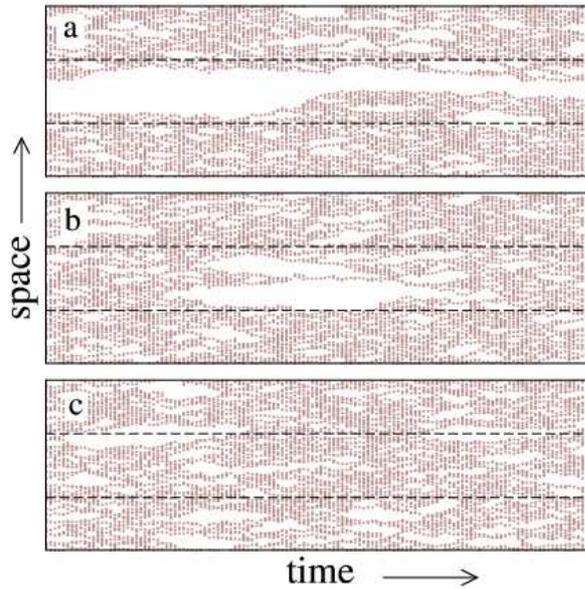


FIG. 1.3 – Formation d’hétérogénéités dynamiques dans un modèle cinétiquement contraint (M. Merolle, J.P. Garrahan et D. Chandler [86]).

donc à une perte d’entropie configurationnelle dynamique. En [25] la corrélation entre la taille des hétérogénéités dynamiques et l’entropie configurationnelle statique du système a été étudiée numériquement pour plusieurs matériaux.

L’hétérogénéité dynamique des systèmes vitreux a donné l’idée à un groupe d’auteurs [48, 50, 95, 62] de construire un formalisme dans l’espace-temps, c’est-à-dire purement dynamique, où des quantités thermodynamiques comme l’énergie libre sont définies de façon dynamique et prennent en compte l’hétérogénéité spatio-temporelle du système.

C’est en accord avec cette dernière approche que notre travail a été effectué : le formalisme thermodynamique des histoires, décrit dans le chapitre 3, donne une base statistique bien claire pour la définition d’une énergie libre dynamique. C’est en effet en collaborant avec deux des auteurs de [62] que le formalisme thermodynamique des histoires a commencé à être adapté à la description des systèmes vitreux.



# Chapitre 2

## Modélisation

Un système réel est caractérisé par un très grand nombre de paramètres dont la plus grande partie ne joue aucun rôle dans la description des propriétés physiques qui le caractérisent. Par conséquent on fait souvent recours en physique théorique à des modèles idéaux qui reproduisent les aspects phénoménologiques d'intérêt du système réel.

En mécanique statistique le type de modèle le plus utilisé est constitué par des particules idéales disposées sur les noeuds d'un réseau à la géométrie simple (ex. réseau carré, triangulaire). À l'équilibre la modélisation est particulièrement efficace parce que le comportement macroscopique est, sauf exceptions, indépendant des détails microscopiques du système, ce qui fait que différents systèmes présentent la même phénoménologie à grandes échelles.

Hors l'équilibre il est par contre difficile de regrouper en un seul modèle plusieurs systèmes et de les décrire de la même façon. De même, les modèles reproduisant la dynamique vitreuse observée expérimentalement sont nombreux et de différentes natures. Une première distinction peut être faite entre modèles microscopiques et modèles phénoménologiques.

Les modèles microscopiques reproduisent le comportement anormal des verres en partant de la dynamique de chaque molécule du matériau idéal considéré : ils sont à la base des simulations de dynamique moléculaire, largement utilisées pour explorer la dynamique vitreuse. Dans ces simulations les molécules interagissent via un potentiel à deux corps et deux types de particules différentes  $A$  et  $B$  sont insérées pour empêcher

la cristallisation [73]. Le potentiel utilisé est de la forme Lennard-Jones :

$$V(|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|) = 4\epsilon_{\alpha\beta} \left[ \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|} \right)^6 \right]. \quad (2.1)$$

où  $\epsilon_{\alpha\beta}$  et  $\sigma_{\alpha\beta}$  donnent respectivement les échelles d'énergie et d'espace de ces interactions, et où l'interaction  $\epsilon_{AB}$  est plus forte que  $\epsilon_{AA}$  et  $\epsilon_{BB}$ . Ces simulations arrivent à reproduire plusieurs aspects de la dynamique vitreuse, comme par exemple les hétérogénéités dynamiques [72], notamment grâce à leur capacité à explorer le système localement.

Du point de vue analytique, l'extrapolation des propriétés macroscopiques du système à partir de sa dynamique microscopique a été réalisée à travers la *théorie du couplage des modes* (MCT) introduite par Götze et al. [58], qui arrive à prédire un arrêt de la dynamique pour des liquides refroidis suffisamment vite. Pour une revue des résultats obtenus à travers ce formalisme, notamment en champ moyen, voir [22].

D'autre part, une grande quantité de modèles phénoménologiques a été mise au point. Ces modèles sont créés à dessein pour que leur dynamique ait des caractéristiques vitreuses, le plus souvent en imposant un paysage énergétique particulier pour les configurations du système ou en fixant des contraintes dynamiques appropriées. Les propriétés d'équilibre de ces modèles sont en général bien comprises et l'étude de leur dynamique, sereinement envisageable, a déjà apporté beaucoup à la compréhension des phénomènes vitreux, comme on l'indique par la suite. De plus, arriver à une description théorique (ou "thermodynamique") des modèles phénoménologiques de verres voudrait dire mettre ne place un formalisme dynamique pour l'étude plus générale des phénomènes hors l'équilibre tout court.

Dans ce chapitre on décrit les modèles phénoménologiques utilisés dans cette thèse : les modèles cinétiquement contraints, les modèles de pièges et les modèles de verres de spin. Les premiers sont des modèles déterministes, où seule les contraintes sur la *dynamique* font apparaître des propriétés vitreuses, les deux autres sont des modèles où le désordre, imposé à des quantités *statiques*, rend la dynamique vitreuse. En tout cas dans tous les modèles considérés des variables mésoscopiques comme la densité moyenne ou la susceptibilité sont prises en compte, mais un hamiltonien et des équations du mouvement sont explicitement définis comme dans les modèles microscopiques.

## 2.1 Modèles cinétiquement contraints

Les modèles cinétiquement contraints sont des modèles simples sur réseau qui reproduisent un grand nombre de caractéristiques dynamiques de la phase à basse température des matériaux vitreux. Par exemple, le comportement en exponentielle étirée des échelles de temps en fonction de la température, la relaxation non-exponentielle, la dynamique spatialement hétérogène, les effets de mémoire et le vieillissement sont reproduits (pour une revue complète voir [98]).

Les propriétés thermodynamiques d'équilibre des modèles cinétiquement contraints (en anglais *Kinetically Constrained Models* -KCM-) sont très simples, et le bilan détaillé est toujours respecté : ce sont les contraintes dynamiques qui font émerger des propriétés non-triviales. Les KCM peuvent être divisés en deux sous-classes : les modèles à facilitation dynamique sans quantité conservée décrits dans la section (2.1.1) et les modèles de particules sur réseau où le nombre total de particules est conservé décrits dans la section (2.1.2).

### 2.1.1 Modèles sans loi de conservation

Dans cette section on décrit les modèles cinétiquement contraints à facilitation dynamique, en anglais *Spin-facilitated Ising Models* (SFM), introduits par Fredrickson et Andersen [44, 45] pour reproduire le ralentissement de la dynamique à l'approche de la phase vitreuse.

Ces modèles sont formulés en termes de  $N = L^d$  variables binaires  $n_i = 0, 1$  sur un réseau  $d$ -dimensionnel, en général un cube de côté  $L$ . Physiquement la valeur  $n_i = 1$  représente le fait qu'au site  $i$  correspond une région mobile, à basse densité, d'un liquide vitreux, et à la valeur  $n_i = 0$  correspond une région plus dense et moins mobile.

L'idée centrale du modèle est qu'un réarrangement dans une zone de matériau peut être possible seulement si il y a assez de régions mobiles dans son voisinage qui *facilitent* le réarrangement. Un réarrangement correspond au retournement d'un spin de  $n_i = 0$  à  $n_i = 1$  ou vice-versa, et la contrainte de facilitation se traduit en demandant qu'un spin  $i$  puisse se retourner seulement si au moins  $f \geq 1$  de ses plus proches voisins  $j$  sont dans leur état mobile,  $n_j = 1$ . Ce modèle est appelé en littérature  $f, d$ -SFM, pour Spin Facilitated Model en  $d$  dimensions avec  $f$  voisins facilitant le mouvement. Le modèle avec  $f = 1$  est plus simplement appelé modèle FA, pour Fredrickson et Andersen.

Mathématiquement, l'évolution dynamique de ces systèmes est décrite par une équation maîtresse pour la probabilité  $p(\mathbf{n}, t)$  d'être dans une configuration  $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_N)$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{n}, t) = \sum_{\mathbf{n}'} W(\mathbf{n}' \rightarrow \mathbf{n}) p(\mathbf{n}', t) - \sum_{\mathbf{n}'} W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') p(\mathbf{n}, t) \quad (2.2)$$

où  $W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}')$  est la taux de probabilité pour la transition de la configuration  $\mathbf{n}$  à  $\mathbf{n}'$  avec  $\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}$ . La seule transition autorisée dans les modèles à facilitation dynamique est le retournement de spin. Sans contrainte cinétique, les taux de retournement seraient de la forme :

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = W_0(\Delta E), \quad (2.3)$$

où  $\Delta E$  est la variation d'énergie du système qu'implique la transition de  $n_i$  à  $1 - n_i$ , et  $W_0(\Delta E)$  est le taux de transition qui obéit au bilan détaillé par rapport à  $E$ . En général on peut choisir de suivre la règle de Metropolis en prenant  $W_0(\Delta E) = \min(1, \exp(-\beta\Delta E))$  ou la dynamique de Glauber en choisissant  $W_0(\Delta E) = 1/[1 + \exp(\beta\Delta E)]$ , où  $\beta = 1/T$ . Les taux de transition complets qui apparaissent en (2.2) s'écrivent :

$$W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') = \sum_i \delta_{\mathbf{n}', F_i \mathbf{n}} W(n_i \rightarrow 1 - n_i) \quad (2.4)$$

où  $F_i$  est l'opérateur qui retourne le spin  $i$ ,  $F_i \mathbf{n} = (n_1, \dots, 1 - n_i, \dots, n_N)$ . Fredrickson et Andersen ont proposé de mettre en oeuvre ces taux de transition par une contrainte cinétique : si  $f_i$  est le nombre de sites mobiles plus proches voisins de  $i$ , les taux prennent la forme

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = f_i(f_i - 1) \cdots (f_i - f + 1) W_0(\Delta E), \quad (2.5)$$

où la contrainte cinétique impose que  $W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = 0$  si  $f_i < f$ . Le fait que certains taux soient nuls à cause de la contrainte cinétique ne viole pas le bilan détaillé parce qu'un retournement et son inverse sont toujours interdits en même temps. Les taux de transition peuvent être aussi écrits simplement en termes des variables de spin  $n_i$  :

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = \sum_{j_1 \neq j_2 \neq j_f} n_{j_1} \cdots n_{j_f} W_0(\Delta E), \quad (2.6)$$

où les indices  $j_1, \dots, j_f$  sont sommés sur tous les plus proches voisins du spin  $i$ . La contrainte peut aussi être dirigée (modèles à facilitation dynamique dirigée), c'est à dire que les sites mobiles doivent se trouver dans une position précise par rapport au

spin considéré pour lui permettre de se retourner (ex. plus proche voisin de droite en une dimension).

Pour comprendre l'origine de la dynamique vitreuse dans ce modèle il faut spécifier son hamiltonien : qu'il contienne ou non une interaction entre plus proches voisins, il ne comportera qu'un terme de champ extérieur proportionnel à  $\sum_i n_i$ . Donc le système aura tendance à disposer les spins de sorte que  $n_i = 0$ , et la concentration à l'équilibre  $c_{\text{eq}} = \langle n_i \rangle$  de régions mobiles va tendre à diminuer. Par conséquent suivant la (2.5), de moins en moins de transitions vont être permises et il y aura une sorte d'embouteillage dynamique qui va geler le système en lui conférant le ralentissement dynamique propre des systèmes vitreux. La vitesse du ralentissement dépend du nombre  $f$  de voisins qui doivent être mobiles pour que le spin bouge, et du type de contrainte. Du point de vue dynamique les SFMs peuvent en effet être divisés en deux sous-catégories : les modèles SFM avec  $f = 1$  et contrainte non dirigée et les modèles avec  $f > 1$  ou avec une contrainte dirigée. Les systèmes du premier groupe évoluent vers l'équilibre comme des défauts qui diffusent : un spin  $i$  avec  $n_i = 1$  peut faire retourner un de ses voisins  $j$ , qui lui-même pourra alors faire retourner un de ses voisins donc aussi le spin  $i$ . Si cela advient une région mobile aura effectivement diffusé du site  $i$  au site  $j$ , avec un temps de relaxation  $\tau$  d'Arrhenius de l'ordre de  $\tau \propto \exp(\beta)$  [98]. La dynamique du deuxième groupe, avec  $f > 1$  ou une contrainte dirigée, est par contre de type coopératif : plusieurs spins doivent se retourner simultanément pour que la relaxation se fasse (voir Fig. 2.1).

Le retournement d'un spin peut devenir un processus hautement coopératif qui demande qu'un certain nombre de spins participe au mouvement voulu, et donc il n'y a pas d'argument générique qui nous donne l'échelle de temps de relaxation du système. Par exemple en [65] il a été montré en simulant des modèles avec  $f > 1$  que le temps de relaxation n'est pas une fonction exponentielle de la température. En fait dans la plupart de ces modèles un comportement du genre  $\tau \propto \exp(A \exp(1/T))$  est suggéré.

Dans la suite on décrit les modèles SFM qui seront traités suivant le formalisme des histoires dans le chapitre 4.

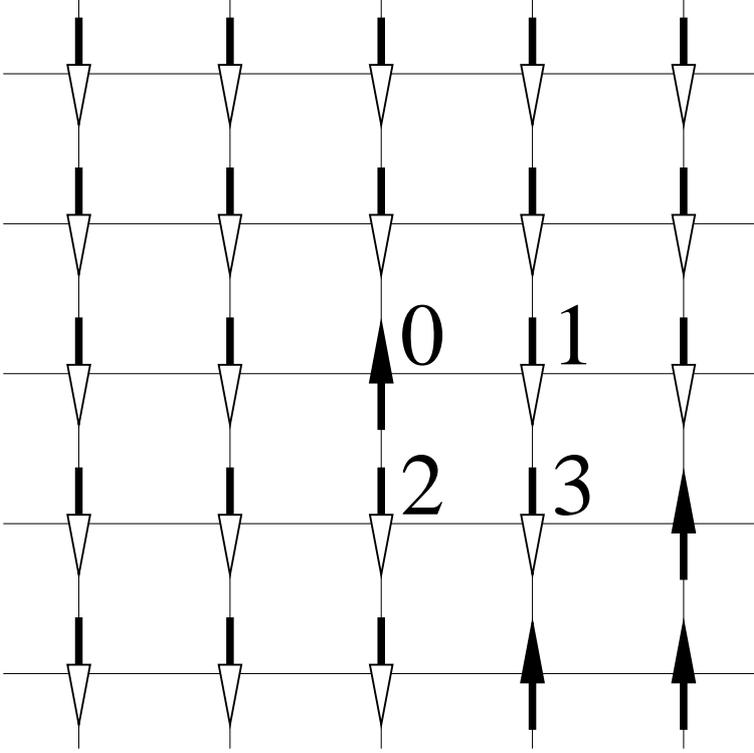


FIG. 2.1 – Un exemple de configuration d'une petite région d'un  $f, 2$ -SFM [98]. Le spin central, indiqué par 0, est dans un état mobile ( $n = 1$ ) et peut se retourner de façons différentes selon la valeur de  $f$ . Si  $f = 1$ , tous les quatre plus proches voisins avec  $n = 0$  peuvent se retourner, puis le spin 0 peut se retourner lui-même. Si  $f = 2$  par contre le spin 0 peut se retourner seulement à travers un processus coopératif, avec la séquence de retournements  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 0$  où  $3 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$ .

### Modèle FA

On considère premièrement le modèle FA de spins non-interagissant avec une fonction énergie de la forme :

$$E = \sum_i n_i \quad (2.7)$$

où  $i = 0, \dots, N$  sont les sites du réseau. La thermodynamique de ces systèmes, qui est celle de spins libres dans un champ externe, est complètement trivial. On choisit des taux de transition de Glauber, qui prennent la forme

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = C_i(\{n_j\}) \frac{e^{\beta(n_i-1)}}{1 + e^{-\beta}}, \quad (2.8)$$

où  $C_i(\mathbf{n})$  est la contrainte cinétique :  $C_i(\mathbf{n}) = 1$  si au moins un des plus proches voisins de  $i$  est mobile, autrement  $C_i(\mathbf{n})$  est nul. Il est facile de vérifier que la probabilité

d'équilibre d'une configuration  $\mathbf{n}$  est donnée par

$$P_{\text{eq}} = \prod_i \frac{e^{-\beta n_i}}{1 + e^{-\beta}} \quad (2.9)$$

et que la concentration d'équilibre des régions mobiles est :

$$c_{\text{eq}} = 1/(1 + e^{\beta}) , \quad (2.10)$$

qui tend vers zéro quand la température diminue. Ce modèle a une dynamique diffusive, avec des échelles de temps de relaxation exponentielles en fonction de la température  $\tau \propto e^{3\beta}$ , et ont donc un comportement du genre des verres forts [45]. Si le système est refroidi brusquement, la concentration des spins va diminuer grâce à un processus de croissance diffusive de domaines à haute densité  $n_i = 0$ , et le système *vieillit*, c'est à dire que la fonction de corrélation à deux temps définie comme :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{ij} [\langle n_i(t) n_j(t_w) \rangle - \langle n_i(t) \rangle \langle n_j(t_w) \rangle] \quad (2.11)$$

dépend fortement du temps d'attente  $t_w$  [42] pour  $t_w$  de l'ordre de l'unité. Une autre caractéristique non-triviale de la dynamique hors l'équilibre de ce système est que la fonction de réponse  $R(t, t_w)$  définie par l'Eq. (1.6) n'est pas monotone en fonction du temps  $t$  (voir par exemple [84] ou [29]). Le fait que l'hétérogénéité dynamique du modèle FA soit une conséquence directe de la contrainte dynamique a été montré en [50] par Garrahan et Chandler en simulant les facteurs de structure des moyennes temporelles de spins

$$s_i(t; \Delta t) \equiv (\Delta t)^{-1} \int_0^{\Delta t} dt' n_i(t + t') . \quad (2.12)$$

Le facteur de structure  $S(k)$  est la transformée de Fourier spatiale des fonctions de corrélation normalisées  $\langle s_i^2(t; \Delta t) s_j^2(t; \Delta t) \rangle / \langle s_i^4 \rangle$ , et décroît approximativement comme  $S(k) \sim k^{-2}$ . La forme des hétérogénéités dynamiques, ou domaines à haute densité, du modèle FA est assez complexe malgré la symétrie de la contrainte : il a été prouvé que les hétérogénéités ont la forme de polygones semi-convexes [50]. Récemment les échelles de temps de relaxation du modèle FA ont été connectées avec la taille des hétérogénéités dynamiques [24], ce qui supporte l'idée que la taille des hétérogénéités dynamiques puisse indiquer si un système se trouve ou non dans un état vitreux.

## East Model

Le modèle East est un modèle à contrainte dirigée et donc à dynamique coopérative. Suivant l'expression pour les taux de transition (2.8), l'East Model en dimension trois est défini par la contrainte  $C_i = 1$  pour le site  $i = (x, y, z)$  si au moins l'un des sites  $(x - 1, y, z)$ ,  $(x, y - 1, z)$  ou  $(x, y, z - 1)$  est mobile, avec  $n_i = 1$ , et autrement  $C_i = 0$ .

Le comportement à l'équilibre est, comme pour la modèle FA, celui d'un système de spins indépendants avec  $c_{\text{eq}} = 1/(1 + e^\beta)$ . Par contre après un brusque refroidissement le retour à l'équilibre se fait avec un temps de relaxation dépendant de la température de la forme  $\tau \propto \exp(\beta^2/\ln 2)$  [2], qui est un comportement typique des verres fragiles.

La fonction d'autocorrélation à deux temps (2.11) a été simulée en [29]. Pendant le refroidissement d'un East Model, plusieurs échelles de temps bien séparées caractérisent sa dynamique hors d'équilibre, et donc  $C(t, t_w)$  présente des plateaux qui dépendent de  $t_w$ , mais cette fois la fonction de réponse est monotone dans le temps.

Le modèle East présente comme le modèle FA des hétérogénéités dynamiques, avec un facteur de structure qui décroît comme  $S(k) \sim k^{-\ln 3/\ln 2}$  et la forme des domaines à haute densité aplatie sur le côté bas à cause de l'asymétrie de la contrainte.

## Réductibilité

Jusqu'ici on a supposé que le comportement à l'équilibre des KCM était décrit par la distribution de Boltzmann  $p_{\text{eq}} \sim \exp(-\beta E(\mathbf{n}))$ , qui exprime de la seule façon possible la probabilité d'être dans un état  $\mathbf{n}$  à l'équilibre, et qui est la seule limite de  $p(\mathbf{n}, t)$  pour  $t \rightarrow \infty$ . Ceci est vrai à deux conditions : que la dynamique obéisse au bilan détaillé par rapport à la loi d'équilibre et que la dynamique soit irréductible. Irréductible veut dire que le système passe d'une configuration à n'importe quelle autre en un nombre fini de transitions à taux non-nuls. Cette condition se réfère à un système fini et ne dit rien sur le temps nécessaire pour aller d'une configuration à une autre. Une dynamique irréductible reste ergodique.

À cause des contraintes cinétiques les KCM peuvent être des modèles réductibles, et donc avoir un espace des configurations divisé en sous-espaces dans chacun desquels le bilan détaillé est satisfait et l'équilibre est atteint. Si le système part au temps zéro dans une configuration d'un sous-espace, il va arriver à l'équilibre dans une configuration  $\mathbf{n}$  du même sous-espace avec une probabilité donnée par la distribution de Boltzmann du seul sous-espace visité.

Un exemple de réductibilité est donné par le modèle FA, où la configuration avec tous les spins  $n_i = 0$ , où tout le matériau est à haute densité, ne permet aucun retournement. Si le système se trouve dans cette configuration à  $t = 0$  il ne va jamais en sortir et d'autre part cette configuration ne pourra jamais être atteinte par d'autres parce qu'un spin avec  $n_i = 1$  isolé ne peut se retourner. L'espace des configurations est donc séparé en deux parties : une contenant la seule configuration  $\mathbf{n} = \{0, \dots, 0\}$  qui est la configuration d'équilibre à température nulle, et l'autre contenant toutes les autres configurations, à température  $T > 0$ . Dans ce cas la première partie contient une fraction très basse ( $2^{-N}$ ) du nombre total de configurations possibles, qui tend vers zéro dans la limite thermodynamique, et n'affecte pas les moyennes à l'équilibre dans la deuxième partie. Le modèle FA est pour cette raison considéré comme *effectivement irréductible* dans la limite thermodynamique.

Formellement un système est considéré effectivement irréductible si la probabilité  $p(c, L \rightarrow \infty) = 1$  qu'une configuration à concentration  $c > 0$  appartienne à la partition à haute température dans la limite thermodynamique soit 1. Prouver l'irréductibilité du modèle FA est assez trivial; de plus Fredrickson et Andersen [45] avaient déjà prouvé de façon non-rogoureuse que même le 3,3-SFM est effectivement irréductible, et plus récemment Schonmann [102] a démontré rigoureusement que tous les SFMs avec  $2 \leq f \leq d$  sont effectivement irréductibles. Pour le modèle East les mêmes arguments que le modèle FA s'appliquent.

### 2.1.2 Modèles avec loi de conservation locale

La deuxième classe de modèles cinétiement contraints est constituée par des modèles de particules sur réseau, où la dynamique conserve certaines quantités définies localement. Ces modèles ont été introduits pour reproduire la dynamique des verres structuraux, où le nombre de particules est conservé.

Dans ces modèles les particules occupent des sites d'un réseau à dimension finie et peuvent bouger d'un site à son plus proche voisin selon des règles dynamiques précises, et chaque site peut être occupé par une seule particule. Ces systèmes sont les modèles cinétiement contraints plus simples qu'on puisse imaginer parce que leur comportement à l'équilibre est complètement trivial : l'énergie est la même pour toutes les configurations, qui sont donc équiprobables et le paysage énergétique est plat. Kob et Andersen [70] ont introduit le plus simple de ces modèles, à l'origine pour particules

sur un réseau cubique. Les particules bougent vers un site voisin vide avec un taux de probabilité unitaire, avec la condition que la particule ait moins de  $m$  sites voisins occupés *avant et après* le mouvement. La restriction sur le nombre de voisins après le mouvement est nécessaire pour garantir le bilan détaillé. Le choix de  $m$  détermine la force de la contrainte cinétique. Dans un réseau cubique en trois dimensions, le modèle n'est pas contraint pour  $m = 6$ , tandis que pour  $m = 3$  il est fortement réductible : tout ensemble de 8 particules occupant les sites d'un cube  $2 \times 2 \times 2$  ne bougera jamais, toute particule ayant au moins trois voisins occupés.

### Modèle de Kob et Andersen

Le modèle de Kob et Andersen (KA) est un modèle cinétiquement contraint de gaz sur réseau cubique qui ne produit pas d'effets de réductibilité triviaux. La contrainte cinétique est donc adaptée à la dimension de l'espace : en dimension  $d = 3$  pour qu'une particule bouge il faut que moins de  $m = 4$  plus proches voisins soient occupés, en dimension  $d = 2$  il faut prendre  $m = 3$ . Dans ce modèle les particules peuvent se trouver "en cage" si elles ont trop de voisins occupés, d'où le fort ralentissement de la dynamique. À cause de la facilitation par les vides, le régime vitreux dans le modèle KA commence à une haute concentration, ou densité  $c = \langle n_i \rangle \simeq 1$ , tandis que dans les SFM la dynamique devenait vitreuse à  $c \simeq 0$ . On remarque que si une configuration du modèle KA est décrite en utilisant les variables  $n_i$ , les particules sont traitées comme indiscernables, ce qui est approprié pour étudier les fluctuations de densité par exemple.

Il a été prouvé en [109] que dans la limite thermodynamique  $L \rightarrow \infty$  le modèle KA est effectivement irréductible à toute densité pour tout  $m > d$ , toutefois les effets de taille finie sur la réductibilité sont assez importants dans ce modèle et il est opportun d'en parler ici puisque une partie du travail de thèse a été de simuler des modèles de Kob et Andersen en taille finie.

La partition de l'espace des configurations à haute température correspond ici aux configurations dans lesquelles il n'y a aucune particule bloquée. Dans [70] il a été défini une "structure" de particules gelées en enlevant itérativement toutes les particules mobiles du système jusqu'au moment où il ne reste plus que les particules gelées, qui constituent cette "structure", et qui est la limite inférieure du nombre de particules gelées. Un exemple de structure gelée peut être un tube  $2 \times 2$  courant le long d'un système de taille finie avec des conditions aux limites périodiques. En [70] la probabilité  $p(c, L)$

d'avoir une structure gelée à une densité  $c$  dans un cube de côté  $L$  a été simulée : pour une taille de  $L = 20$  les effets de réductibilité sont négligeables jusqu'à  $c \simeq 0.86$ , mais pour des densités un petit peu plus grandes (de l'ordre de 0.89) le système doit être beaucoup plus grand pour qu'il puisse être considéré effectivement irréductible. Cela sera pris en compte dans le choix des paramètres fait dans cette thèse.

En ce qui concerne les temps de relaxation vers l'équilibre, en [70], la constante d'autodiffusion  $D_s$  a été déterminée pour des densités comprises entre  $c \simeq 0.3$  et  $c = 0.86$ , en obtenant  $D_s \sim (c_{\text{dyn}} - c)^\phi$ , qui prédit un arrêt de la dynamique pour  $c_{\text{dyn}} = 0.881$  avec un exposant  $\phi = 3.1$ . Donc il y aurait une transition dynamique avec une divergence de l'échelle de temps de diffusion  $1/D_s$ . Les temps de relaxation extrapolés des fonctions de corrélation à l'équilibre ont aussi montré une divergence en loi de puissance aux alentours de  $c_{\text{dyn}}$ . On remarque que l'exposant  $\phi$  semble être indépendant de la contrainte cinétique appliquée, donnée notamment par  $m$ .

Les propriétés hors l'équilibre du modèle KA sont en général étudiées, ne pouvant pas varier la densité, en mettant le système en contact avec des réservoirs extérieurs et en faisant varier leur potentiel chimique. Dans ce cas les effets de réductibilité sont fortement diminués. Pour étudier les propriétés de vieillissement, le déplacement moyen des particules est considéré comme une fonction à deux temps :

$$B(t, t_w) = \langle (\mathbf{r}_a(t) - \mathbf{r}_a(t_w))^2 \rangle \quad (2.13)$$

où  $\mathbf{r}_a$  est le vecteur position de toutes les particules du système. Un certain temps après une hausse du potentiel chimique dans les réservoirs, *i.e.* pour  $t_w$  assez large,  $B(t, t_w)$  se met à dépendre logarithmiquement de  $(t - t_w)/t_w$ , prouvant que la diffusion devient anormale.

La coopérativité de la dynamique du modèle KA a été prouvée par plusieurs auteurs (voir par exemple [109]). Les hétérogénéités dynamiques ont été étudiées pour le modèle KA en [43], en utilisant les fonctions de corrélation à quatre points définies en (1.10).

### Gaz sur réseau triangulaire

Le modèle triangulaire, comme son nom l'indique, est un modèle de particules sur un réseau triangulaire en deux dimensions, introduit en [66]. La contrainte dynamique est que les deux sites qui sont les plus proches voisins et du site de départ et de celui d'arrivée (voir Fig. 2.2) doivent être vides pour permettre le saut.

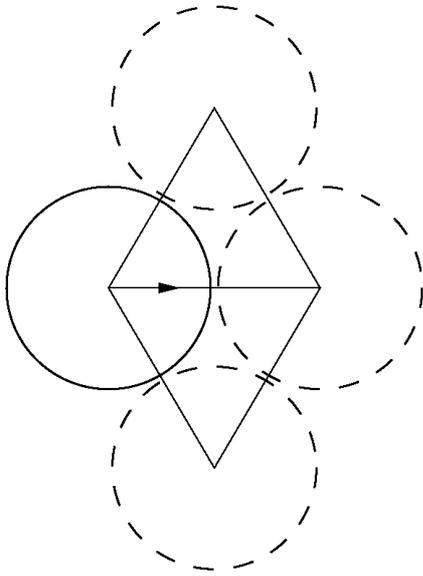


FIG. 2.2 – Possible saut de particule dans le modèle triangulaire (TLG). Pour pouvoir bouger, les sites encerclés d’une ligne pointillée, c’est à dire les deux sites plus proches de la particule et du site d’arrivée, et le site d’arrivée même, doivent être vides [98].

Le modèle triangulaire présente plusieurs caractéristiques de la dynamique vitreuse (pour une revue voir [68]) qui disparaissent quand la contrainte est réduite à un seul site plus proche voisin vide [66] puisque la dynamique devient celle de paires de sites vides qui diffusent.

Il a été montré en [66] que dans la limite thermodynamique il n’y a pas de particule bloquée de façon permanente pour toute densité  $c < 1$ . Toutefois en taille finie on retrouve la présence de structures gelées de façon permanente. Les constantes de diffusion (auto et collective) ont été simulées en [66, 67] d’où il résulte que la constante d’auto-diffusion  $D_s$  décroît de quatre ordres de grandeur quand la concentration de particules augmente de  $c = 0$  à  $c = 0.77$ , laissant supposer l’existence d’une transition dynamique. De plus, une échelle de longueur dynamique, définie comme le volume occupé par la fraction de particules gelée de façon permanente, augmente quand la concentration  $c \rightarrow 1$ .

En [67] il a été montré en évaluant des facteurs de structure dynamiques pour le TLG que la dynamique devient hétérogène au dessous d’une certaine longueur.

## 2.2 Modèles avec désordre gelé

Les quantités déterministes dans les modèles sans désordre deviennent des variables aléatoires (par exemple l'énergie d'une configuration, la position d'un spin ou d'une particule etc.) dans les modèles désordonnés. Les moyennes d'observables d'un système désordonné macroscopique doivent par conséquent être effectuées sur toutes les configurations thermodynamiques *et* sur toutes les configurations du désordre possibles. À cause de ces difficultés, les modèles désordonnés considérés pour l'étude des phénomènes vitreux sont souvent des modèles très simples et facilement solubles du moins à l'équilibre. En dépit de cette simplicité, le désordre fait que ces modèles reproduisent beaucoup de caractéristiques de la dynamique vitreuse.

Dans cette section on décrit les trois modèles désordonnés exploités pour tester nos idées : un exemple de modèle magnétique désordonné (verre de spin) avec interaction à  $p$  spins ou *p-spin model*, le modèle de pièges dirigé ou *Directed Trap Model* et le modèle à énergies aléatoires ou *Random Energy Model* (REM).

### 2.2.1 Verres de spin

Les verres de spin sont des alliages de ions magnétiques dilués dans une matrice non-magnétique, par exemple  $Ag_{1-x}Mn_x$  avec  $x \sim 3\%$ . Généralement les distances  $r_{ij}$  entre les ions magnétiques sont aléatoires et donc leurs interactions  $J_{ij} = J(r_{ij})$  sont aussi des variables aléatoires à valeurs positives et négatives. Cela induit de la frustration et un ralentissement dynamique. La dynamique de ces systèmes, abondamment explorée expérimentalement, est en effet de type vitreux (voir [16] pour une revue complète).

Les investigations théoriques des verres de spin sont fondées typiquement sur le modèle d'Ising avec des interactions aléatoires et à courte portée, c'est à dire avec un hamiltonien de la forme :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad \sigma_i = \pm 1 , \quad (2.14)$$

où  $\langle ij \rangle$  veut dire que la somme est faite sur toutes les paires distinctes de plus proches voisins. Les interactions  $J_{ij}$  sont en générale des variables gaussiennes de moyenne nulle et variance

$$\overline{J_{ij} J_{kl}} = \frac{1}{2} (\delta_{i,k} \delta_{j,l} + \delta_{i,l} \delta_{j,k}) W_{ij} , \quad (2.15)$$

où la barre ( $\overline{\quad}$ ) indiquera tout au long de cette thèse la moyenne sur le désordre. Pour connaître la physique du système il est nécessaire d'effectuer des moyennes sur le désordre, par exemple pour calculer l'énergie libre :

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \overline{\sum_{\{\sigma=\pm 1\}} e^{-\beta H}} \right) \quad (2.16)$$

ou pour connaître les valeurs attendues d'observables et les fonctions de corrélation. Le problème est que les variables aléatoires elles-mêmes peuvent fluctuer avec le temps si par exemple les ions magnétiques diffusent dans le verre. Il faut alors comparer le temps typique de fluctuation du désordre  $\tau_{\text{dis}}$  au temps d'observation expérimentale  $\tau_{\text{exp}}$ . Si  $\tau_{\text{exp}} \gg \tau_{\text{dis}}$  les variables aléatoires arrivent à l'équilibre thermique et sont donc moyennées avec les configurations : l'énergie libre devient

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \overline{Z} = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \overline{\sum_{\{\sigma=\pm 1\}} e^{-\beta H}} \right). \quad (2.17)$$

Cette moyenne est appelée *moyenne recuite*.

En pratique les temps de diffusion des défauts sont très longs, notamment dans la phase vitreuse avec le ralentissement de la dynamique, et donc  $\tau_{\text{exp}} \ll \tau_{\text{dis}}$ . Dans ce cas la moyenne thermique doit être effectuée avant la moyenne sur le désordre, comme dans l'équation (2.16). Ce type de moyennage est appelé *moyenne gelée*. Le fait que  $F$  (où  $\ln Z$ ) doit être moyennée et non pas  $Z$  est au coeur de la difficulté technique de l'étude des systèmes désordonnés. Cette opération a demandé jusqu'à présent la mise en oeuvre de techniques de calcul particulières, comme par exemple la méthode des répliques [87], ou de reprendre des méthodes de théorie des champs, comme le formalisme de Martin-Siggia-Rose [82] ou la technique de De Dominicis et al. [34].

On remarque enfin que les verres de spin sont des reproductions, expérimentales ou théoriques, des verres structuraux, dont seule la structure amorphe est responsable de la dynamique vitreuse, et non pas la frustration des interactions magnétiques des verres de spins.

## Modèles à $p$ -spins

Le modèle à  $p$ -spins, introduit en [37] et étudié par Gross et Mézard en [60], est constitué par  $N$  spins sur un réseau complet qui interagissent aléatoirement par groupes

de  $p < N$  spins. L'énergie d'interaction est de la forme :

$$E = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} \quad (2.18)$$

où la distribution de probabilité gaussienne

$$p(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \left( \frac{N^{p-1}}{\pi J^2 p!} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{(J_{i_1 i_2 \dots i_p})^2 N^{p-1}}{J^2 p!}} \quad (2.19)$$

est normalisée de façon à avoir une énergie et une énergie libre extensive en  $N$ . Parmi les modèles de verres, les modèles à  $p$  spins avec  $p \geq 3$  sont ceux qui ont le comportement dynamique le plus similaire aux verres structuraux [88, 69]. Pour cette raison leur statique comme leur dynamique ont été abondamment explorées.

Le plus souvent pour maintenir l'énergie finie en attribuant un poids statistique presque nul aux configurations avec des valeurs des spins trop grandes, on impose une contrainte sphérique sur la valeur des spins :

$$\sum_i \sigma_i^2 = N . \quad (2.20)$$

Ceci a aussi l'avantage de simplifier quelque peu les calculs.

Ce modèle, dit modèle à  $p$ -spins sphérique (SPSM), a été introduit par Crisanti et al. en [30] et ses propriétés statiques sont connues. En utilisant la méthode des répliques on peut montrer [30] que ce système présente une transition de second ordre (pour des champs externes assez faibles) entre une phase thermodynamique ordonnée où l'énergie libre présente une grande quantité de minima locaux et une phase désordonnée où l'aimantation est nulle. La dynamique de ce modèle a été étudiée en [31] : dans la phase ordonnée les fonctions de corrélations décroissent en loi de puissance  $\sim t^{-\nu}$  et la dynamique n'est plus ergodique.

Le modèle sphérique avec  $p = 2$  a été également résolu en utilisant des propriétés de matrices aléatoires [76] et une transition de phase statique de deuxième ordre à une température  $T_c$  entre une phase ordonnée avec un paramètre d'ordre non-nul, et une phase désordonnée à paramètre d'ordre nul, a été trouvée. Le paysage énergétique de ce modèle est extrêmement simple, pourtant sa dynamique est loin d'être triviale. Cugliandolo et Dean [33] ont établi que le modèle n'atteint l'équilibre que sur des temps très longs, que les fonctions de corrélation sont des lois de puissance dans le temps, et que le système vieillit.

Une autre version du modèle à  $p$ -spins nous intéressera particulièrement : le modèle de spins introduit en [69] défini par l'hamiltonien :

$$\beta H = \sum_i \left( \frac{r_0}{2} \sigma_i^2 + u \sigma_i^4 \right) - \beta \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} \quad (2.21)$$

où  $\beta = T^{-1}$  et  $r_0 < 0$  et  $u > 0$  sont des constantes. Dans la limite  $r_0 \rightarrow -\infty$  et  $u \rightarrow \infty$  on retrouve le modèle à  $p$ -spins sphérique.

Ce modèle est appelé en littérature un modèle de spins *mous* parce que le potentiel quadratique contraint les spins à rester dans un des deux minima de façon plus atténuée par rapport aux modèles de spins durs où les variables de spins ne peuvent prendre que deux valeurs, i.e.  $\pm 1$ , et aucune contrainte supplémentaire n'est présente. La statique de ce modèle a été résolue exactement pour  $p = 2 + \epsilon$  avec  $\epsilon \ll 1$  en [69], où les auteurs prouvent qu'en dessous d'une certaine température  $T_g$  le système se trouve dans un état vitreux, et montrent la connection entre ce modèle et la théorie dynamique des verres structuraux.

La raison pour laquelle on s'intéresse à ce type de modèle est que son analyse se fait (voir [69]) en utilisant un formalisme dynamique, repris de [34], qui se formule en termes d'intégrales fonctionnelles. Il se trouve que l'application du formalisme thermodynamique des histoires à un modèle semblable passe justement par une formulation en termes d'intégrales fonctionnelles, comme on va le voir dans le chapitre 6.

### Modèle utilisé

Pour la raison indiquée ci-dessus on a voulu se servir d'un modèle proche de (2.21) mais exactement soluble : on a choisi la version en champ moyen du modèle à  $p$ -spins *mous*, avec  $p = 2$ , défini par l'hamiltonien :

$$\beta H = -\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{u}{N} \sum_{i,j} \sigma_i^2 \sigma_j^2. \quad (2.22)$$

avec

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2}}. \quad (2.23)$$

Le rôle du terme proportionnel à  $u > 0$  est de supprimer statistiquement les configurations avec des valeurs extrêmes des spins, tout comme la contrainte sphérique (2.20) ou le terme découplé en (2.21).

Comme le modèle à  $p = 2$ -spins sphérique de [10] et à l'inverse du modèle donné par l'hamiltonien (2.21) introduit en [69], ce modèle est exactement soluble, et l'application de la thermodynamique des histoires est possible.

### 2.2.2 Modèles de pièges

La phase vitreuse des modèles désordonnés de verres est caractérisée par un paysage d'énergie libre très complexe, avec beaucoup de vallées organisées en structures hiérarchiques. Les modèles de pièges ont été introduits en [21] pour modéliser de la façon la plus simple cette situation énergétique. Ils sont constitués par  $N$  pièges indépendants disposés sur un réseau complet et identifiés par l'indice  $n$ . Chaque piège est caractérisé par une énergie  $E_n$  et éventuellement par une observable générique  $M_n$ . L'évolution dynamique qu'on considère ici est une dynamique de Markov en temps continu entre les pièges, spécifiée par la probabilité  $P_n(t)$  que le système se trouve dans le piège  $n$  au temps  $t$ , et par le taux de probabilité par unité de temps  $W_{n',n}$  que le système aille du piège  $n$  au piège  $n'$ , qui est pris en général indépendant du temps mais peut dépendre d'une seule ou bien des deux énergies  $E_n, E_{n'}$ .

La dynamique du système est donc à nouveau gouvernée par une équation maîtresse du type (2.2)

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_{n'} W_{n,n'} P_{n'}(t) - \sum_n W_{n',n} P_n(t) . \quad (2.24)$$

Toutes les propriétés des modèles de pièges dépendent du choix des taux de transition  $W_{n',n}$ . On choisit ici, suivant [41] et [90], un modèle à une dimension avec des taux de transition de la forme  $W_{n',n} = 1/\tau_n$  et  $W_{n,n'} = 1/\tau_{n'}$  où  $\tau_n$  est donc le temps d'attente dans le piège  $n$ . Le modèle est désordonné donc les temps d'attente  $\tau_n$  sont des variables aléatoires. La distribution de probabilité choisie décroît en loi de Lévy pour  $\tau \gg 1$  :

$$p(\tau) \propto \frac{1}{\tau^{1+\mu}} , \quad (2.25)$$

avec  $\mu \in ]0, 1[$ . Les propriétés vitreuses de la dynamique découlent directement du fait que  $\mu < 1$  et donc le temps d'attente moyen dans chaque piège est infini, comme tous les moments de variables distribuées selon une loi de Lévy. Il en découle par exemple que ce modèle suit une diffusion "anormale" [91] parce que la probabilité moyenne  $\overline{P(n, t|0, 0)}$  d'être dans le piège  $n$  au temps  $t$  en partant du piège 0 au temps  $t = 0$  suit, pour

$t \rightarrow \infty$ , une loi d'échelle de la forme :

$$\overline{P(n, t|0, 0)} \simeq \frac{1}{\xi(t)} g_\mu \left( \frac{n}{\xi(t)} \right) \quad (2.26)$$

où l'échelle de longueur caractéristique  $\xi(t)$  a un comportement sub-diffusif :

$$\xi(t) \sim t^{\frac{\mu}{1+\mu}} . \quad (2.27)$$

### Modèle de pièges à dynamique dirigée

On s'intéresse à un particulier modèle de pièges, où les pièges sont placés sur un réseau unidimensionnel, et le système peut sauter seulement d'un piège à son piège plus proche voisin de droite. Les conditions aux limites sont périodiques.

L'équation maîtresse devient donc :

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = -\frac{P_n(t)}{\tau_n} + \frac{P_{n-1}(t)}{\tau_{n-1}} \quad (2.28)$$

avec la condition initiale  $P_n(t=0) = \delta_{n,0}$ . La distribution de probabilité des temps d'attente est de la forme :

$$p(\tau) = \frac{\mu}{\tau^{1+\mu}} , \quad (2.29)$$

et la probabilité de sortir d'un piège  $\tau_i$  en un temps  $t$  est une poissonienne de moyenne  $\tau_i$  :

$$f_i(t) = \frac{1}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}} . \quad (2.30)$$

### Propriétés vitreuses

Les modèles de pièges reproduisent assez bien plusieurs caractéristiques expérimentales de la dynamique vitreuse et en particulier ont été très utilisés pour étudier le vieillissement des systèmes vitreux. L'étude des modèles de pièges se trouve être facilitée par l'emploi de techniques de renormalisation qui permettent d'évaluer des quantités hors l'équilibre comme les exposants de persistance, les fonctions de corrélation à deux temps et les propriétés de localisation [57] (pour une revue voir [91]).

Le fait que le temps d'attente moyen dans un piège soit infini a pour conséquence directe des effets de vieillissement. Des simulations Monte-Carlo et des raisonnements

sur les changements d'échelle [97] ont montré que la probabilité  $\Pi(t + t_w, t_w)$  de ne pas sauter dans un autre piège pendant l'intervalle de temps  $[t_w, t + t_w]$  est donnée par

$$\Pi(t + t_w, t_w) \simeq \Pi\left(\frac{t}{t_w^{\nu(\alpha)}}\right), \quad (2.31)$$

avec un exposant  $\nu(\alpha)$  donné en une dimension par [97]

$$\nu(\alpha) = \frac{1 - \alpha}{1 + \mu}, \quad (2.32)$$

où  $\alpha$  est une constante donnée en [9]. Ce phénomène est appelé *sous-vieillessement*. D'autre part la fonction de corrélation  $C(t + t_w, t_w)$ , définie comme la probabilité d'être au temps  $(t + t_w)$  dans le même piège qu'au temps  $t_w$  présente du vieillissement habituel :

$$C(t + t_w, t_w) \simeq C_\mu\left(\frac{t}{t_w}\right) \quad (2.33)$$

Il y a donc deux échelles de temps différentes,  $t_w^\nu$  et  $t_w$ , qui jouent un rôle dans le vieillissement du système. Il a été prouvé [6] qu'une grande quantité de modèles spin-glass en champ moyen vieillissent exactement comme le Trap Model, comme par exemple le modèle à énergies aléatoires décrit dans la prochaine section et les modèles à  $p$ -spin avec  $p \geq 3$ .

Plus récemment en [99] le facteur qui quantifie la violation du théorème de fluctuation-dissipation (défini par l'Éq. (1.7)) a été relié aux taux de transition de deux modèles de pièges. Une application récente et très intéressante du vieillissement des modèles de pièges est l'explication des bulles de dénaturation dans les séquences d'ADN aléatoires [61].

### 2.2.3 Modèle à énergies aléatoires

Le modèle à énergies aléatoires (REM) est l'un des systèmes désordonnés les plus simples. Il a été introduit par Derrida en 1980 [37] : pour la statique il se trouve être équivalent au modèle à  $p$ -spin pour  $p \rightarrow \infty$  [60].

Le REM est défini par  $2^L$  niveaux d'énergie  $E_i$  qui sont des variables indépendantes distribuées avec une distribution de probabilité gaussienne de la forme :

$$P(E) = \frac{e^{-\frac{E^2}{J^2 L}}}{\sqrt{\pi L J^2}}. \quad (2.34)$$

La probabilité  $P_i^{\text{eq}}$  de trouver le système dans le niveau  $i$  est donnée par

$$P_i^{\text{eq}} = Z^{-1} e^{-\beta E_i} \quad (2.35)$$

où la fonction de partition est donnée par

$$Z = \sum_{j=1}^L e^{-\beta E_j} . \quad (2.36)$$

avec  $\beta = 1/T$ . Ce modèle exhibe une transition de phase à une température critique  $T_c = J/2\sqrt{\ln 2}$  [37]. Pour des températures  $T < T_c$  dans la limite thermodynamique l'énergie libre devient une constante  $E_0(L) \simeq LJ\sqrt{\ln 2}$  et l'entropie est nulle. Les propriétés vitreuses de la phase à basse température, décrites par la suite, découlent du fait que les niveaux d'énergie les plus bas, qui dominent la fonction de partition (2.36) dans la phase à basse température, suivent une distribution exponentielle [89]. En effet ces niveaux d'énergie sont les valeurs extrêmes d'une distribution gaussienne, et suivent donc une statistique des extrêmes de type Gumbel. On reporte ici la démonstration donnée en [75].

### Dynamique de la phase à basse température

Puisque l'énergie dans la phase gelée est une constante à l'ordre dominant ( $\mathcal{O}(L)$ ), les énergies des  $N$  niveaux les plus bas peuvent s'écrire

$$E_i = E_0(L) + \epsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (2.37)$$

où  $\epsilon_i$  est une variable aléatoire petite et non extensive. On définit l'énergie  $\mathcal{E}_N = E_0(L) + \epsilon_c$  telle que :

$$2^L \int_{-\infty}^{\mathcal{E}_N} dE P(E) = N . \quad (2.38)$$

En utilisant le développement asymptotique de la fonction erreur complémentaire on trouve pour des énergies  $E_N$  grandes et négatives :

$$N = 2^L \frac{\sqrt{LJ^2} e^{-\mathcal{E}_N^2/LJ^2}}{2\sqrt{\pi}(-\mathcal{E}_N)} \left( 1 + \mathcal{O}\left(\frac{LJ^2}{\mathcal{E}_N^2}\right) \right) . \quad (2.39)$$

De cette expression on déduit la valeur de  $\mathcal{E}_N$  :

$$\mathcal{E}_N = E_0(L) + \frac{J \ln(2N\sqrt{\pi \ln 2})}{2\sqrt{\ln 2}} + o(1) \quad (2.40)$$

où  $o(1) \rightarrow 0$  quand  $L \rightarrow \infty$  et :

$$E_0(L) = -LJ\sqrt{\ln 2} + \frac{J \ln L}{4\sqrt{\ln 2}}. \quad (2.41)$$

Le premier terme de l'équation (2.41) est la partie extensive de l'énergie libre du REM dans la phase gelée. Dans la limite de grand  $N$  on peut considérer les  $N$  niveaux les plus bas  $E_1, E_2, \dots, E_L$  comme des variables indépendantes distribuées selon :

$$P_N(E) = \begin{cases} \frac{P(E)}{\int_{-\infty}^{\mathcal{E}_N} dE' P(E')}, & \text{pour } E \leq \mathcal{E}_N, \\ 0, & \text{pour } E > \mathcal{E}_N. \end{cases} \quad (2.42)$$

On peut développer la distribution de probabilité (2.34) :

$$\frac{E_i^2}{LJ^2} = \frac{(E_0(L) + \epsilon_i)^2}{LJ^2} = L \ln 2 + \frac{1}{2} \ln L - \frac{2\sqrt{\ln 2}}{J} \epsilon_i + o(1). \quad (2.43)$$

En utilisant la définition (2.38) et en plaçant ce développement dans l'Éq. (2.42) on a :

$$p(\epsilon) \equiv P_N(E_0 + \epsilon) = \begin{cases} \rho e^{\rho(\epsilon - \epsilon_c)}, & \text{pour } \epsilon \leq \epsilon_c, \\ 0, & \text{pour } \epsilon > \epsilon_c. \end{cases} \quad (2.44)$$

où

$$\rho^{-1} \equiv T_c = \frac{J}{2\sqrt{\ln 2}} \quad (2.45)$$

est la température critique et

$$v \equiv N e^{-\rho \epsilon_c} = \frac{1}{2\sqrt{\pi \ln 2}}. \quad (2.46)$$

Prendre la limite thermodynamique dans ce modèle correspond à prendre  $N \rightarrow \infty$  et  $\epsilon_c \rightarrow \infty$  en gardant  $N e^{-\rho \epsilon_c} = v$  constant.

Pour la dynamique de la phase à basse température du REM, De Dominicis et al. [35] ont postulé une équation maîtresse de la forme

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j=1}^N W_{ij} P_j(t) - \sum_{j=1}^N W_{ji} P_i(t) \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (2.47)$$

où les taux de transition  $W_{ji}$  pour aller du niveau  $j$  au niveau  $i$  sont pris de la forme :

$$W_{ji} = B_j V_j V_i \quad \text{avec} \quad B_j = e^{-\beta \epsilon_j}, \quad (2.48)$$

où  $i = 1, \dots, N$  et les  $V_i$  sont des variables aléatoires positives. On vérifie facilement que ces taux de transition satisfont le bilan détaillé par rapport à la distribution d'équilibre  $B_i$  pour tout  $V_i$ . Suivant [75] on choisi de prendre  $V_i = B_i^{-q}$  avec  $q \in (0, 1)$ .

La distribution des  $B_i$  et donc des  $V_i$  peut être déduite de celle des  $\epsilon_i$  et se trouve être :

$$p(B) = \begin{cases} \frac{v}{N} B^{-1-\mu}, & \text{for } \left(\frac{v}{N}\right)^{1/\mu} < B, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.49)$$

où  $\mu = \rho/\beta = T/T_c$ ,  $\mu \in ]0, 1[$ . On se trouve donc à nouveau avec une distribution de Lévy avec des moments divergents.

Si on associe à chaque niveau  $i$  une aimantation aléatoire  $m_i$  de moyenne nulle et variance 1, le modèle à énergies aléatoires peut être considéré comme un modèle magnétique dont on peut étudier les propriétés vitreuses. Il a été prouvé en [75] que les fonctions d'autocorrélations pour l'aimantation suivent une loi non-exponentielle en fonction du temps :

$$\begin{aligned} \overline{C(t)} &\propto t^{-2\mu/q} && \text{pour } q + \mu > 1, \\ \overline{C(t)} &\propto t^{-\eta} e^{-Dt^\gamma} && \text{pour } q + \mu < 1 \text{ et } q < \frac{1}{2}, \\ \overline{C(t)} &\propto t^{-2\mu/(2q-1)} && \text{pour } q + \mu < 1 \text{ et } q > \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

où  $D$  est une constante,  $\gamma = \mu/(1 - 2q + \mu q/(1 - q))$  et  $\eta = (2\mu/(1 - q) - 1)\gamma$ . La dynamique de ce système est donc anormalement ralentie.

Une autre propriété vitreuse remarquable de la phase à basse température du REM est le vieillissement, étudié en [8], qui se trouve avoir les mêmes caractéristiques que le vieillissement du modèle de pièges. En [7] les auteurs prouvent en effet que les deux modèles se trouvent dans la même classe d'universalité dans la phase à basse température : ce point sera développé par la suite (voir la section 5.3).

# Chapitre 3

## Thermodynamique des histoires

Dans ce chapitre on décrit le formalisme thermodynamique des histoires développé par Ruelle et collaborateurs en [96] dans le contexte des systèmes dynamiques, et adapté aux systèmes à dynamique markovienne en temps continu en [79, 80].

En suivant [78], dans la section 3.1 on introduit le formalisme thermodynamique par analogie avec la construction de Boltzmann-Gibbs, puis dans la section 3.2 on passe en revue le développement historique du formalisme à partir du travail de Ruelle. Dans la section 3.3 on décrit le formalisme thermodynamique des histoires pour des systèmes markoviens en temps continu en différentiant les histoires, ou régimes dynamiques qu'un système peut suivre, et en définissant toutes les quantités d'intérêt du formalisme, comme la fonction de grandes déviations et l'énergie libre dynamique, qui vont être utilisées par la suite. Enfin dans la section 3.4 on établit comment une dynamique vitreuse est le reflet d'une séparation nette entre différents types d'histoires que le système considéré a suivies.

### 3.1 Analogie avec la construction de Boltzmann-Gibbs

En physique statistique d'équilibre, l'une des quantités non triviales les plus simples à définir est le nombre de configurations  $\Omega(E, N)$  dans lesquelles un système de taille

$N$  et d'énergie fixée  $E$  peut se trouver :

$$\Omega(E, N) = \sum_{\mathcal{C}} \delta(E - H(\mathcal{C})) \sim e^{Ns(e)} \quad \text{avec} \quad e = \frac{E}{N} \quad (3.1)$$

Pour les grands systèmes ( $N \rightarrow \infty$ ), ce nombre se comporte exponentiellement en  $N$  et l'on appelle  $s(e)$  l'entropie (intensive) correspondante, fonction de la densité d'énergie  $e = E/N$ .

En théorie, on peut décrire toutes les propriétés macroscopiques reliées à  $E$  à partir du calcul de  $s(e)$  – c'est le point de vue microcanonique. En pratique, il se révèle plus facile de se placer dans l'ensemble "canonique", où, au lieu de fixer exactement l'énergie  $E$ , on introduit un paramètre intensif  $\beta$  conjugué, qui fixe la valeur moyenne  $e = E/N$  de  $E$ . La quantité associée à  $\Omega(E, N)$  est la fonction partition du système  $Z(\beta, N) = \sum_E \Omega(E, N)e^{-\beta E}$ , qui s'écrit directement

$$Z(\beta, N) = \sum_E \Omega(E, N)e^{-\beta E} \sim e^{Nw(\beta)} \quad \text{pour} \quad N \rightarrow \infty \quad (3.2)$$

Elle se comporte aussi exponentiellement en  $N$  ce qui permet de définir la quantité intensive  $w(\beta)$ , indépendante de la taille du système, et directement reliée à l'énergie libre  $f(\beta)$  par  $w(\beta) = -\beta^{-1}f(\beta)$ . L'énergie libre est la quantité centrale de la physique statistique d'équilibre : par exemple les transitions de phase apparaissent comme des singularités de  $f(\beta)$ . L'entropie  $s(e)$  se retrouve comme

$$s(e) = \max_{\beta} (\beta e - \beta f(\beta)) = \max_{\beta} (\beta e + w(\beta)) . \quad (3.3)$$

La thermodynamique des histoires est un formalisme analogue au formalisme d'équilibre, qui au lieu de considérer les fluctuations dans l'espace des configurations accessibles au système dans un état d'équilibre, considère les fluctuations dans l'espace des histoires que le système a suivies du temps 0 au temps  $t$  où l'on veut connaître les propriétés dynamiques du système.

Ce formalisme est donc par définition un *formalisme dynamique*, où toutes les quantités dépendent de l'histoire spatio-temporelle du système.

Pour effectuer des moyennes d'observables, il faut identifier le poids statistique de chaque histoire, c'est-à-dire qu'il faut classifier les histoires suivies par le système à travers une grandeur  $A[\text{hist}]$  qui ait les propriétés suivantes :

- (i) dépendance de l'histoire complète :  $A = A[\text{hist}]$ , au lieu de dépendre seulement de la configuration comme  $H(\mathcal{C})$ ,
- (ii) extensivité en temps  $t$ , tout comme l'énergie  $H(\mathcal{C})$  est extensive en la taille du système.

Une fois trouvée cette quantité, le nombre d'histoires suivies par le système avec une valeur donnée de  $A$  sur une durée  $t$  serait (en posant  $a = A/t$ ) :

$$\Omega(A, t) = \sum_{\substack{\text{histoires} \\ \text{de } 0 \text{ à } t}} \delta(A - A[\text{hist}]) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (3.4)$$

Dans les cas qui vont nous intéresser, il se trouve à nouveau plus facile de prendre un point de vue canonique, en introduisant un paramètre  $s$  intensif en temps, conjugué à  $A$ , qui fixe la valeur moyenne  $a = A/t$  de  $A$ . La fonction de partition dynamique correspondante  $Z(s, t) = \sum_A \Omega(A, t)e^{-sA}$  s'écrit

$$Z(s, t) = \sum_A \Omega(A, t)e^{-sA} \sim e^{t\psi_A(s)} \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (3.5)$$

où l'on voit que tandis qu'en statistique d'équilibre la température inverse  $\beta$  est le paramètre conjugué à l'énergie (observable dépendant des configurations), ici le paramètre  $s$  qui n'a pas de sens physique est conjugué à l'observable  $A$  (qui dépend de toute l'histoire). Le lien entre l'entropie  $\pi(a)$  et l'équivalent dynamique de l'énergie libre  $\psi_A(s)$  s'écrit à nouveau sous la forme d'une transformée de Legendre

$$\pi(a) = \max_s (\psi_A(s) + sa) \quad (3.6)$$

En statistique d'équilibre, plusieurs observables – l'énergie, le nombre de particules, le volume – peuvent jouer le rôle de la quantité extensive  $E$  utilisée pour classifier les configurations du système. En dynamique, le choix de la quantité  $A$  est tout aussi vaste :  $A$  peut représenter le courant total qui a traversé le système entre 0 et  $t$ , ou le nombre d'événements élémentaires dans l'histoire suivie, ou toute autre quantité extensive en temps. Comme on le voit dans la prochaine section, historiquement c'est la "complexité dynamique" de l'histoire qui a joué ce rôle en premier.

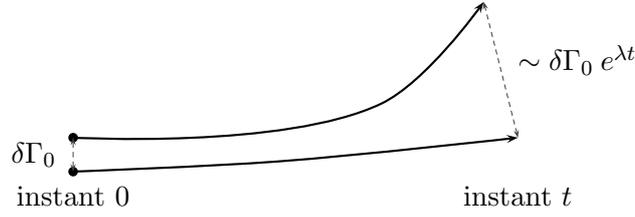


FIG. 3.1 – Séparation exponentielle de deux trajectoires initialement très proches

## 3.2 Histoire de la thermodynamique des histoires

### 3.2.1 Formalisme thermodynamique de Ruelle

L'idée initiale d'effectuer une statistique sur les histoires d'un système remonte à la construction par Ruelle du formalisme thermodynamique, dans le cadre des systèmes dynamiques déterministes [96]. Un système dynamique, décrit par un ensemble de coordonnées  $\Gamma(t)$  dans l'espace des phases, évolue suivant

$$\frac{d\Gamma}{dt} = F(\Gamma) \quad (3.7)$$

La tendance du système à explorer son espace des phases peut s'étudier en suivant au cours du temps l'évolution de la séparation  $\delta\Gamma(t)$  entre deux points infinitésimalement proches à l'état initial :

$$\frac{d\delta\Gamma}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \Gamma} \delta\Gamma \quad (3.8)$$

La norme de  $\delta\Gamma$  croît ou décroît exponentiellement en temps, et évolue suivant une équation similaire à (3.8). Moyennées dans l'état stationnaire, les valeurs propres de l'opérateur d'évolution correspondant permettent d'obtenir le spectre de Lyapounov  $\{\lambda_i\}$  du système. Il y a autant d'exposants de Lyapounov que de dimensions dans le système. À chaque exposant de Lyapounov positif correspond une direction particulière instable dans l'espace de phase et un système qui possède au moins un  $\lambda_i > 0$  est dit *chaotique*. Un autre outil est l'entropie de Kolmogorov-Sinai (KS) [74, 104], qui caractérise la chaoticité globale, plutôt qu'individuelle, de la dynamique. Pour la définir, on partitionne l'espace de phase en cellules discrètes, ce qui rend la dynamique probabiliste et permet de construire une mesure sur l'ensemble de toutes les trajectoires physiquement accessibles sur un intervalle de temps  $[0, t]$  donné. L'entropie de

Kolmogorov-Sinai  $h_{\text{KS}}$  est l'entropie de Shannon d'une telle mesure

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{\substack{\text{histoires} \\ \text{de } 0 \text{ à } t}} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \ln \text{Prob}\{\text{histoire}\} \quad (3.9)$$

Cette définition inclut une moyenne sur l'ensemble des conditions initiales ainsi qu'une extrémalisation par rapport à l'ensemble des partitions possibles de l'espace des phases. Par définition,  $h_{\text{KS}}$  donne une mesure de la complexité moyenne dans l'état stationnaire des trajectoires suivies par le système. Il est également possible de relier cette entropie au spectre de Lyapounov de la dynamique : le théorème de Pesin affirme en effet que dans un système fermé :

$$h_{\text{KS}} = \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i \quad (3.10)$$

Remarquons que cette entropie est de nature dynamique et n'est pas directement liée à l'entropie de Boltzmann-Gibbs du système. La fonction de partition dynamique, introduite par Ruelle [96], est définie comme<sup>1</sup>

$$Z_+(s, t) = \sum_{\substack{\text{histoires} \\ \text{de } 0 \text{ à } t}} (\text{Prob}\{\text{histoire}\})^{1-s} \sim e^{t\psi_+(s)} \quad (3.11)$$

À nouveau, cette définition comporte une moyenne sur les conditions initiales et un supremum sur l'ensemble des partitions possibles de l'espace des phases. L'équivalent de l'énergie libre, appelé *pression topologique*, est défini par

$$\psi_+(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln Z_+(s, t) \quad (3.12)$$

Cette fonction permet de retrouver l'entropie KS par  $h_{\text{KS}} = \psi'_+(0)$  ou l'entropie topologique  $h_{\text{top}} = \psi_+(1)$ , qui donne une mesure du taux de croissance du nombre de trajectoires possibles au cours du temps. Cette pression topologique est la quantité centrale du formalisme de Ruelle.

---

<sup>1</sup>Dans les notations historiques,  $1-s$  est noté  $\beta$ . L'avantage de notre changement de notation apparaîtra pour les dynamiques markoviennes, lorsqu'on exprimera  $Z_+(s, t)$  comme la fonction génératrice des moments d'une observable.

### 3.2.2 Approche de Gaspard : temps discret

D'après les définitions précédentes, il existe une manière naturelle, comme l'explique Gaspard dans [53, 51, 54], d'étendre les notions d'entropie KS et de fonction de partition dynamique au cas des chaînes de Markov en temps discret. Considérons un processus de Markov qui décrit l'évolution d'un système entre ses différentes configurations  $\{\mathcal{C}\}$  avec des probabilités de transition  $w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ . La probabilité  $P(\mathcal{C}, t)$  d'être dans la configuration  $\mathcal{C}$  à l'instant  $t$  obéit à l'équation d'évolution discrète

$$P(\mathcal{C}, t + \tau) - P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', t) - w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')P(\mathcal{C}, t)] \quad (3.13)$$

où  $\tau$  représente le pas de temps (le temps écoulé s'écrit sous la forme  $t = n\tau$ ). La probabilité d'une histoire  $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n$  se déroulant entre 0 et  $t = n\tau$ , du type  $(\mathcal{C}_0, 0; \mathcal{C}_1, \tau; \dots; \mathcal{C}_n, n\tau)$  s'écrit :

$$\text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) = P(\mathcal{C}_0, 0)w(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1) \dots w(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n). \quad (3.14)$$

Dans cette expression, deux configurations successives  $\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k+1}$  peuvent tout à fait être égales. Par définition de l'entropie KS on a directement

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\tau} \sum_{\mathcal{C}_0, \dots, \mathcal{C}_n} \text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) \ln \text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) \quad (3.15)$$

On voit alors facilement [54] que cette expression se simplifie pour donner

$$\begin{aligned} h_{\text{KS}} &= -\frac{1}{\tau} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} P_{\text{st}}(\mathcal{C}) w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \\ &= -\frac{1}{\tau} \left\langle \sum_{\mathcal{C}'} w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \right\rangle_{\text{st}} \end{aligned} \quad (3.16)$$

où  $P_{\text{st}}(\mathcal{C})$  est l'état stationnaire markovien. De nombreux calculs explicites de cette quantité ont été effectués par exemple dans Gaspard [53].

## 3.3 Formalisme des histoires : dynamique markovienne en temps continu

Dans cette section on décrit le formalisme thermodynamique des histoires adapté aux systèmes à dynamique markovienne en temps continu par Lecomte et al. [80].

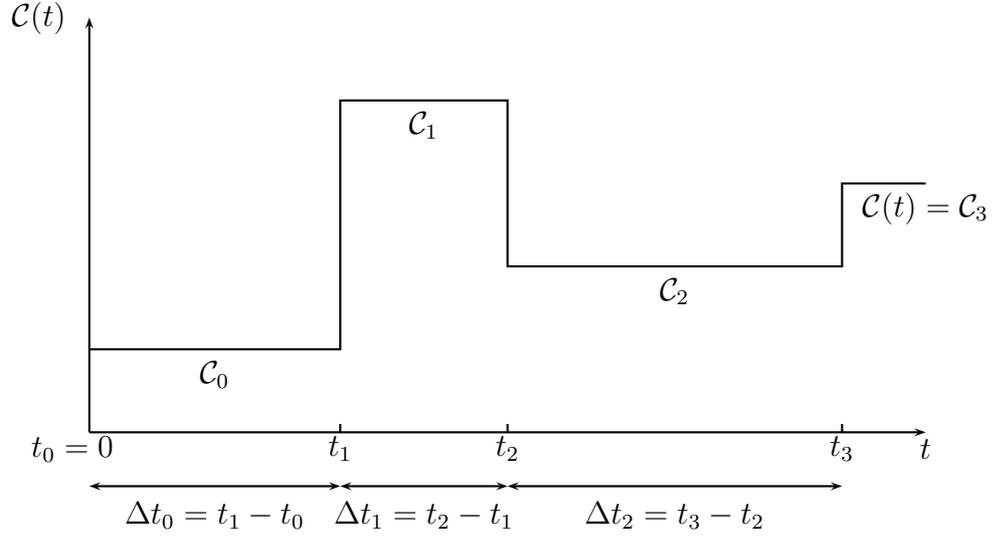


FIG. 3.2 – Une trajectoire typique pour une dynamique markovienne en temps continu : les intervalles de temps  $t_{k+1} - t_k$  entre les changements de configurations sont distribués suivant une loi de Poisson de paramètre  $r(C_k)$ . À chaque changement de configuration, le système saute de  $C_k$  vers une autre configuration  $C_{k+1}$  avec probabilité  $\frac{W(C_k \rightarrow C_{k+1})}{r(C_k)}$ .

### 3.3.1 Statistique sur les histoires

On considère un système décrit par une dynamique de Markov, de taux de transition  $W(C \rightarrow C')$  entre configurations différentes. La relation entre ces taux de transition et les taux de transition en temps discret qui apparaissent en (3.13) est de la forme :

$$w(C \rightarrow C') = \begin{cases} \tau W(C \rightarrow C') & \text{si } C \neq C' \\ 1 - \tau \sum_{C'' \neq C} W(C \rightarrow C'') & \text{si } C = C' \end{cases} \quad (3.17)$$

de sorte que l'équation maîtresse discrète (3.13) redonne son analogue en temps continu à la limite  $\tau \rightarrow 0$  :

$$\partial_t P(C, t) = \sum_{C' \neq C} [W(C' \rightarrow C)P(C', t) - W(C \rightarrow C')P(C, t)]. \quad (3.18)$$

Donc l'évolution de la probabilité  $P(C, t)$  d'être dans l'état  $C$  à l'instant  $t$  peut s'écrire :

$$\partial_t P = \mathbb{W}P \quad (3.19)$$

où l'opérateur d'évolution  $\mathbb{W}$  a pour éléments

$$(\mathbb{W})_{\mathcal{C},\mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - r(\mathcal{C})\delta_{\mathcal{C},\mathcal{C}'} \quad (3.20)$$

où

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (3.21)$$

est le taux de saut de la configuration  $\mathcal{C}$  vers une autre configuration (que nous appellerons taux d'échappement de  $\mathcal{C}$ ). Les histoires suivies par le système peuvent être vues comme le résultat de deux processus aléatoires distincts (voir figures 3.2 et 3.3) :

- (i) Le système passe par une séquence  $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$  de configurations successivement distinctes. Chaque saut de  $\mathcal{C}_k$  à  $\mathcal{C}_{k+1}$  s'effectue avec une probabilité  $\frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}$ .
- (ii) Entre chaque changement de configuration, le système reste dans la configuration  $\mathcal{C}_k$  pendant un intervalle de temps  $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$  distribué continûment selon une loi poissonnienne de paramètre  $r(\mathcal{C}_k)$  (défini à l'équation (3.21))

$$\rho(\mathcal{C}_k, \Delta t) = r(\mathcal{C}_k) e^{-\Delta t r(\mathcal{C}_k)}. \quad (3.22)$$

La probabilité d'une telle séquence, indépendamment des temps de sauts, s'écrit

$$\text{Prob}\{\text{histoire}\} = \prod_{k=0}^{K-1} \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}, \quad (3.23)$$

où  $K$  est le nombre de changements de configuration (voir figure 3.3). La densité de probabilité de la séquence  $\{t_k\}_{1 \leq k \leq K}$  de temps de changement de configuration est

$$\prod_{k=0}^{K-1} \rho(\mathcal{C}_k, t_{k+1} - t_k). \quad (3.24)$$

En sommant sur tous les instants intermédiaires, sur toutes les configurations et sur toutes les longueurs possibles de l'histoire on obtient la probabilité de se trouver dans la configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $t$  si on était en  $\mathcal{C}_0$  au temps  $t_0$ . Explicitement :

$$P(\mathcal{C}, t | \mathcal{C}_0, t_0) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(\mathcal{C}_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(\mathcal{C}_{K-1}, t_K - t_{K-1}) \\ e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C}_K)} \left[ \prod_{k=1}^K \frac{W(\mathcal{C}_{k-1} \rightarrow \mathcal{C}_k)}{r(\mathcal{C}_{k-1})} \right]. \quad (3.25)$$

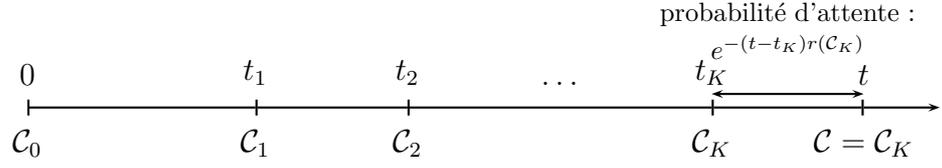


FIG. 3.3 – Une réalisation donnée d’une histoire de configurations  $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$ . Entre les instants  $t_k$  et  $t_{k+1}$ , le système reste dans la configuration  $\mathcal{C}_k$ .

Dans cette expression, le dernier terme exponentiel  $e^{-(t-t_K)r(C_K)}$  représente la probabilité de ne pas sauter de  $\mathcal{C} = \mathcal{C}_K$  entre  $t_K$  et  $t$  (cf. figure 3.3).

À travers une moyenne de ce type on peut récrire la fonction de partition dynamique (3.11), qui se trouve être [80] :

$$Z_+(s, t) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(\mathcal{C}_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(\mathcal{C}_{K-1}, t_K - t_{K-1}) e^{-(t-t_K)r(C_K)} \left[ \prod_{k=1}^K \frac{W(\mathcal{C}_{k-1} \rightarrow \mathcal{C}_k)}{r(\mathcal{C}_{k-1})} \right]^{1-s} \quad (3.26)$$

pour les dynamiques markoviennes. Seule la partie correspondant à la probabilité de la séquence de configurations  $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$  est élevée à la puissance  $1 - s$  (elle contient une information finie). La condition initiale  $\mathcal{C}_0$  est fixée.

### 3.3.2 Entropie de Kolmogorov-Sinai

Comme pour la fonction de partition dynamique, la définition (3.9) de l’entropie de Kolmogorov-Sinai s’interprète pour les dynamiques markoviennes en temps continu selon

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(\mathcal{C}_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(\mathcal{C}_{K-1}, t_K - t_{K-1}) e^{-(t-t_K)r(C_K)} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \ln [\text{Prob}\{\text{histoire}\}] , \quad (3.27)$$

où à nouveau la probabilité d’une histoire représente celle de la séquence de ses configurations, comme dans (3.23) :

$$\text{Prob}\{\text{histoire}\} = \prod_{k=0}^{K-1} \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)} . \quad (3.28)$$

On retrouve le lien habituel entre  $h_{\text{KS}}$  et  $Z_+(s, t)$  :

$$h_{\text{KS}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left. \frac{\partial \ln Z_+(s, t)}{\partial s} \right|_{s=0} . \quad (3.29)$$

L'entropie de Kolmogorov-Sinai ainsi définie est de nature purement dynamique et ne peut, elle non plus, être reliée à l'entropie de la thermodynamique à l'équilibre définie par l'équation 3.3.

### 3.3.3 Fonction de grandes déviations d'une observable

Dans cette section on explique comment la fonction de partition dynamique  $Z(s, t)$  peut être donnée en termes d'une observable  $A[\text{hist}]$  extensive en temps, et on définit la fonction de grandes déviations par rapport à une observable, qui sera l'outil central des analyses décrites dans les prochains chapitres. On complète ici l'analogie avec la construction de Boltzmann-Gibbs introduite dans la section 3.1.

On choisit de considérer des observables extensives en temps qui peuvent s'exprimer comme intégrales dans le temps d'une fonction arbitraire  $\alpha$  :

$$A[\text{hist}, t] = \sum_{n=0}^{K-1} \alpha(\mathcal{C}_n, \mathcal{C}_{n+1}) , \quad (3.30)$$

on étudie donc les fluctuations qui évoluent par sauts à chaque changement de configuration. Pour classer les histoires en fonction de l'observable  $A$ , on s'intéresse à la probabilité  $P(\mathcal{C}, A, t)$  d'être dans une configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $t$  ayant parcouru une histoire pour laquelle  $A[\text{hist}, t] = A$ . On s'intéresse en particulier à la transformée de Laplace :

$$\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_A e^{-sA} P(\mathcal{C}, A, t) , \quad (3.31)$$

qui évolue selon l'équation maîtresse :

$$\partial_t \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}', s, t) - r(\mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) , \quad (3.32)$$

qui s'écrit encore  $\partial_t \hat{P}_A = \mathbb{W}_A \hat{P}_A$ , l'opérateur  $\mathbb{W}_A$  ayant pour éléments

$$(\mathbb{W}_A)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} . \quad (3.33)$$

Pour  $s \neq 0$ , cet opérateur ne conserve pas la probabilité, car  $(\mathbb{W}_A)_{c,c} + \sum_{c' \neq c} (\mathbb{W}_A)_{c',c} \neq 1$ . L'équation d'évolution (3.32) est linéaire. On voit donc que  $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  se comporte exponentiellement aux grands temps, et donc aussi la fonction de partition associée :

$$Z = \sum_c \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \langle e^{-sA} \rangle \sim e^{t\psi_A(s)}, \quad (3.34)$$

où la moyenne  $\langle \cdot \rangle$  est une moyenne sur toutes les histoires et  $\psi_A(s)$  est la plus grande valeur propre de  $\mathbb{W}_A$ .

L'analogie avec la construction de Boltzmann-Gibbs peut donc se formuler, suivant [78], comme il suit. L'équivalent de la quantité  $\Omega(A, t)$  définie en (3.4) est la probabilité une valeur  $A = at$  de l'observable  $A$  après un long temps  $t$

$$P(A/t = a, t) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{pour} \quad t \rightarrow \infty, \quad (3.35)$$

où la probabilité est moyennée sur toutes les histoires et la fonction  $\pi(a)$  joue le rôle d'une "entropie dynamique" associée à  $A$ . La "fonction de partition dynamique" associée à  $P(A/t = a, t)$  est  $Z_A(s, t) = \sum_A P(A, t)e^{-sA}$ , qui se comporte pour des temps longs comme indiqué en (3.34), c'est-à-dire  $Z_A(s, t) \sim e^{t\psi_A(s)}$ .

Comme en physique statistique à l'équilibre, l'entropie dynamique  $\pi(a)$  et  $\psi_A(s)$ , qu'on appelle par extention *énergie libre dynamique*, sont reliées par une transformation de Legendre :

$$\psi_A(s) = \max_a (\pi(a) - sa). \quad (3.36)$$

Dans la suite, les notations  $Z_A(s, t)$  et  $\psi_A(s)$  désignent les définitions (3.34) valides en temps continu. En plus d'une facilité de calcul, la fonction de partition dynamique  $Z_A(s, t)$  et l'énergie libre  $\psi_A(s)$  apportent aussi des informations sur les histoires atypiques suivies par le système. D'un point de vue formel, la fonction  $\pi(a)$  sonde les histoires qui possèdent une *valeur fixée*  $a$  de  $A/t$  aux grands temps, tandis que l'énergie libre dynamique  $\psi_A(s)$  à  $s$  fixé caractérise les histoires qui possèdent une *valeur moyenne* de  $A/t$  égale à  $a$ .

Ces fonctions de grandes déviations décrivent toutes les fluctuations de  $A$  dans l'état stationnaire :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle A^p \rangle_c = (-1)^p \left. \frac{d^p \psi_A(s)}{ds^p} \right|_{s=0}, \quad (3.37)$$

bien au delà des fluctuations gaussiennes.

Comme cas particulier d'observable, il est intéressant de considérer la complexité dynamique  $Q_+$  d'une histoire

$$Q_+ = \sum_{k=0}^{K-1} \ln \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}, \quad (3.38)$$

telle que, dans l'espace des configurations

$$\text{Prob}\{\text{history}\} = e^{Q_+}. \quad (3.39)$$

On peut identifier d'après (3.26) la fonction de partition  $Z_+(s, t)$  à la fonction génératrice des moments de  $Q_+$  :

$$Z_+(s, t) = \langle e^{-sQ_+} \rangle \quad (3.40)$$

La moyenne  $\langle \cdot \rangle$  est la moyenne usuelle sur les histoires du processus stochastique, c'est-à-dire sur les configurations visitées et sur les intervalles de temps. Pour l'entropie KS, on remarque d'après (3.40) que

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle Q_+ \rangle. \quad (3.41)$$

La fonction de grandes déviations par rapport à l'observable  $Q_+$  est la pression topologique  $\psi_+(s)$ , qui s'interprète ici comme la fonction génératrice des cumulants de la complexité dynamique :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_+^n \rangle_c}{t} = (-1)^n \left. \frac{d^n \psi_+}{ds^n} \right|_{s=0} \quad (3.42)$$

On voit de plus que l'entropie KS s'obtient à partir de  $\psi_+$  selon

$$h_{\text{KS}} = \left. \frac{d\psi_+}{ds} \right|_{s=0}, \quad (3.43)$$

tout comme dans le formalisme original de Ruelle.

### 3.4 États $s$ et liaison avec la dynamique vitreuse

Le croissance ou décroissance exponentielle de  $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  (équation 3.32), incite à définir un état à  $s$  non nul ou "état- $s$ ", comme une configuration, qui a comme probabilité :

$$\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \frac{\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}{Z_A(s, t)} \sim e^{-t\psi_A(s)} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t). \quad (3.44)$$

Cette probabilité est bien normalisée et les valeurs de  $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  sont positives, car  $P_A(\mathcal{C}, s, t)$ , qui obéit à l'équation maîtresse (3.30), est positif à tout temps. Il en est de même pour  $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)/Z_A(s, t)$ . La limite de grands temps donne l'état- $s$  stationnaire avec probabilité

$$\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t) . \quad (3.45)$$

Cet état est aussi le vecteur propre (normalisé) de  $\mathbb{W}_A$  associé à  $\psi_A(s)$ .

Cet état n'est pas le résultat d'une évolution qui conserve la probabilité dans l'espace des configurations  $\mathcal{C}$ . On peut cependant l'obtenir comme le résultat de l'évolution en parallèle d'un *ensemble* de copies du système, muni d'une dynamique qui favorise l'observation de déviations de  $A$  par rapport à sa moyenne ainsi que de règles de clonage qui reflètent la non-conservation de la probabilité (voir la section 4.2.1). Pour toute observable statique  $\mathcal{O}$ , la valeur moyenne de  $\mathcal{O}$  dans l'état- $s$  à l'instant  $t$ , définie par

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(\mathcal{C}) \tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t) \quad (3.46)$$

est telle que, pour les trajectoires entre 0 et  $t$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(t)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (3.47)$$

Une construction similaire donne la mesure dans l'état- $s$  d'observables qui dépendent de l'histoire complète du système. En particulier la valeur moyenne de l'observable  $A$  du type (3.30) dans l'état- $s$  est

$$\langle A \rangle_s = \frac{\langle A e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} = -\frac{\partial_s \langle e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \sim -\frac{\partial_s [e^{t\psi_A(s)}]}{e^{t\psi_A(s)}} \sim -t\psi'_A(s) \quad (3.48)$$

Une autre propriété particulière des état- $s$  est que la moyenne intégrée au cours du temps et la moyenne au temps final ne sont pas égales (dès que  $s \neq 0$ ). Plus précisément, si  $\mathcal{O}(\mathcal{C})$  est une observable qui dépend de la configuration, on peut s'intéresser à deux manières de calculer la moyenne de  $\mathcal{O}$

– soit au temps final

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(t)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (3.49)$$

– soit en effectuant une moyenne au long de l'évolution temporelle

$$\frac{1}{t} \left\langle \int_0^t \mathcal{O} \right\rangle_s = \frac{1}{t} \frac{\left\langle \int_0^t d\tau \mathcal{O}(\mathcal{C}(\tau)) e^{-sA} \right\rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} . \quad (3.50)$$

Dans l'état stationnaire non-modifié ( $s = 0$ ), ces deux moyennes coïncident aux grands temps. En revanche, dès que  $s \neq 0$ , on peut voir de manière générale que ces deux quantités sont différentes [49]. De manière plus générale, on peut définir une moyenne à temps intermédiaire  $0 \leq \tau \leq t$

$$\langle \mathcal{O}(\tau) \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(\tau)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (3.51)$$

où  $\langle \cdot \rangle$  a toujours lieu sur toutes les histoires entre 0 et  $t$ .

Pour établir un liaison entre la dynamique vitreuse et les histoires parcourues par le système, on considère une observable particulière : l'*activité de l'histoire*  $K$  [histoire], qui est le nombre de changements de configuration que le système a effectués entre le temps  $t = 0$  et le temps  $t$ .

La fonction de partition en termes de cette observable sera donc :

$$Z_K(s, t) = \langle e^{-sK} \rangle \sim e^{t\psi_K(s)} \quad (3.52)$$

où la moyenne est effectuée sur toutes les histoires et donc sur toutes les activités possibles, et dont le comportement exponentiel est décrit pour des temps longs par la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  relative à l'activité  $K$ .

La moyenne d'une observable quelconque  $\mathcal{O}$  [histoire] dans l'état  $s$  s'écrit :

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}[\text{histoire}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}. \quad (3.53)$$

Donc différents choix de l'état stationnaire  $s$  dans lequel on moyenne vont sonder des histoires avec des activités différentes.

Pour imposer une valeur *moyenne* donnée  $k$  de  $K/t$  dans l'état- $s$ , il suffit de choisir le  $s$  conjugué à  $k$  par (3.36) (tout comme en thermodynamique d'équilibre le choix d'une température impose la valeur moyenne de l'énergie).

En pratique les états à  $s > 0$  privilégieront les histoires peu actives, c'est à dire avec  $K$  beaucoup plus petit que l'activité moyenne  $K \ll \langle K \rangle$ , tandis que les états à  $s < 0$  privilégieront les histoires actives avec  $K \gg \langle K \rangle$ . Pour  $s \simeq 0$  les histoires avec activité  $K \simeq \langle K \rangle$  proche de sa moyenne seront explorées.

Le paramètre  $s$  permet donc une exploration des différentes phases dynamiques suivies par un système au cours du temps.

### 3.4.1 Transition de phase dynamique

L'état vitreux, comme on l'a vu dans la section 1.2.3, est dynamiquement hétérogène : des différentes régions du système, séparées par des interfaces nettes, ont des différents temps de relaxation.

La séparation entre différents groupes d'histoires est marquée par une discontinuité dans la moyenne d'observables (équation (3.53)) ou de façon équivalente à une singularité de la fonction de grandes déviations de l'observable considérée. Cette fonction de grandes déviations, comme on l'a déjà dit, est l'équivalent dynamique de l'énergie libre, qui signale, à l'équilibre, la présence de transitions de phase statiques. Dans notre cas une discontinuité dans l'une des dérivées de la fonction  $\psi_K(s)$  va signaler une *transition de phase dynamique*, c'est-à-dire une séparation nette entre les régimes dynamiques suivis par le système, en fonction du paramètre  $s$ .

Ce dernier point, ainsi que les techniques, numériques et analytiques, pour sonder les états  $s$  stationnaires du système, est développé par la suite. Dans les trois prochains chapitres on prouve en effet que pour des modèles à dynamique manifestement vitreuse la fonction de grandes déviations et les moyennes d'observables dans l'état  $s$ , montrent une discontinuité entre les états inactifs et actifs de la dynamique antérieur au temps  $t$ . Là où cela a été possible, on a considéré l'équivalent non-vitreux des modèles et on a montré qu'aucune séparation nette, *i.e.* aucune discontinuité dans les quantités regardées n'a lieu en fonction du paramètre  $s$ .



# Chapitre 4

## Modèles cinétiquement contraints

Ce chapitre contient le travail effectué sur les modèles cinétiquement contraints pendant cette thèse. Dans la première partie du chapitre on montre pour un système cinétiquement contraint à dynamique vitreuse que la fonction de grandes déviations donnée en (3.34) pour une observable opportunément choisie a une singularité de premier ordre en fonction du paramètre  $s$  et qu'une transition dynamique dans l'espace des histoires a lieu. Cette première partie éclaire la notion de transition de phase introduite dans la section 3.4.1 en résumant des résultats déjà obtenus auparavant et publiés en [48] et [49].

La deuxième partie contient les résultats obtenus pendant cette thèse sur les modèles cinétiquement contraints : il s'agit d'évaluations numériques de fonctions de grandes déviations et de paramètres d'ordre pour les modèles cinétiquement contraints introduits dans la section 2.1 du chapitre 2. En particulier en section 4.2.1 on explique l'algorithme utilisé pour simuler une dynamique dans l'espace des histoires, et dans la section 4.2.2 on montre comment les résultats obtenus confirment les résultats analytiques décrits dans la première partie du chapitre.

Les résultats numériques obtenus sont à la base du travail sur les systèmes cinétiquement contraints effectué en collaboration avec Vivien Lecomte, Frédéric van Wijland, Estelle Pitard, Juan-P Garrahan et Robert Jack, publié en [48] et [49].

## 4.1 Transition dynamique dans le modèle FA en champ moyen

Dans cette première partie du chapitre on établit analytiquement l'existence d'une transition de phase dynamique pour le modèle de Fredrickson et Andersen en champ moyen. On rappelle que dans ce système aucune transition de phase statique non-triviale n'a lieu, et le système se trouve à toute température  $T > 0$  dans un état vitreux, c'est à dire un état dynamiquement hétérogène qui présente du vieillissement (voir section 2.1.1). Cette transition dynamique est donc sous-jacente à l'état vitreux mais n'est aucunement liée à une transition de phase statique.

Comme on l'a vu dans le chapitre 3 la fonction de grandes déviations d'une observable  $A$  extensive en temps, définie en Eq. (3.34), est égale, pour des temps longs, à la plus grande valeur propre de l'opérateur  $\mathbb{W}_A$  défini en Eq. (3.33).

On choisit comme observable l'*activité* de l'histoire, c'est à dire le nombre de changements de configurations effectués par le système entre l'instant  $t = 0$  et l'instant  $t$ . Ceci n'est qu'un choix : il existe une famille d'observables extensives en temps qui donne le même résultat.

La transformée de Laplace (3.31), c'est à dire la probabilité en fonction du paramètre  $s$  d'être dans une configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $t$  avec une certaine valeur  $\langle K \rangle$  fixée :

$$\hat{P}_K(\mathcal{C}, s, t) = \sum_K e^{-sK} P(\mathcal{C}, K, t), \quad (4.1)$$

évolue selon l'équation linéaire (3.32), qui s'écrit dans ce cas :

$$\partial_t \hat{P}_K = \mathbb{W}_K \hat{P}_K \quad (4.2)$$

où l'opérateur  $\mathbb{W}_K$  a pour éléments :

$$(\mathbb{W}_K)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{-s} - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'}. \quad (4.3)$$

La fonction de partition associée à la probabilité (4.1) s'écrit donc :

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_K(\mathcal{C}, s, t) = \langle e^{-sK} \rangle \sim e^{t\psi_K(s)} \quad (4.4)$$

où la moyenne  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne sur toutes les histoires dans l'état à  $s = 0$  et la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  de l'activité  $K$  est la plus grande valeur propre de l'opérateur  $\mathbb{W}_K$ .

On calcule dans le prochain paragraphe la fonction de grandes déviations de l'activité  $\psi_K(s)$  pour le modèle FA en champ moyen et on montre que sa dérivée est discontinue en  $s = 0$ .

### 4.1.1 Fonction de grandes déviations

Une configuration du modèle FA est définie par la valeur que prend la variable binaire  $n_i = 0, 1$  sur chaque site  $i = 1, \dots, N$  du réseau. On indique une configuration par  $\mathbf{n} = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ . La contrainte cinétique impose que une transition entre une configuration et une autre, c'est à dire le passage  $n_i \rightarrow 1 - n_i$  d'une région du matériau (représentée par un site  $i$ ) d'un état mobile à faible densité  $n_i = 1$  à un état à haute densité  $n_i = 0$  ou vice-versa, soit possible seulement si l'un des plus proches voisins du site  $i$  est dans un état mobile à  $n_i = 1$ .

Les taux de transition d'une configuration  $\mathbf{n}$  à une configuration  $\mathbf{n}'$  s'écrivent de façon générale (voir éq. (2.4)) :

$$W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') = \sum_i \delta_{\mathbf{n}', F_i \mathbf{n}} W(n_i \rightarrow 1 - n_i). \quad (4.5)$$

Pour le modèle FA le taux de retournement d'un spin est choisi de la forme donnée en (2.8) d'où en explicitant la contrainte cinétique :

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = ((1 - n_i)c + n_i(1 - c)) \sum_{\langle j \rangle_i} n_j, \quad (4.6)$$

avec  $c = 1/(1 + e^\beta)$  et où l'on indique (ici et par la suite) les sites  $j$  plus proches voisins du site  $i$  par  $\langle j \rangle_i$ .

Calculer la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  du modèle FA revient à calculer la plus grande valeur propre de l'opérateur

$$(\mathbb{W}_K)_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} = W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') e^{-s} - r(\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}. \quad (4.7)$$

avec des taux  $W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}')$  donnés par les éq.s (4.6) et (4.5).

Pour porter à terme ce calcul plus simplement on utilise le formalisme des nombres d'occupations de Doi-Peliti [38], ce qui demande de considérer la version *bosonique* de notre modèle de départ. Dans cette version le champ  $n_i$ , qui devient le nombre d'occupation du site  $i$ , prend des valeurs comprises entre  $n_i = 0$  et  $n_i = \infty$ , et les

transitions sont de la forme  $n_i \rightarrow n_i \pm 1$  avec une contrainte cinétique égale à la somme des nombres d'occupation des sites voisins. On peut montrer [113] qu'en modifiant le modèle de telle façon, la dynamique à basse température reste la même. D'ailleurs en [63] ce formalisme a été appliqué au modèle FA en gardant un champ binaire  $n_i = 0, 1$  et les résultats sont analogues. On réécrit ci-dessous, suivant [113], l'équation maîtresse (4.2) à travers le formalisme de Doi-Peliti et on évalue suivant [48] la valeur propre maximale de l'opérateur d'évolution (4.7).

Les taux de transition (4.6) doivent être modifiés en tenant compte du fait que la concentration d'équilibre  $c \equiv \langle n_i \rangle$  n'est plus inférieure à 1 dans le modèle bosonique : on choisit de prendre

$$W(n_i \rightarrow n_i + 1) = c \sum_{\langle j \rangle_i} n_j, \quad \text{et} \quad W(n_i \rightarrow n_i - 1) = n_i \sum_{\langle j \rangle_i} n_j, \quad (4.8)$$

ce qui donne une distribution d'équilibre

$$P_{\text{eq}}(\{n_i\}) = \prod_i \frac{c^{n_i}}{n_i!} e^{-c} \quad (4.9)$$

où  $c \equiv \langle n_i \rangle = e^{-\beta}$ . L'application du formalisme de Doi-Peliti à cet opérateur d'évolution a été faite en [113], où l'on renvoie pour plus de détails.

On associe à l'espace des configurations une base orthonormée de vecteurs  $|n\rangle$  sur lesquels agissent les opérateurs  $a$  et  $a^\dagger$  de la façon suivante :

$$a|n\rangle = n|n-1\rangle \quad \text{et} \quad a^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle; \quad (4.10)$$

le vecteur  $|n\rangle$  est le vecteur propre de l'opérateur  $a^\dagger a$  avec pour valeur propre le nombre total d'occupation  $\sum_i n_i = n$ . On s'intéresse ensuite à l'évolution temporelle du vecteur d'état  $|p(s, t)\rangle$  défini selon :

$$\sum_{n=0}^{\infty} p(\mathbf{n}, t) |n\rangle = |p(s, t)\rangle \quad (4.11)$$

qui pourra s'écrire, en utilisant les éq.s (4.8) et en tenant compte des éq.s (2.2) et (4.7) :

$$\begin{aligned}
\frac{d|p(s, t)\rangle}{dt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \sum_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} e^{-s} p(\mathbf{n}', s, t) W(\mathbf{n}' \rightarrow \mathbf{n}) - \sum_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} p(\mathbf{n}, s, t) W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') \right] |n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \sum_i e^{-s} \sum_{\langle j \rangle_i} n_j (p(\{\dots, n_i - 1, \dots\}, s, t) c + p(\{\dots, n_i + 1, \dots\}, s, t) (n_i + 1)) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i p(\{\dots, n_i, \dots\}, s, t) (c \sum_{\langle j \rangle_i} n_j + n_i \sum_{\langle j \rangle_i} n_j) \right] |n\rangle, \tag{4.12}
\end{aligned}$$

où la configuration  $\mathbf{n}' = \{\dots, n_i + 1, \dots\}$  diffère de la configuration  $\mathbf{n} = \{\dots, n_i, \dots\}$  seulement par le nombre d'occupation du site  $i$ . En considérant que

$$\sum_{n=0}^{\infty} p(\{\dots, n_i - 1, \dots\}, s, t) |n\rangle = a_i^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} p(\mathbf{n}, s, t) |n\rangle, \tag{4.13}$$

on arrive à l'expression de l'opérateur  $\hat{W}_K^{\text{FA}}$  qui régit l'équation  $\frac{d|p(s, t)\rangle}{dt} = \hat{W}_K^{\text{FA}} |p(s, t)\rangle$  :

$$\hat{W}_K^{\text{FA}} = \sum_{\langle ij \rangle} a_j^\dagger a_j (e^{-s} c a_i^\dagger + e^{-s} a_i - c - a_i^\dagger a_i). \tag{4.14}$$

Pour déterminer la plus grande valeur propre de cet opérateur on se place en champ moyen : tous les sites deviennent plus proches voisins les uns des autres et les fluctuations des champs  $n_i$  peuvent être négligées en remplaçant  $a_i$  par  $\langle a_i \rangle \equiv \phi$  et  $a_i^\dagger$  par  $\langle a_i^\dagger \rangle \equiv \bar{\phi}$ . Cette simplification permet de trouver les points stationnaires de l'opérateur d'évolution en champ moyen  $\mathbb{W}_K^{\text{FA, mf}}(\phi, \bar{\phi})$  en dérivant par rapport à  $\bar{\phi}$  et  $\phi$ . Cela donne les équations d'Euler-Lagrange :

$$0 = 2\bar{\phi}\phi(\phi - e^{-s}c) + \phi(c - e^{-s}\phi), \tag{4.15}$$

$$0 = 2(\bar{\phi} - e^{-s})\bar{\phi}\phi + c\bar{\phi}(1 - e^{-s}\bar{\phi}). \tag{4.16}$$

Il y a deux solutions qui correspondent aux états stationnaires de la dynamique :

$$\phi_1 = \quad \quad \quad c\bar{\phi}_1 = \quad \text{avec} \quad \bar{\phi}_1 = \frac{3}{4}e^{-s} + \frac{1}{4}\sqrt{9e^{-2s} - 8} \tag{4.17}$$

$$\bar{\phi}_2 = \quad \quad \quad \phi_2 = 0. \tag{4.18}$$

La solution  $\phi_1, \bar{\phi}_1$  donne une valeur propre  $W_K^{(\text{FA})}(\phi_1, \bar{\phi}_1)$  positive pour  $s < 0$  et négative autrement, tandis que la solution  $\bar{\phi}_2, \phi_2$  donne une valeur propre nulle à tout  $s$ .

La fonction de grandes déviations est la plus grande valeur propre de l'opérateur  $\mathbb{W}_K^{(\text{FA})}$ , donc :

$$\psi_K^{(\text{m.f.})}(s) = \begin{cases} Nd(c\bar{\phi}_1)^2(e^{-s\bar{\phi}_1} - 1) & (s < 0) \\ 0 & (s > 0) \end{cases} \quad (4.19)$$

Pour  $t \rightarrow \infty$  les dérivées de  $\psi_K(s)$ , comme montré dans l'éq. (3.48), nous donnent les cumulants de l'activité  $K$  dans l'état  $s$ . Par exemple :

$$K(s) = \langle K \rangle_s = -t \frac{d}{ds} \psi_K(s), \quad (4.20)$$

où la moyenne physique de l'activité sur toutes les histoires est  $\langle K \rangle = K(s = 0)$ .

On voit donc à partir de la forme (4.19) de la fonction  $\psi_K(s)$  que les états  $s < 0$  sont caractérisés par des histoires “actives”, c'est à dire avec un nombre moyen de changements de configurations positif et non-intensif dans la taille du système (ce qui en champ moyen équivaut à un  $K(s) \neq 0$ ), tandis que les états à  $s > 0$  sont les états dans lesquels le système se trouve après avoir suivi des histoires inactives, à  $K(s) = 0$ . Ceci ressort clairement de la figure 4.1, où sont représentées  $\psi_K(s)$  et  $K(s)$  en fonction de  $s$ .

À  $s = 0$ , dans l'état où se trouve le système physique, les deux phases coexistent : donc la dynamique du modèle FA se trouve être une compétition entre deux régimes dynamiques différents. Cette compétition se traduit dans l'aspect dynamiquement hétérogène de ce système qui, comme on l'a vu dans la section 2.1.1, présente des domaines de largeur sous-extensive en la taille du réseau qui ont un temps de relaxation de quelques ordres de grandeur plus grands que le reste du matériau.

On identifie cette discontinuité entre régimes dynamiques à une transition de phase dynamique de premier ordre et on considère cette transition dynamique comme sous-jacente à l'état vitreux.

### 4.1.2 Énergie libre variationnelle

Dans cette section on introduit, à travers l'établissement d'un principe variationnel, une énergie libre variationnelle “à la Landau” qui va nous indiquer la présence d'une

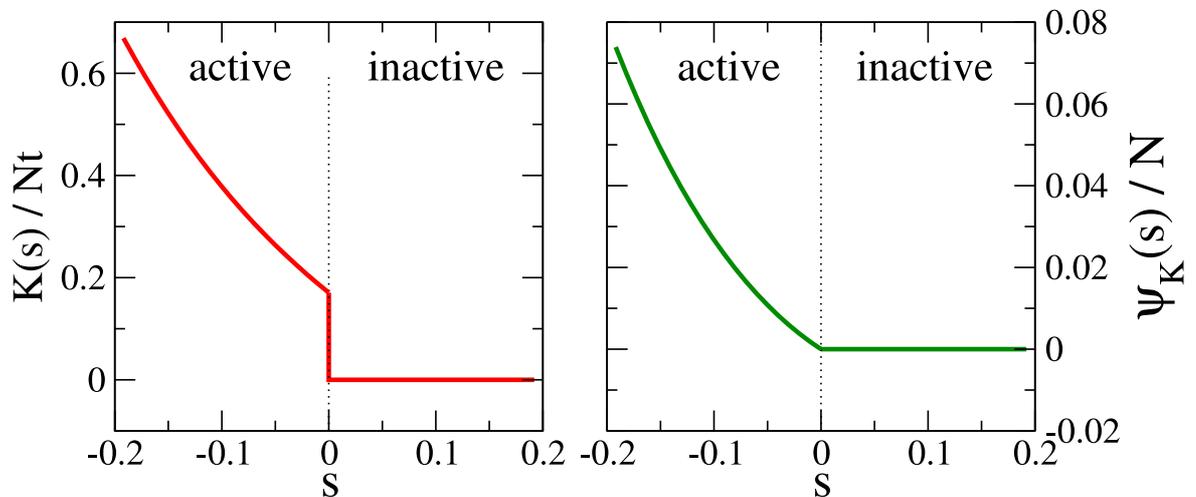


FIG. 4.1 – Transition dynamique en fonction du paramètre  $s$ . À gauche le paramètre d'ordre dynamique  $K(s)$  pour le modèle FA, évalué à travers une approximation de champ moyen et représenté à partir de l'équation (4.20) pour  $d = 3$  et  $T = 0.5$ . La dynamique possède deux phases, *i.e.* les histoires suivies sont séparées en histoires actives et histoires inactives, ce qui se traduit en un saut du paramètre d'ordre  $K$ . À droite on représente la fonction de grandes déviations donnée en (4.19). La dynamique physique a lieu à  $s = 0$ , où les deux phases dynamiques coexistent.

transition de phase dynamique en analogie avec la mécanique statistique d'équilibre où l'énergie libre signale la présence d'une transition de phase statique.

Pour tous les modèles qui possèdent la propriété du bilan détaillé, comme le modèle FA, par rapport à une distribution d'équilibre  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$ , c'est à dire les modèles dont la dynamique satisfait  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = P_{\text{eq}}(\mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})$ , la fonction de grandes déviations peut être évaluée selon un principe variationnel. En effet, si l'opérateur d'évolution satisfait le bilan détaillé il peut être symétrisé au moyen d'une transformation de similitude de la forme :

$$(\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathcal{C},\mathcal{C}'} = P_{\text{eq}}^{-1/2}(\mathcal{C})(\mathbb{W}_K)_{\mathcal{C},\mathcal{C}'}P_{\text{eq}}^{1/2}(\mathcal{C}') , \quad (4.21)$$

ce qui donne

$$(\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} = e^{-s} [W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})]^{\frac{1}{2}} - r(\mathcal{C})\delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} = (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \quad (4.22)$$

Vu que  $\tilde{\mathbb{W}}_K$  et  $\mathbb{W}_K$  sont reliés par une transformation de similitude leurs valeurs propres sont les mêmes et leur valeur propre maximale, *i.e.* l'énergie libre dynamique est donnée

par :

$$\psi_K(s) = \max_{\{V(\mathcal{C})\}} \frac{\sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} V(\mathcal{C})(\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} V(\mathcal{C}')}{\sum_{\mathcal{C}} V(\mathcal{C})^2} = \max_{|V\rangle} \frac{\langle V | \tilde{\mathbb{W}}_K | V \rangle}{\langle V | V \rangle}, \quad (4.23)$$

où  $\{V(\mathcal{C})\}$  est l'ensemble de tous les vecteurs de l'espace considéré, dépendant de l'ensemble des configurations. Pour  $s = 0$  le maximum est atteint pour  $V(\mathcal{C}) = \sqrt{P_{\text{eq}}(\mathcal{C})}$ , et  $\psi(0) = 0$  comme il se doit.

Dans le cas d'un modèle bosonique en champ moyen, les taux de transition (4.8) deviennent :

$$W(n \rightarrow n+1) = cn \quad \text{et} \quad W(n+1 \rightarrow n) = \frac{n(n+1)}{N} \quad (4.24)$$

et donc l'opérateur symétrisé a pour éléments :

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{n+1, n} &= e^{-s} \sqrt{cn^2 \frac{n+1}{N}} - r(n) \delta_{n+1, n} \\ (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{n-1, n} &= e^{-s} \sqrt{c(n-1)^2 \frac{n}{N}} - r(n) \delta_{n-1, n}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

avec  $r(n) = cn + n(n-1)/N$ . Vu que les vecteurs  $|V\rangle$  sont des poids de probabilité (voir éq. (4.23)), on identifie  $V(n)$  à une distribution de probabilité paramétrisée par une densité  $\rho = \sum_i n_i/N$ , de la forme  $V_\rho(n) = \exp(Nf(\rho))$ . On peut donc écrire :

$$\sum_{n'} (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{n', n} V(n') = e^{-s} \left( \sqrt{cn^2 \frac{n+1}{N}} e^{Nf(\rho + \frac{1}{N})} + \sqrt{c(n-1)^2 \frac{n}{N}} e^{Nf(\rho - \frac{1}{N})} \right) - 2r(n) e^{Nf(\rho)} \quad (4.26)$$

d'où, en développant  $f(\rho + 1/N) \simeq f(\rho) + \partial_\rho f/N$  et en prenant la limite  $N \gg 1$ , on a :

$$\sum_{n, n'} V(n) (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{n', n} V(n') \simeq \sum_{\rho} e^{2Nf(\rho)} N (e^{-s} \sqrt{c\rho^3} (e^{\partial_\rho f} + e^{-\partial_\rho f}) - (c\rho + \rho^2)). \quad (4.27)$$

Vu que  $V_\rho(n) = \exp(Nf(\rho))$  le supremum en (4.23) doit être pris sur toutes les fonctions  $f$  possibles. Le terme qui domine la somme en équation (4.27) correspond au maximum de la fonction  $f$  choisie, c'est à dire à un  $\rho^*$  tel que  $\partial f / \partial \rho|_{\rho=\rho^*}$ , donc le supremum sur toutes les fonctions  $f$  devient un supremum sur toutes les densités  $\rho^*(f)$  qui maximisent ces fonctions, ce qui donne :

$$\psi(s) = -N \min_{\rho} \mathcal{F}_K(\rho, s) \quad (4.28)$$

avec

$$\mathcal{F}_K(\rho, s) = N\rho (\rho - 2e^{-s}\sqrt{c\rho} + c) . \quad (4.29)$$

L'énergie libre à la Landau (4.29) pour le paramètre d'ordre  $\rho$  est représentée sur la figure 4.2 pour différentes valeurs de  $s$ .

On voit en dérivant  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$  par rapport à  $\rho$  que l'énergie libre variationnelle atteint son minimum en  $\rho_1 = c(\bar{\phi}_*)^2$  et  $\rho_2 = 0$ , et on retrouve bien, à partir de l'équation (4.23), l'expression (4.19) pour la fonction de grandes déviations.

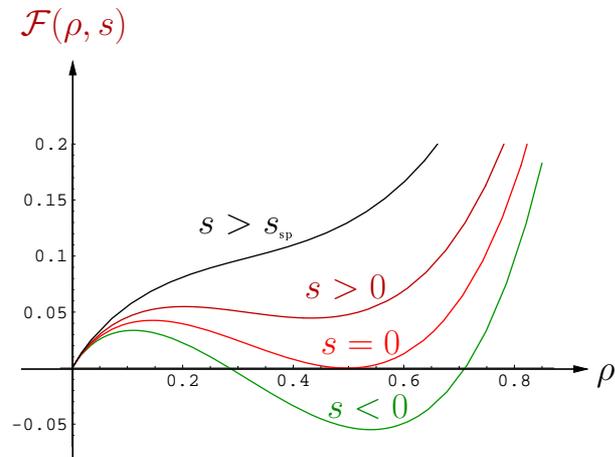


FIG. 4.2 – Transition de phase dynamique dans le modèle FA : l'énergie libre variationnelle  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$  est représentée en fonction de la densité  $\rho$  pour quatre valeurs de  $s$ . Pour  $s > 0$  la fonction a deux minima dont l'absolu correspond à une densité nulle qui caractérise la phase inactive de la dynamique. Pour  $s < 0$  le minimum absolu est atteint en  $\rho \neq 0$ . On retrouve donc une séparation entre deux phases dynamiques différentes qui coexistent à  $s = 0$ .

La valeur de  $\rho$  qui minimise  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$ , notée  $\rho_{\text{var}}(s)$ , représente une estimation du paramètre d'ordre  $\rho_K(s)$ , défini comme la moyenne de la densité dans l'état  $s$  avec comme poids  $e^{-sK}$ .

Pour  $s > 0$  le minimum absolu de  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$  est atteint en  $\rho = 0$ , ce qui correspond à la phase bloquée ou inactive de la dynamique où le paramètre d'ordre est nul. En particulier pour  $s > s_{\text{sp}}$ , où  $\mathcal{F}_K(\rho, s_{\text{sp}})$  est la première courbe où le minimum à  $\rho \neq 0$  devient un point d'inflexion, l'énergie libre n'a plus qu'un minimum en  $\rho = 0$ . Pour  $s < 0$  par contre le minimum absolu est atteint en  $\rho \neq 0$ , ce qui correspond à la phase

active de la dynamique où le paramètre d'ordre est non nul :  $\rho_K(s) \neq 0$ . On remarque que le paramètre d'ordre  $\rho_K(s)$ , comme l'activité  $K(s)$ , présentent une discontinuité en passant d'une valeur non nulle à  $s < 0$  à une valeur nulle à  $s > 0$ . Pour  $s = 0$  on a coexistence des phases dynamiques : le système physique se trouve dans un état vitreux, dynamiquement hétérogène, où les deux types (actif et inactif) de régimes dynamiques suivis par le système sont en compétition.

Cette transition dynamique a lieu à toutes les températures pour lesquelles le système est dans un état vitreux et n'implique aucune transition statique. Toutefois à travers la définition de l'énergie libre à la Landau  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$ , cette transition dynamique se manifeste en une forme qui est analogue à celle que prend une transition statique en fonction de l'énergie libre de Landau.

### 4.1.3 Modèle sans contrainte cinétique

On montre dans cette section que notre transition dynamique n'a pas lieu si le système considéré ne suit pas une dynamique vitreuse. Faute de pouvoir le prouver de façon générale, on considère ici un modèle particulier : le modèle FA sans contrainte cinétique. Ce modèle, appelé modèle  $A$  à cause sa représentation schématique  $A \leftrightarrow \emptyset$ , a la même distribution d'équilibre que le modèle FA mais atteint l'équilibre à travers une dynamique non vitreuse (relaxation exponentielle) puisqu'il s'agit de particules indépendantes dynamiquement.

On montre que pour ce modèle la fonction de grandes déviations en fonction de  $s$  n'a pas de singularités et que l'énergie libre variationnelle a un seul minimum en  $\rho \simeq c$ .

En enlevant la contrainte cinétique les taux de transition (4.24) deviennent :

$$W(n \rightarrow n+1) = c \quad \text{et} \quad W(n \rightarrow n-1) = n. \quad (4.30)$$

On choisit la même base de vecteurs  $V_\rho(\mathbf{n}) = \exp(Nf(\rho))$  de sorte que l'équation (4.27) devient :

$$\sum_{n,n'} V(n)(\tilde{W}_K)_{n',n} V(n') \simeq \sum_{\rho} e^{2Nf(\rho)} N(e^{-s} \sqrt{c\rho}(e^{\partial_\rho f} + e^{-\partial_\rho f}) - (c + \rho)). \quad (4.31)$$

En passant à nouveau du supremum sur les fonctions  $f$  au supremum sur les densités  $\rho^*(f)$  qui les maximisent, on peut résoudre l'équation

$$\psi(s) = -N \min_{\rho} \mathcal{F}_K(\rho, s) \quad (4.32)$$

avec

$$\mathcal{F}(\rho, s) = c + \rho - 2e^{-s}\sqrt{\rho c}, \quad (4.33)$$

d'où on obtient :

$$\psi_K(s) = c(e^{-2s} - 1), \quad \rho_K(s) = ce^{-2s}. \quad (4.34)$$

Il s'ensuit que même si le modèle  $A$  et le modèle FA ont la même distribution d'équilibre  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$  et donc la même énergie libre *statique*, leurs énergies libres dynamiques sont fondamentalement différentes, comme on le voit sur la figure 4.1.3. Pour des systèmes de grande taille, le modèle FA présente une transition de phase dynamique, mais pas le modèle  $A$ . La densité d'excitation  $\rho_K(s)$  moyennée dans l'état- $s$  correspond au minimum de l'énergie libre dynamique : dans le modèle FA  $\rho_K(s)$  a une discontinuité en  $s = 0$  et saute de la valeur  $\rho_K(s = 0^-) = c$  à  $\rho_K(s = 0^+) = 0$ , tandis dans le modèle  $A$   $\rho_K(s)$  est une fonction continue de  $s$  notamment en  $s = 0$  où  $\rho_K(s = 0) = c$ .

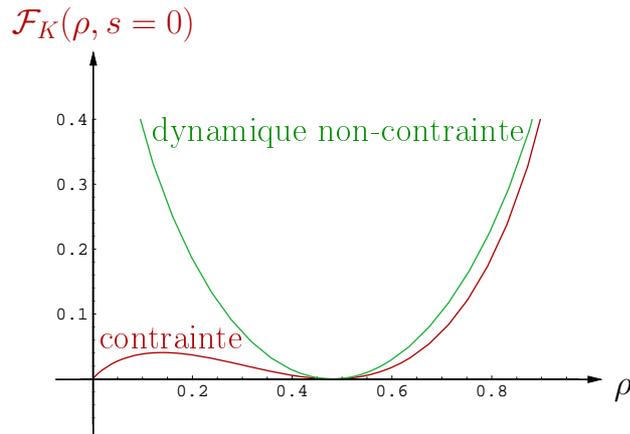


FIG. 4.3 – Énergie libre dynamique à la Landau  $\mathcal{F}_K(\rho, s)$  pour le modèle à dynamique contrainte et le modèle à dynamique non-contrainte à  $s = 0$ . Pour le modèle FA on a coexistence de phases dynamiques avec deux minima d'égale profondeur tandis que pour le modèle  $A$  l'énergie libre n'a qu'un minimum en  $\rho = c$ .

#### 4.1.4 Réductibilité et états- $s$

On complète cette partie avec quelques précisions sur les quantités moyennées dans l'état- $s$  dans les modèles cinétiquement contraints.

Lors de la construction de la thermodynamique des histoires faite dans le chapitre 3 on a supposé implicitement que dans la limite pour  $t \rightarrow \infty$  le système considéré atteint un état stationnaire et que cet état soit unique : par exemple dans la définition d'entropie dynamique donnée en équation (3.35), ou dans la construction des états stationnaires à  $s$  non-nul décrits dans la section 3.4.

Pour des systèmes à dynamique markovienne de taille finie, la convergence à un état stationnaire unique est assurée tant que la dynamique est irréductible [98]. Comme on l'a vu dans la section 2.1.1 les modèles cinétiquement contraints peuvent être fortement irréductibles. Le modèle FA est en général considéré comme effectivement irréductible parce que le poids statistique de la configuration  $\mathbf{n} = \{0, \dots, 0\}$  à haute densité n'affecte pas la distribution de Boltzmann-Gibbs du système pour des grandes tailles.

Néanmoins quand il s'agit de calculer des fonctions de grandes déviations les fluctuations rares deviennent pertinentes. Quand on veut moyenniser sur toutes les histoires que le système a suivi, par exemple en (3.26), il faut penser à choisir la distribution de probabilité de la configuration initiale  $p(\mathcal{C}_0)$  en sorte d'exclure les configurations qui ne peuvent être atteintes par les configurations de la partition majeure, sur laquelle est définie la distribution de Boltzmann-Gibbs. Ceci est valable aussi pour le principe variationnel (4.23) où les vecteurs  $V(\mathcal{C})$  doivent être nuls pour les configurations de la ou des partitions mineures.

## 4.2 Résultats numériques en dimension finie

Dans cette deuxième partie du chapitre on rapporte les résultats numériques obtenus pour les modèles cinétiquement contraints, c'est à dire les évaluations de fonctions de grandes déviations et de paramètres d'ordre dans l'espace des histoires. Aucun résultat analytique n'étant disponible en dimension finie les résultats de ces simulations complètent de façon déterminante les résultats obtenus analytiquement en champ moyen : l'existence d'une transition dynamique dans l'espace des histoires est confirmée et la forme de la discontinuité de l'énergie libre est la même que dans les transitions de phase statiques en dimension finie.

Pour simuler une dynamique dans l'espace des histoires on a utilisé un algorithme, développé par Lecomte et Tailleur en [81] sur la base de l'algorithme de Giardinà-Kurchan-Peliti [55], qu'on introduit dans la prochaine section.

### 4.2.1 Algorithme de clonage

L'algorithme de clonage qu'on s'apprête à décrire a été formulé pour pouvoir simuler une dynamique dans l'espace des histoires et évaluer la fonction de grandes déviations d'une observable extensive en temps  $A$ . En principe il s'agirait donc d'étudier la fonction de grandes déviations  $\pi(a)$  associée à la probabilité de mesurer une valeur  $a$   $t$  de l'observable  $A$  sur un temps long :

$$\text{Prob}(A/t = a, t) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{avec } t \rightarrow \infty. \quad (4.35)$$

Cette définition même de la fonction de grandes déviations rend sa détermination difficile, car la probabilité d'observer une valeur de  $A/t$  loin de sa moyenne décroît exponentiellement en temps. Déterminer directement  $\pi(a)$  pose donc un problème d'échantillonnage – il faut observer un grand nombre de trajectoires pour obtenir des valeurs atypiques de  $A$ .

Comme on l'a vu au paragraphe 3.3.3, il est en général possible de reconstruire  $\pi(a)$  à partir de  $\psi_A(s)$  (voir éq. (3.34)), et c'est en effet cette dernière fonction que l'algorithme de clonage [81] arrive à évaluer en mesurant la valeur moyenne d'une observable bien choisie dans une *nouvelle dynamique*.

À la base de cet algorithme se trouve la transformée de Laplace  $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$  de la probabilité jointe  $P(\mathcal{C}, A, t)$  d'observer le système dans une configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $t$ , ayant mesuré une valeur  $A$  de l'observable (3.31). Elle obéit à l'équation d'évolution (3.32), qui peut se récrire :

$$\partial_t \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \underbrace{\sum_{\mathcal{C}'} W_s(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}', s, t) - r_s(\mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}_{\text{partie conservant la probabilité}} + \underbrace{[r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})] \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}_{\text{partie ne conservant pas la probabilité}} \quad (4.36)$$

où l'on a introduit une nouvelle dynamique de taux de transition dépendant de  $s$  :

$$W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = e^{-s\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'), \quad (4.37)$$

dont le taux d'échappement depuis la configuration  $\mathcal{C}$  est :

$$r_s(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'). \quad (4.38)$$

Nous avons vu au paragraphe 3.4 que  $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  et  $Z_A(s, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  évoluent exponentiellement en temps avec un taux  $\psi_A(s)$ , qui s'interprète comme le taux de perte (ou de gain) de probabilité de l'équation d'évolution (3.32). Dans l'écriture (4.36) de l'équation d'évolution, on a séparé deux parties, l'une conservant la probabilité, l'autre, diagonale, ne la conservant pas.

Le facteur non-conservatif  $\delta r(\mathcal{C}) = r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})$  dépend en général de  $\mathcal{C}$  et fait en sorte que la probabilité de rester dans une configuration  $\mathcal{C}$  un temps  $\Delta t$  soit multipliée par une exponentielle de taux  $\delta r(\mathcal{C})$ . La dynamique est donc constituée d'une succession de changements de configuration déterminés par les taux modifiés (4.37), et d'évolutions exponentielles de  $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$  entre les changements de configuration.

Pour représenter cette évolution, on considère un grand nombre de copies du système qui évoluent en parallèle avec la dynamique  $s$ -modifiée (4.37-4.38). L'évolution exponentielle de la probabilité  $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$  avec le taux  $\delta r(\mathcal{C})$  est traduite en une reproduction, ou *clonage* de la copie en question.

En particulier, à chaque changement de configuration d'une copie  $\mathcal{C}$  :

- (1)  $\mathcal{C}$  saute de sa configuration  $\mathcal{C}$  vers une autre configuration  $\mathcal{C}'$  tirée avec probabilité  $W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')/r_s(\mathcal{C})$  ;
- (2) l'intervalle de temps  $\Delta t$  que la copie  $\mathcal{C}$  passera dans l'état  $\mathcal{C}'$  avant de changer à nouveau de configuration est tiré suivant la loi de Poisson (3.22) de paramètre  $r_s(\mathcal{C}')$  ;
- (3) la copie  $\mathcal{C}$  est soit tuée, soit clonée avec un taux  $\mathcal{Y}(\mathcal{C}') = e^{\Delta t [r_s(\mathcal{C}') - r(\mathcal{C}')]}$  : en posant  $y = \lfloor \mathcal{Y}(\mathcal{C}') + \varepsilon \rfloor$  où  $\varepsilon$  est uniformément distribué sur  $[0, 1]$ ,
  - a) si  $y = 0$ , la copie  $\mathcal{C}$  est tuée,
  - b) si  $y = 1$ , il ne se passe rien,
  - c) si  $y > 1$ , la copie  $\mathcal{C}$  est copiée  $y - 1$  fois.

À chaque étape de cette procédure, le nombre total de copies du système est multiplié par un facteur  $X = \frac{\mathcal{N} + y - 1}{\mathcal{N}}$ ,  $\mathcal{N}$  étant le nombre total de copies avant l'étape. Ce facteur traduit l'évolution exponentielle en temps de  $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$ . Tant que le nombre total  $\mathcal{N}(t)$  de copies à l'instant  $t$  est grand on peut montrer (voir [81] pour une démonstration) que le nombre  $\mathcal{N}(\mathcal{C}, t)$  de copies dans l'état  $\mathcal{C}$  à l'instant  $t$  vaut

$$\mathcal{N}(\mathcal{C}, t) = \mathcal{N}(\mathcal{C}, 0) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) \quad (4.39)$$

Ainsi, pour  $t$  grand,  $Z_A(s, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$  est simplement donnée par l'augmentation de la population totale :

$$Z_A(s, t) = \frac{\mathcal{N}(t)}{\mathcal{N}(0)} \quad (4.40)$$

Tel quel, l'algorithme entraîne la disparition ou l'explosion du nombre total de copies du système. Pour maintenir leur nombre constant, on remplace les points  $a)$ ,  $b)$ ,  $c)$  de la 3<sup>ème</sup> étape par :

- (3') a) si  $y = 0$ , la copie  $\mathcal{C}$  est remplacée par une autre copie tirée au hasard,
- b) si  $y = 1$ , rien ne se passe,
- c) si  $y > 1$ ,  $y - 1$  copies tirées au hasard sont remplacées par  $\mathcal{C}$  avec probabilité  $\frac{\mathcal{N}}{\mathcal{N}+y-1}$ .

Pour déterminer  $\psi_A(s, t)$ , il suffit de conserver tous les facteurs  $X = \frac{\mathcal{N}' + y - 1}{\mathcal{N}'}$ ,  $\mathcal{N}'$  étant cette fois le nombre total de copies, conservé. On a en effet pour (4.40) :

$$\frac{1}{t} \ln X_1 \dots X_{\mathcal{K}} = \frac{1}{t} \ln \mathcal{N}(t) \sim \psi_A(s) \quad \text{pour} \quad t \rightarrow \infty \quad (4.41)$$

où  $\mathcal{K}$  est le nombre total d'événements entre 0 et  $t$ , incluant les changements de configurations et les étapes de clonage.

Par construction, dans la nouvelle dynamique (1), (2), (3') à nombre de copies constant, le nombre  $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t)$  de copies dans l'état  $\mathcal{C}$  à l'instant  $t$  vaut  $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) = \mathcal{N}(\mathcal{C}, t)/\mathcal{N}(t)$ . Ainsi, d'après (3.44), (4.39) et (4.40),  $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t)$  ne dépend plus de  $t$  aux grands temps et donne une représentation de l'état- $s$  (paragraphe 3.4)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) = \tilde{P}(\mathcal{C}, A) . \quad (4.42)$$

En particulier, la mesure  $\langle \mathcal{O} \rangle_s$  d'une observable  $\mathcal{O}$  dans l'état- $s$  peut se mesurer numériquement comme la moyenne de  $\mathcal{O}$  sur l'ensemble des clones

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(\mathcal{C}) \mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) , \quad (4.43)$$

pour un temps  $t$  assez grand pour avoir atteint l'état stationnaire. Ceci est également généralisable à une observable  $\mathcal{O}$  qui dépend de l'histoire complète entre 0 et  $t$ , mais une valeur de  $\mathcal{O}$  doit être attachée à chaque clone, ce qui fait que la mesure de probabilité prenne la forme  $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, \mathcal{O}, t)$ .

### 4.2.2 Résultats

On décrit dans cette section les résultats obtenus en utilisant l'algorithme de clonage 4.2.1. Comme annoncé dans le chapitre 2 on a simulé la dynamique de modèles cinétiqument contraints sans loi de conservation locale, en particulier le modèle FA en dimension 1 et le modèle East end imension 3 (décrits respectivement en section 2.1.1 et 2.1.1), et de deux modèles de gaz sur réseau bidimensionnel avec conservation du nombre de particules, le modèle de Kob-Andersen et le modèle de gaz sur réseau triangulaire (décrits respectivement en section 2.1.2 et 2.1.2).

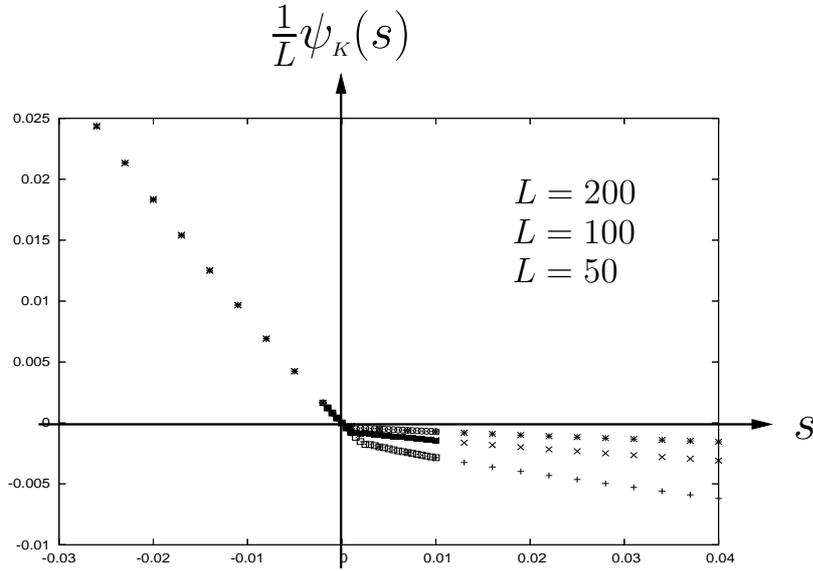


FIG. 4.4 – Modèle de Fredrickson et Andersen : évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)/L$  dans différents états  $s$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-2}, 3 \cdot 10^{-2})$  en dimension 1. Le nombre de sites varie de  $N = 50$  à  $N = 200$  et la température est de  $T = 1/\beta = 0.91$ . Plus la taille est grande plus  $\psi_K(s)/L$  est proche de zéro pour  $s > 0$ , ce qui montre que la fonction de grandes déviations est sous-extensive en la taille  $L$  du système dans la phase inactive de la dynamique.

Pour les quatre modèles les fonctions de grandes déviations sont évaluées en suivant l'algorithme de clonage [81] décrit en section 4.2.1. Le système est cloné, c'est-à-dire qu'on part avec  $\mathcal{N}'$  copie du système chacune dans une configuration différente choisie aléatoirement parmi les configurations possibles de densité ou nombre d'excitations  $\rho_{\text{in}} = \sum_i n_i = 0, 5$ . Ensuite pour une valeur fixée de  $s$  on fait évoluer chaque copie avec

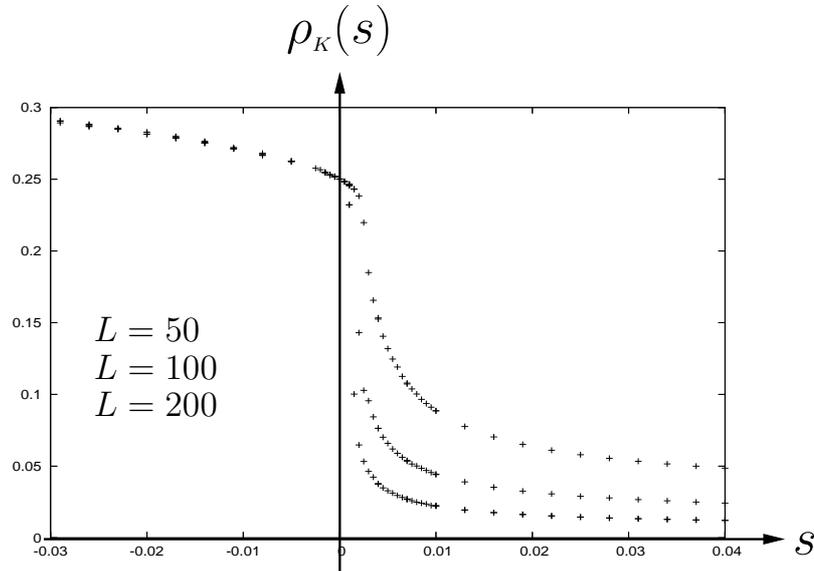


FIG. 4.5 – Modèle de Fredrickson et Andersen : évaluation numérique du paramètre d'ordre  $\rho_K(s)$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-2}, 3 \cdot 10^{-2})$  en dimension 1 à  $T = 1/\beta = 0.91$ . Même le paramètre d'ordre est sous-extensif dans la taille du système dans la phase inactive de la dynamique puisque quand le nombre de site augmente (du haut vers le bas dans le graphe) la densité s'approche de zéro.

les taux de transition donnés en (4.37), et on garde en mémoire, chaque fois qu'une copie change de configuration, le facteur de clonage de la copie considérée. Dans le modèle FA et le modèle East la densité évolue puisque chaque changement de configuration comporte un changement de densité. L'observable  $A$  qui apparaît en (4.37) choisie pour biaiser la dynamique dans un état à  $s$  fini est l'activité de l'histoire  $K$ , de sorte à évaluer des fonctions de grandes déviations par rapport à l'observable  $K$ . Les états à  $s < 0$  correspondent donc à la phase active de la dynamique avec  $K \gg \langle K \rangle$  et les histoires à  $s < 0$  correspondent à la phase inactive de la dynamique avec  $K \ll \langle K \rangle$ . En répétant cette manipulation pour différents  $s$  on obtient un graphique de l'énergie libre dynamique en fonction de  $s$ .

Les moyennes d'observables, telles que  $\langle r \rangle_s$  ou  $\rho_K(s)$ , sont évaluées en utilisant l'équation (4.43) une fois l'état stationnaire atteint, c'est-à-dire une fois que la dynamique dans l'état- $s$  a assez évolué pour que les moyennes d'observables effectuées sur tous les clones restent presque constantes. Les moyennes d'observables se font en

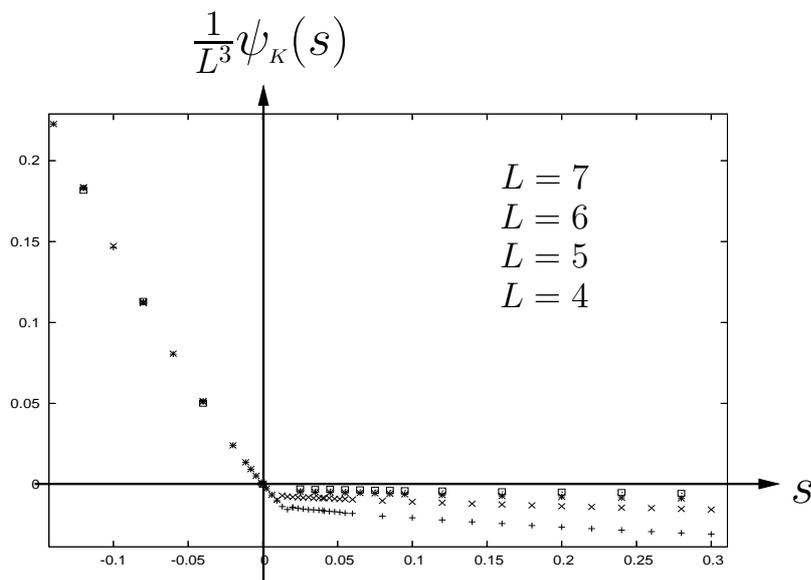


FIG. 4.6 – Modèle East : évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)/L^3$  dans différents états  $s$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 3. La taille du système varie comme indiqué sur le graphe de  $N = 64$  à  $N = 343$  sites et la température est de  $T = 1/\beta = 0.91$ . Comme pour le modèle FA, on voit que l'énergie libre est sous-extensive en la taille  $L^3$  du système dans la phase inactive, à  $s > 0$ , de la dynamique.

gardant en mémoire leur moyenne sur toutes les copies du système tous les  $M$  pas de temps à partir du moment où l'ensemble des copies atteint l'état stationnaire. Pour cette raison les temps de simulation sont très longs déjà à des tailles très petites, et augmentent en s'éloignant de l'état physique à  $s = 0$  puisque la dynamique étant plus biaisée, le système met plus de temps à stationnariser. On relève que la dynamique est biaisée dans notre cas suivant  $K$ , et donc l'observable moyennée doit être choisie sur la base de sa variation en fonction de l'activité du régime dynamique, ou état- $s$ , dans lequel elle est mesurée. Dans le modèle FA et le modèle East l'observable choisie est la densité : en effet, vu les contraintes dynamiques, plus la densité du système est haute, plus il y a de possibilités de changer de configuration et donc on est dans une phase dynamiquement active. Dans le modèle KA et le modèle de gaz sur réseau triangulaire l'observable choisie est le taux d'échappement d'une configuration : moyennée sur toutes les copies, à chaque saut de configuration, cette quantité quantifie directement

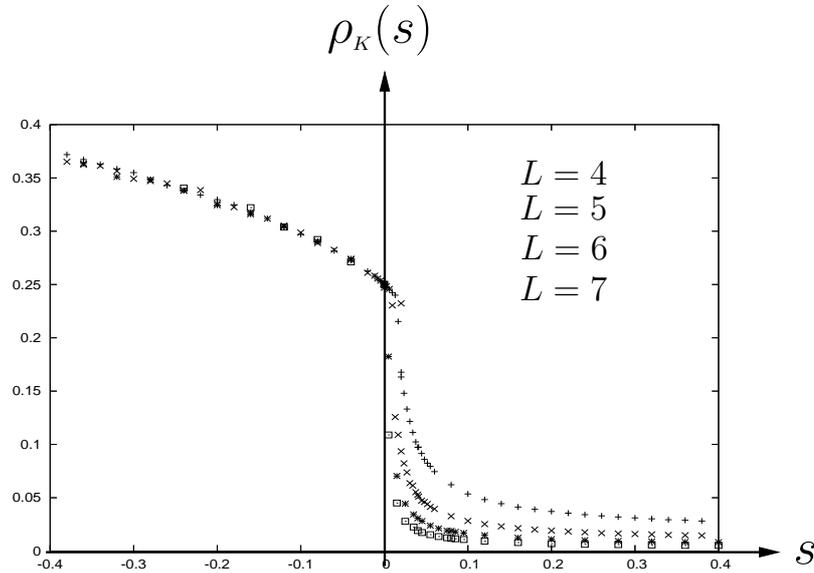


FIG. 4.7 – Modèle East : évaluation numérique du paramètre d'ordre  $\rho_K(s)$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 3 à  $T = 1/\beta = 0.91$ . La densité est sous-extensive en la taille  $L^3$  du système dans la phase inactive de la dynamique.

l'activité de la phase dynamique considérée.

Sur les figures 4.4 et 4.5 on montre les résultats des simulations du modèle FA en une dimension : l'énergie libre du système, *i.e.* la fonction de grandes déviations par rapport à l'activité  $K$  du système, possède une singularité en  $s = 0$  (figure 4.4). Dans la phase active  $\psi_K(s)$  est extensive en la taille du système et  $\rho_K(s)$  est une constante non nulle, tandis que dans la phase inactive l'énergie libre est sous-extensive en la taille du système. Dans la limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$  on retrouve la fonction de grandes déviations évaluée en champ moyen et représentée sur la figure 4.1. Ces résultats ont été obtenus en dimension  $d = 1$  sur des tailles qui vont jusqu'à  $N = 200$  sites.

Sur les figures 4.6 et 4.7 on a les résultats des simulations pour un modèle à contrainte dirigée : le modèle East en trois dimensions. La fonction de grandes déviations et la densité dans les différents états- $s$  ont le même profil que dans le modèle FA en une dimension. Ce qui change est le domaine du paramètre  $s$ , qui est ici dix fois plus étendu que dans le modèle FA. On pense que ceci est dû au fait que dans le modèle East en trois dimensions la contrainte dynamique soit plus forte et donc la dynamique doit être plus fortement biaisée pour avoir les mêmes effets que dans le modèle FA.

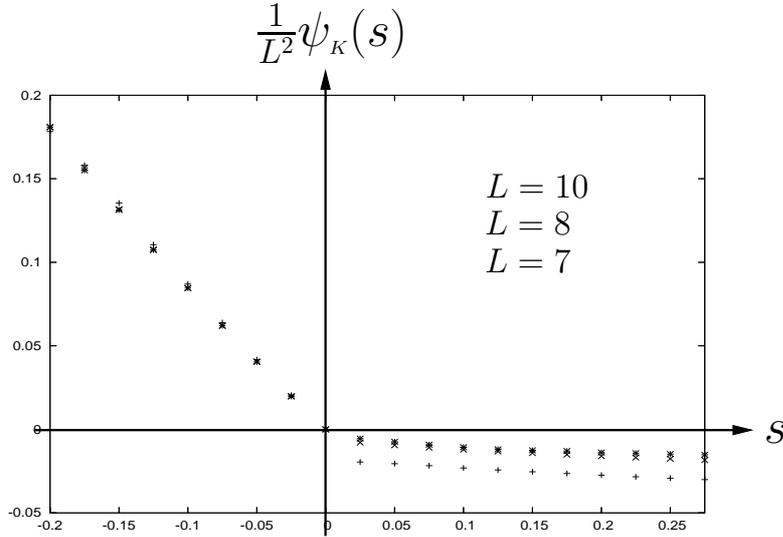


FIG. 4.8 – Modèle de Kob et Andersen : évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\frac{1}{L^2}\psi_K(s)$  dans différents états  $s$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 2 à densité  $\rho = 0,5$ . Comme le nombre de sites augmente de  $N = 49$  à  $N = 100$  sites, la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)/L^2$  s’approche de zéro dans la phase inactive de la dynamique montrant que la fonction de grandes déviations est sous-extensive en la taille du système dans la phase active et proportionnelle à la taille du système dans la phase inactive.

Les résultats pour les modèles avec conservation de la densité se trouvent sur les figures 4.8 et 4.9 pour le modèle KA en deux dimensions, et sur les figures 4.10 et 4.11 pour le gaz sur réseau triangulaire toujours en deux dimensions. Dans les deux cas la fonction de grandes déviations par rapport à l’activité  $K$  du système présente une singularité en  $s = 0$ . Dans la phase active  $\psi_K(s)$  est extensive en la taille  $L^2$  du système et le taux d’échappement  $\langle r \rangle_s$  est une constante non nulle, tandis que dans la phase inactive l’énergie libre est sous-extensive en la taille du système. Ces résultats ont été obtenus en dimension  $d = 2$  pour un nombre de sites qui va jusqu’à  $N = 100$  pour le modèle KA et  $N = 256$  sites pour le modèle sur réseau triangulaire. La densité a été choisie de  $\rho = 0,5$  pour que le système puisse être considéré comme effectivement irréductible aux tailles considérées (voir section 2.1.1).

On remarque une différence dans le taux d’échappement moyen dans les deux modèles, représentés sur la figure 4.9 et 4.11, dans la phase inactive : ceci peut être dû au

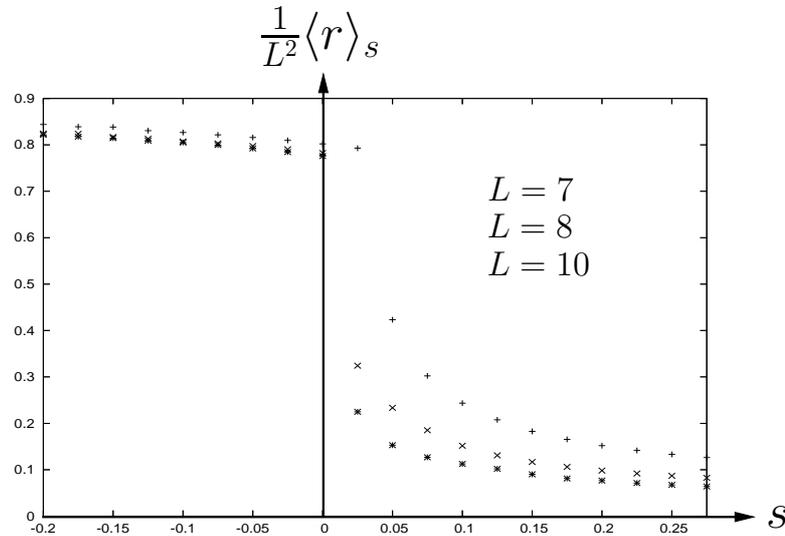


FIG. 4.9 – Modèle de Kob et Andersen : évaluation numérique du paramètre d'ordre  $\langle r \rangle_s / L^2$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 2 et densité  $\rho = 0,5$ . Quand la taille augmente le taux d'échappement moyen à  $s > 0$  constant diminue en module, se montrant sous-extensif dans la taille du système seulement dans la phase active.

fait que la contrainte dynamique du modèle sur réseau triangulaire est plus forte que celle du modèle KA, et qu'à la même densité  $\rho = 0,5$  le modèle TLG est plus bloqué, et donc a un taux  $\langle r \rangle_s$  plus proche de zéro déjà à  $s$  petit, tandis que le modèle KA doit arriver à des  $s$  plus grands, qui favorisent les configurations à taux d'échappement plus petit, pour avoir les mêmes valeurs de  $\langle r \rangle_s$ . On précise tout de même que la décroissance du taux d'échappement en fonction de  $s > 0$  pour le modèle de gaz sur réseau triangulaire ne se voit pas sur la figure mais a bien lieu.

Pour les quatre modèles à dynamique vitreuse considérés une transition dynamique a lieu : en particulier, en toute taille,  $\psi_K(s)$  est analytique et ce n'est qu'à  $L \rightarrow \infty$  que la transition se manifeste. De plus, le point de singularité n'est pas exactement  $s = 0$  en taille finie, mais se déplace de  $s > 0$  petit vers  $s = 0$  quand la taille augmente. Ces résultats en taille finie assurent donc que ces transitions ont bien une nature physique : l'état à  $s$  fini se déduit d'une déformation continue de l'état stationnaire physique à  $s = 0$ .

On remarque enfin que la présence des transitions dynamiques n'est pas due à l'existence de configurations inactives, car celles-ci sont de toute manière non-connectées aux

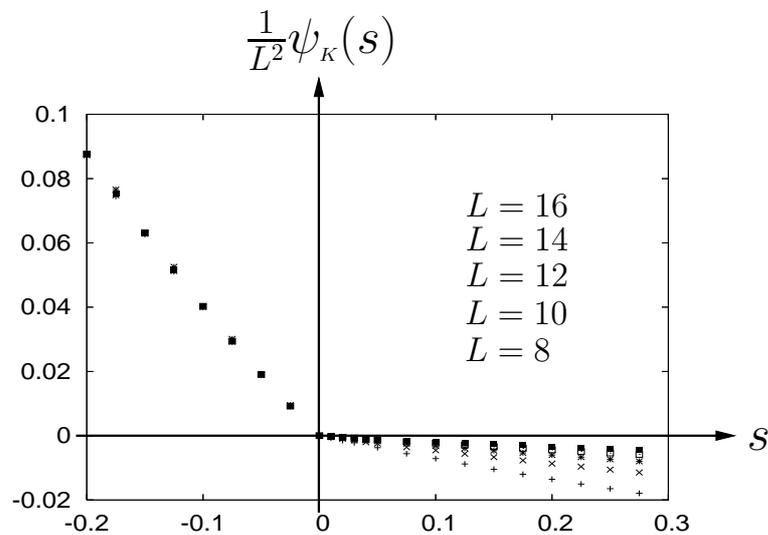


FIG. 4.10 – Modèle de gaz sur réseau triangulaire : évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)/L^2$  dans différents états  $s$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 2 et densité  $\rho = 0,5$ . Tout comme pour le modèle KA, cette fonction a une discontinuité en  $s = 0$ .

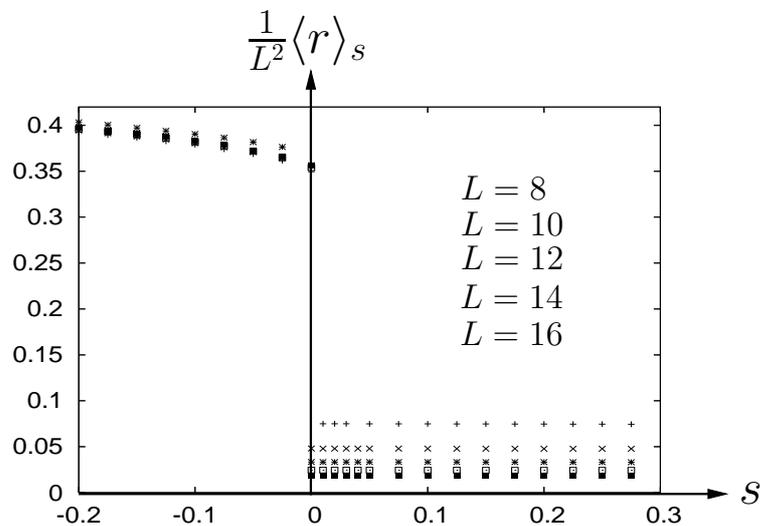


FIG. 4.11 – Modèle de gaz sur réseau triangulaire : évaluation numérique du paramètre d'ordre  $\langle r \rangle_s$  pour  $s \in (-3 \cdot 10^{-1}, 3 \cdot 10^{-1})$  en dimension 2 et densité  $\rho = 0,5$ . On voit encore une fois que  $\langle r \rangle_s$  est sous-extensif en la taille du système dans la phase inactive.

autres, et entièrement ignorées dans la phase active. De même, le mécanisme responsable des transitions n'est pas la présence d'un état absorbant qui n'intervient d'aucune façon dans la simulation d'une évolution dans l'espace des histoires.



# Chapitre 5

## Modèles de pièges et à énergies aléatoires

Dans ce chapitre on décrit la partie de travail de thèse effectuée sur les modèles de pièges à dynamique dirigée et sur la phase à basse température du modèle à énergies aléatoires.

Des résultats numériques et analytiques ont été obtenus, qui ont prouvé l'existence d'une transition de phase dynamique pour les deux modèles considérés. Ces résultats sont mis en relation avec le type de statistique suivie par les variables en jeu dans le modèle. Ce travail a été effectué en collaboration avec Grégory Schehr et Frédéric van Wijland, et publié en [110].

### 5.1 Modèle de pièges

On considère le modèle de pièges à dynamique dirigée décrit en section 2.2.2, défini par  $N$  pièges indépendants caractérisés par une énergie  $E_i$ . La dynamique du système consiste en des sauts entre les pièges, spécifiée par la probabilité  $P_i(t)$  que le système se trouve dans un piège  $i$  au temps  $t$ , et par des taux de transition  $W_{ij}$  qui donnent la probabilité par unité de temps de sauter du piège  $j$  au piège  $i$ . Dans le modèle de pièges dirigé (*directed trap model*) les taux de transition sont de la forme

$$W_{ij} = \delta_{i,j-1} \frac{1}{B_j} \quad \text{where} \quad B_j = e^{-\beta E_j}, \quad (5.1)$$

$i = 1, \dots, N$ . Donc le système évolue selon l'équation maîtresse :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = -\frac{P_i(t)}{B_i} + \frac{P_{i-1}(t)}{B_{i-1}}. \quad (5.2)$$

Les temps moyens de séjour dans un piège, qu'on indique ici par  $B_j$  sont des variables aléatoires distribuées selon une loi de Lévy :

$$p(B_j) = \theta(B_j - 1)\mu B_j^{-1-\mu} \quad , \quad \mu \in (0, 1), \quad (5.3)$$

où  $\theta(x)$  est la fonction Heaviside. Dans ce qui suit on va utiliser la notation  $\overline{\mathcal{O}(B_j)} = \int p(B_j)\mathcal{O}(B_j)dB_j$  pour noter une moyenne sur les  $B_j$ . En particulier, la distribution en (5.3) implique que le temps moyen d'attente dans un piège est infini, ce qui fait que la diffusion est anormale (voir section 2.2.2).

Pour vérifier si une transition dynamique a lieu dans ce système, on va évaluer la fonction de grandes déviations, ou énergie libre du système définie par :

$$Z_K(s, t) = \sum_i \tilde{P}_i(s, t) = \langle e^{-sK} \rangle \sim e^{t\psi_K(s)}, \quad (5.4)$$

où  $K$  est l'activité du système, définie comme le nombre de sauts entre pièges effectués par le système entre le temps 0 et le temps  $t$ . La fonction de grandes déviations est la plus grande valeur propre de l'opérateur  $\hat{W}^K$  défini par :

$$\frac{d\tilde{P}_i(s, t)}{dt} = \sum_j \hat{W}_{ij}^K \tilde{P}_j(s, t). \quad (5.5)$$

### 5.1.1 Transition dynamique

On prouve dans cette section qu'une transition dynamique du premier ordre a lieu dans le modèle de piège à dynamique dirigée.

Pour évaluer la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  on doit trouver la plus grande valeur propre de l'opérateur  $\hat{W}^K$ . Les  $N$  valeurs propres  $\lambda_j(s)$  de l'opérateur sont solutions de l'équation :

$$e^{-s} \frac{\tilde{P}_{i-1}(s, t)}{B_{i-1}} - \frac{\tilde{P}_i(s, t)}{B_i} = \lambda_j(s) \tilde{P}_i(s, t), \quad (5.6)$$

et donc

$$\psi_K(s) = \max_{1 \leq j \leq N} \{ \lambda_j(s) \}. \quad (5.7)$$

On écrit le polynôme caractéristique  $\det(\hat{W}^K - \lambda \mathbf{1})$ , dont le logarithme nous donne l'équation aux valeurs propres

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln(1 + \lambda_j(s) B_i) = -s. \quad (5.8)$$

Comme il se doit, on a donc  $\psi_K(s=0) = 0$ .

On considère d'abord le cas où  $s < 0$ , où il y a qu'une seule solution  $\lambda_j > 0$  de l'équation (5.8), qui donc est identifiée avec la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$ . Dans ce cas, *i.e.* dans la phase active, il est naturel de supposer que dans la limite pour  $N \rightarrow \infty$ ,  $\psi_K(s)$  est automoyennante, *i.e.*  $\psi_K(s) \simeq \overline{\psi_K(s)}$ . On utilise donc la loi des grands nombres pour traiter la somme en (5.8), et on obtient dans la limite pour  $N \rightarrow \infty$  :

$$\mu \int_1^\infty dB B^{-1-\mu} \ln(1 + \overline{\psi_K(s)} B) = -s, \quad (5.9)$$

qui détermine de façon univoque la moyenne sur le désordre de la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$ . Pour décrire les fluctuations de  $\psi_K(s)$  autour de sa moyenne pour un  $N$  fini avec  $N \gg 1$  on écrit :

$$\psi_K(s) - \overline{\psi_K(s)} = \chi_K(s) N^{-1/2} + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (5.10)$$

où  $\chi_K(s)$  est une variable aléatoire de moyenne nulle. En utilisant le théorème de la Limite Centrale appliqué à la somme en (5.8), on obtient que  $\chi_K(s)$  est une variable gaussienne telle que la distribution de  $\psi_K(s)$  est donnée pour  $N \gg 1$  par

$$p(\psi_K(s)) = \frac{\sqrt{N}}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{N(\psi_K(s) - \overline{\psi_K(s)})^2}{2\sigma^2} \right] \quad (5.11)$$

où  $\sigma^2$  est donné par

$$\sigma^2 = \left( \frac{B}{1 + \overline{\psi_K(s)} B} \right)^{-2} \frac{1}{[\ln^2(1 + \overline{\psi_K(s)} B) - (\ln(1 + \overline{\psi_K(s)} B))^2]}, \quad (5.12)$$

et où  $\overline{\psi_K(s)}$  est donnée en (5.9).

On considère maintenant le cas  $s > 0$  et ordonne les temps d'attente  $B_i$  de façon telle que  $0 < B_1 < \dots < B_N$ . Dans ce cas, on obtient des limites :

$$-\frac{1}{B_N} < \psi_K(s) < 0. \quad (5.13)$$

À partir de la distribution des variables  $B_i$  en (5.3) on obtient que la distribution de probabilité du plus grand temps d'attente  $B_N$  est donnée par :

$$p(B_N) = N\mu B_N^{-1-\mu}(1 - B_N^{-\mu})^{N-1}, \quad (5.14)$$

d'où on arrive pour  $N \gg 1$  :

$$\overline{\frac{1}{B_N}} \simeq -N^{-\frac{1}{\mu}}\Gamma(1 + \frac{1}{\mu})e^{-\frac{1}{\mu}+1}. \quad (5.15)$$

Donc, à partir des limites en (5.13) on trouve que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \overline{\psi_K(s)} = 0 \quad (5.16)$$

pour  $s > 0$ .

D'autre part, pour  $s < 0$ , à partir de l'équation (5.9) on trouve que  $\lim_{N \rightarrow \infty} \overline{\psi_K(s)} > 0$  et que dans cette limite

$$\overline{\psi_K(s)} \propto (-s)^{1/\mu} \quad (5.17)$$

pour  $s$  petit. Il s'ensuit que la dérivée première  $\overline{\psi'_K(s)}$  est continue mais les dérivées d'ordre supérieur  $\overline{\psi_K^{(p)}(s)}$  avec  $p \geq 1/\mu$ , vont être discontinues en  $s = 0$ , en indiquant une transition de phase dynamique d'ordre plus grand que un.

On a vérifié la validité de ce raisonnement en résolvant numériquement l'équation aux valeurs propres (5.8). La présence d'une transition de phase dynamique est confirmée par ces simulations. Sur la figure 5.1, on montre la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$ , solution de l'équation (5.8) en fonction de  $s$  pour différentes valeurs de  $N = 20, 30, 50$  et 100 pour  $\mu = 0,8$ . Les données sont obtenues en moyennant sur  $10^6$  réalisations des  $B_i$ . Pour  $s > 0$  ces données numériques montrent que  $\overline{\psi_K(s)} \rightarrow 0$  quand  $N \rightarrow \infty$  (en particulier on trouve que  $\overline{\psi_K(s)} \propto -N^{-1/\mu}$ , ce qui est cohérent avec les limites en (5.13)). D'autre part, cette figure 5.1 montre que  $\lim_{N \rightarrow \infty} \overline{\psi_K(s)} > 0$  pour  $s < 0$ . La ligne continue sur la figure 5.1 est la valeur analytique de  $\overline{\psi_K(s)}$  obtenue en résolvant numériquement l'équation (5.9), qui est en bon accord avec les données numériques et montre bien la présence d'une transition de phase dynamique.

La dérivée de la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$  est liée à la valeur moyenne de l'activité  $\langle K \rangle$  par l'équation (5.4) donc dans la phase active ( $s < 0$ ) de la dynamique l'activité prend une valeur constante  $\langle K \rangle > 0$  tandis que dans la phase inactive à  $s > 0$ , elle est sous-extensive en la taille du système :  $\langle K \rangle \sim N^{-1/\mu}$ .

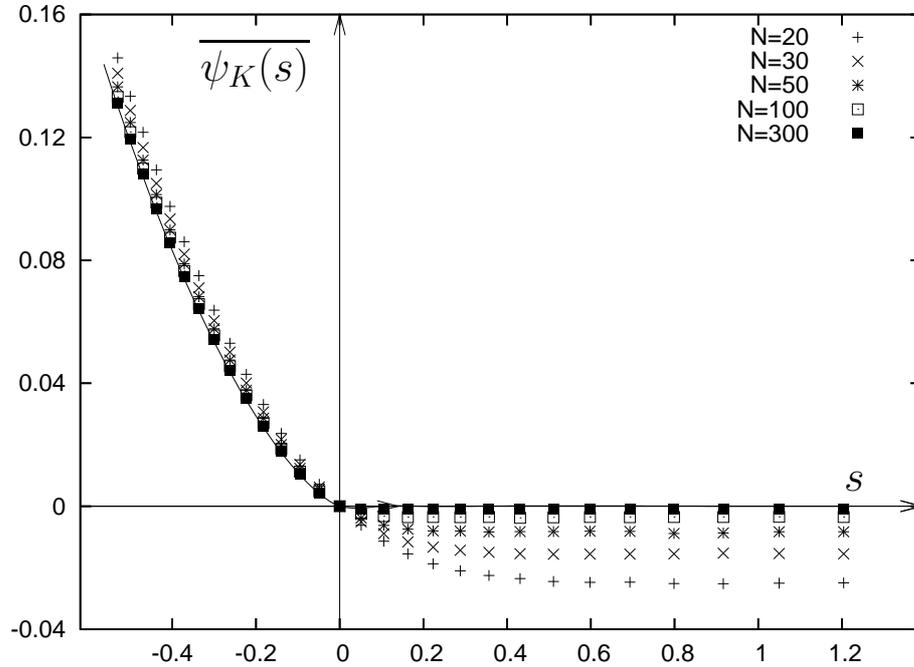


FIG. 5.1 – Tracé de  $\overline{\psi_K(s)}$  en fonction de  $s$  pour différentes valeurs de  $N$  et  $\mu = 0.8$ . La ligne solide est la solution de l'équation (5.9). Pour  $s > 0$  la courbe approche l'axe horizontal au fur et à mesure que la taille du système grandit, selon  $N^{-1/\mu}$ .

Notre hypothèse est que cette coexistence entre phases actives et inactives de la dynamique se manifeste à travers les propriétés vitreuses du modèle de pièges dirigé, décrites dans la section 2.2.2.

On remarque que dans le système pur correspondant, où les temps d'attente ne sont plus des variables aléatoires, les propriétés vitreuses disparaissent, tout comme la discontinuité des dérivées de la fonction de grandes déviations. L'activité est constante même dans la phase à  $s < 0$  et la dynamique est homogène.

Les résultats numériques sur la figure 5.1 ont été obtenus en supposant que la fonction de grandes déviations atteint sa moyenne dans la limite de grand  $N$  et qu'elle est distribuée selon les distributions (5.11, 5.12).

Cette supposition a été confirmée en évaluant numériquement la distribution de probabilité  $p(\psi_K(s))$  de  $\psi_K(s)$  pour un  $s$  négatif. Sur la figure 5.2 on montre les résultats

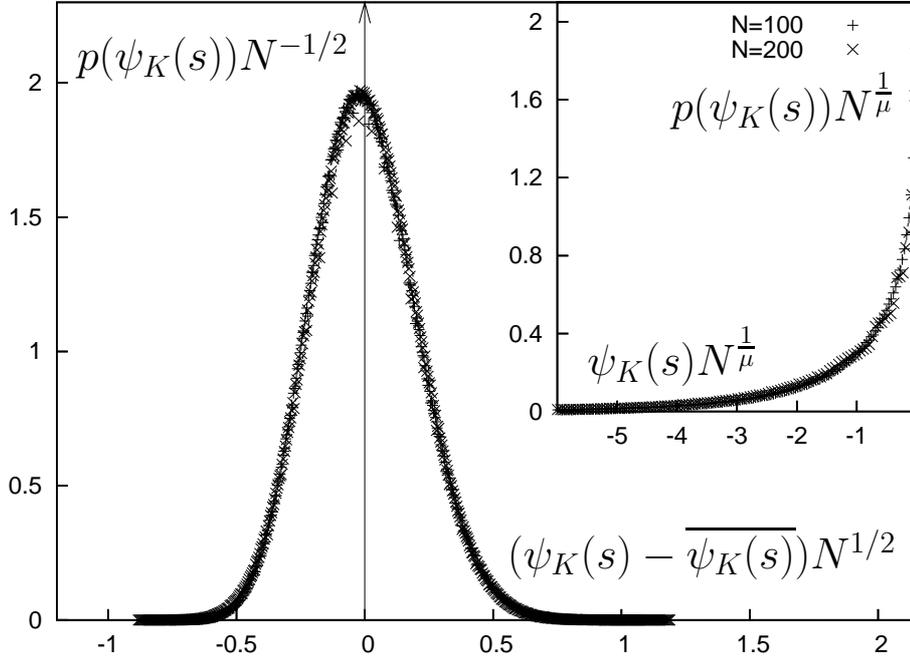


FIG. 5.2 – Évaluation numérique de la distribution de probabilité de la fonction de grandes déviations pour  $\mu = 0,8$  et  $s = -0,4$  ( $N=100,200$ ). La ligne continue est la reparamétrisation de la distribution gaussienne (5.11) par un facteur  $\sqrt{N}$ . Encart : évaluation numérique de la distribution de la fonction de grandes déviations pour  $\mu = 0,8$  et  $s = 0.2$ . La ligne continue est la limite pour grands  $N$  de la distribution (5.18) reparamétrisée pour la rendre indépendante de  $N$ .

de l'évaluation de  $p(\psi_K(s))N^{-1/2}$  en fonction de  $N^{1/2}(\psi_K(s) - \overline{\psi_K(s)})$  pour  $\mu = 0,8$  et  $s = -0,4$  ( $N = 100, 200$ ). Les données ont été obtenues en moyennant sur  $3 \cdot 10^7$  échantillons. La ligne continue est la distribution gaussienne obtenue en changeant d'échelle d'un facteur  $\sqrt{N}$  pour rendre les équations (5.11, 5.12) indépendantes de la taille du système. Cette distribution gaussienne est approchée par les données numériques quand  $N$  croît.

D'autre part, pour  $s > 0$  l'évaluation de la moyenne de la fonction de grandes déviations, donnée par la solution de l'équation (5.9), a été faite en limitant la valeur de  $\psi_K(s)$  à la limite (5.13) dépendante de la taille du système. On a trouvé numériquement

que la distribution  $p(\psi_K(s))$  de  $\psi_K(s)$  pour un  $s$  positif est bien approchée par la fonction donnée en (5.14) :

$$p(\psi_K(s)) = N\mu\psi_K(s)^{\mu-1}(1 - \psi_K(s)^\mu)^{N-1} \quad (5.18)$$

pour tout  $N$ . Dans l'encart de la figure 5.2 on montre la distribution (5.18) reparamétrisée selon  $p(\psi_K(s))N^{-1/\mu}$  en fonction de  $\psi_K(s)N^{1/\mu}$  pour  $N = 100, 200$  moyennée sur  $10^7$  échantillons pour  $s = 0, 2$  et  $\mu = 0, 8$ . Ces distributions correspondent bien à la limite pour  $N \gg 1$  de la distribution donnée en (5.18) reparamétrisée, qui donne :

$$p(x) = \mu x^{\mu-1} \exp(-x^\mu) . \quad (5.19)$$

## 5.2 Modèle à énergies aléatoires

Le modèle à énergies aléatoires (REM) est constitué de  $2^L$  niveaux d'énergie  $E_i$  qui sont des variables aléatoires gaussiennes.

Comme expliqué en section 2.2.3 le modèle à énergies aléatoires encoure une transition de phase statique à une température finie  $T_c$ , au dessous de laquelle le système se trouve dans une phase ordonnée à dynamique vitreuse avec énergie libre  $E_0(L)$  constante, qui est dominée par les niveaux d'énergie les plus bas.

Les propriétés dynamiques de la phase à basse température de ce modèle ont été étudiées par Koper et Hilhorst en [75] : on se base sur leurs résultats, qu'on rappelle par la suite, pour appliquer notre formalisme à ce système.

Grâce aux propriétés mathématiques de la statistique des extrêmes on a déterminé en section 2.2.3, en suivant [75], que la distribution des  $N$  niveaux d'énergie les plus bas

$$E_i = E_0(L) + \epsilon_i , \quad (5.20)$$

est donnée par :

$$p(\epsilon) = \begin{cases} \rho e^{\rho(\epsilon - \epsilon_c)}, & \epsilon \leq \epsilon_c , \\ 0, & \epsilon > \epsilon_c , \end{cases} \quad (5.21)$$

où  $\rho = T_c^{-1}$  est une constante et  $\epsilon_c$  est une énergie choisie de façon telle que on ait  $N$  niveaux d'énergie entre  $E_0(L)$  et  $E_0(L) + \epsilon_c$ . En particulier on va considérer, suivant [75], la limite pour  $N \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon_c \rightarrow \infty$  et  $Ne^{-\rho\epsilon_c} = v$  constant, qui est celle pour laquelle

les quantités physiques qui caractérisent le REM ont une valeur indépendante de la quantité  $N$  de niveaux choisis et de  $\epsilon_c$ .

La dynamique de ce modèle est définie par l'équation maîtresse :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j \neq i} W_{ij} P_j(t) - \sum_{j \neq i} W_{ji} P_i(t), \quad (5.22)$$

où les taux de transition  $W_{ji}$  pour aller du niveau  $i$  au niveau  $j$  prennent la forme (2.48) :

$$W_{ji} = B_j V_j V_i \quad \text{avec} \quad B_j = e^{-\beta \epsilon_j}, \quad (5.23)$$

où  $i = 1, \dots, N$  et les  $V_i$  sont des variables aléatoires positives. La distribution des  $B_i$  peut être dérivée de la distribution des énergies  $\epsilon_i$ , ce qui porte à :

$$p(B) = \begin{cases} \frac{v}{N} B^{-1-\mu}, & \text{pour } \left(\frac{v}{N}\right)^{1/\mu} < B, \\ 0, & \text{autrement} \end{cases} \quad (5.24)$$

où  $\mu = \rho/\beta = T/T_c$ ,  $\mu \in (0, 1)$ . Suivant [75] on va considérer des barrières  $V_i$  dépendantes du niveau d'énergie  $V_i = B_i^{-q}$  avec  $q \in (0, 1)$ .

On rappelle que dans cette phase les fonctions d'autocorrélation sont données en section 2.2.3 par l'équation (2.50), donc la dynamique du système a des propriétés vitreuses.

Dans la suite on applique le formalisme thermodynamique des histoires à ce modèle et on montre qu'une transition dynamique est à l'origine de cette dynamique vitreuse.

### 5.2.1 Transition dynamique

Pour établir l'existence d'une transition dynamique, on considère à nouveau la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  définie en équation (5.4), associée au nombre de changements de configuration  $K(t)$  entre le temps 0 et le temps  $t$ . À partir de l'équation maîtresse (5.22), on obtient l'équation d'évolution pour  $\tilde{P}_i(s, t)$ , défini en équation (3.44) :

$$\frac{d\tilde{P}_i(s, t)}{dt} = \sum_j \hat{W}_{ij}^K \tilde{P}_j(s, t) = e^{-s} B_i V_i \sum_{j \neq i} V_j \tilde{P}_j(s, t) - V_i \tilde{P}_i(s, t) \sum_{j \neq i} B_j V_j. \quad (5.25)$$

La fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  est la plus grande valeur propre de l'opérateur d'évolution  $\hat{W}^K$ . Les valeurs propres  $\lambda_j(s)$  de  $\hat{W}^K$  sont solutions de l'équation

$$f(\lambda_j(s)) = 1, \quad (5.26)$$

$$f(\lambda) = \sum_i \frac{e^{-s} B_i V_i^2}{\zeta V_i + (e^{-s} - 1) B_i V_i^2 + \lambda} \quad (5.27)$$

où  $\zeta = \sum_i B_i V_i$  et  $\psi_K(s) = \max_{1 \leq j \leq N} \{\lambda_j(s)\}$ .

On considère d'abord le cas  $q + \mu > 1$ . On remarque que  $f(\lambda)$  a  $N$  pôles simples sur l'axe réel négatif  $x_i = -(\zeta V_i + (e^{-s} - 1) B_i V_i^2) < 0$ , et décroît vers zéro quand  $\lambda \rightarrow \infty$ . On a aussi  $f(0) = 1$  pour  $s = 0$ , tandis que  $f(0) < 1$  pour  $s > 0$  et  $f(0) > 1$  si  $s < 0$ . Donc dans la phase active, à  $s < 0$ , il y a une seule valeur propre positive  $\lambda_j$  qui est identifiée à  $\psi_K(s) > 0$ . Comme fait précédemment pour le modèle de pièges dirigé, on suppose que  $\psi_K(s)$  est automoyennante dans la limite  $N \rightarrow \infty$  et coïncide avec sa moyenne. On obtient, pour  $s < 0$  :

$$\overline{\psi_K(s)} \sim N^{(2q+\mu-1)/\mu} \tilde{\psi}_K(s), \quad (5.28)$$

où  $\tilde{\psi}_K(s)$  est indépendante de  $N$  et solution de l'équation

$$\mu v \int_{v^{1/\mu}}^{\infty} \frac{B^{-\mu-2q}}{\tilde{v} B^{-q} + \tilde{\psi}_K(s)} dB = e^s, \quad (5.29)$$

avec  $\tilde{v} = \mu v^{(1-q)/\mu} / (q + \mu - 1) > 0$ . En faisant une analyse similaire à celle effectuée dans le modèle de pièges, on trouve aussi que les fluctuations de  $\psi_K(s)$  autour de sa moyenne  $\overline{\psi_K(s)}$  sont décrites par une distribution gaussienne comme en (5.11) de variance  $N^{-1/2}$ .

Cependant l'analyse dans la phase inactive est plus subtile. En effet vu la forme des singularités de  $f(\lambda)$  en  $x_i < 0$ , et le fait que  $f(0) < 1$  pour  $s > 0$ ,  $\psi_K(s)$  satisfait la contrainte

$$-\min_i (\zeta V_i + (e^{-s} - 1) B_i V_i^2) < \psi_K(s) < 0. \quad (5.30)$$

Si on ordonne les variables aléatoires  $B_i$  de façon telle que  $B_1 < B_2 < \dots < B_N$ , on voit que le maximum du membre gauche de l'inégalité (5.30) est atteint pour la valeur maximale  $B_N$ , dont la distribution est donnée dans la limite pour  $N \gg 1$  par :

$$p(B_N) = v \mu B_N^{-1-\mu} e^{-v B_N^{-\mu}}. \quad (5.31)$$

En utilisant la distribution (5.31) et la distribution des  $B_i$  en (2.49) on obtient que :

$$-c_1 N^{(q+\mu-1)/\mu} < \overline{\psi_K(s)} < 0, \quad (5.32)$$

où  $c_1 > 0$  est une constante indépendante de  $N$ . Pour trouver une limite supérieure à la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$ , on écrit l'équation (5.26) sous une forme différente :

$$\sum_i \frac{e^{-s} B_i V_i}{e^{-s} \zeta + (1 - e^{-s})(\zeta - B_i V_i + \lambda(s) V_i^{-1})} = 1.$$

Vu que le premier terme au dénominateur est la somme des numérateurs, les termes restants  $(1 - e^{-s})(\zeta - B_i V_i + \lambda(s) V_i^{-1})$  doivent être négatifs pour au moins un  $i$ . De cette façon on a une valeur qui limite supérieurement  $\psi_K(s)$  :

$$\psi_K(s) < (e^{-s} - 1) \min_i (\zeta V_i - B_i V_i^2). \quad (5.33)$$

À nouveau, le minimum de cette limite est atteint pour le niveau maximum  $B_N$ , donc on moyenne la partie gauche de l'inégalité (5.33) sur la distribution (5.31) et on a :

$$\overline{\psi_K(s)} < -c_2 N^{(q+\mu-1)/\mu}, \quad (5.34)$$

où  $0 < c_2 < c_1$  est une constante. En mettant ensemble la limite supérieur et inférieur (5.32, 5.34) on a pour  $s > 0$

$$-\overline{\psi_K(s)} = \mathcal{O}(N^{(q+\mu-1)/\mu}). \quad (5.35)$$

Donc en analysant le comportement de la plus grande valeur propre  $\overline{\psi_K(s)}$  dans les équations (5.28, 5.29, 5.35), on montre qu'une transition dynamique a lieu à  $s = 0$ . L'équation (5.29) montre que  $\tilde{\psi}_K(s) \propto (-s)^{q/(q+\mu-1)}$  pour  $s$  petit en indiquant que, comme dans le modèle de pièges à dynamique dirigée, l'ordre de cette transition dynamique est plus grand que un.

Ces prédictions analytiques pour  $q+\mu > 1$  en équation (5.28, 5.35) ont été confirmées en résolvant numériquement l'équation aux valeurs propres (5.26). La valeur moyenne de  $\overline{\psi_K(s)}$  a été évaluée en moyennant sur plus de  $10^6$  réalisations du désordre. Sur la figure 5.3, on montre le tracé de  $N^{-(\mu+2q-1)/\mu} \overline{\psi_K(s)}$  en fonction de  $s$ . En accord avec les équations (5.28, 5.35), on observe une transition dynamique à  $s = 0$ . De plus on a vérifié que pour  $s > 0$  la fonction de grandes déviations se comporte comme prédit dans l'équation (5.35), *i.e.*  $-\overline{\psi_K(s)} = \mathcal{O}(N^{(q+\mu-1)/\mu})$ . La présence de cette transition

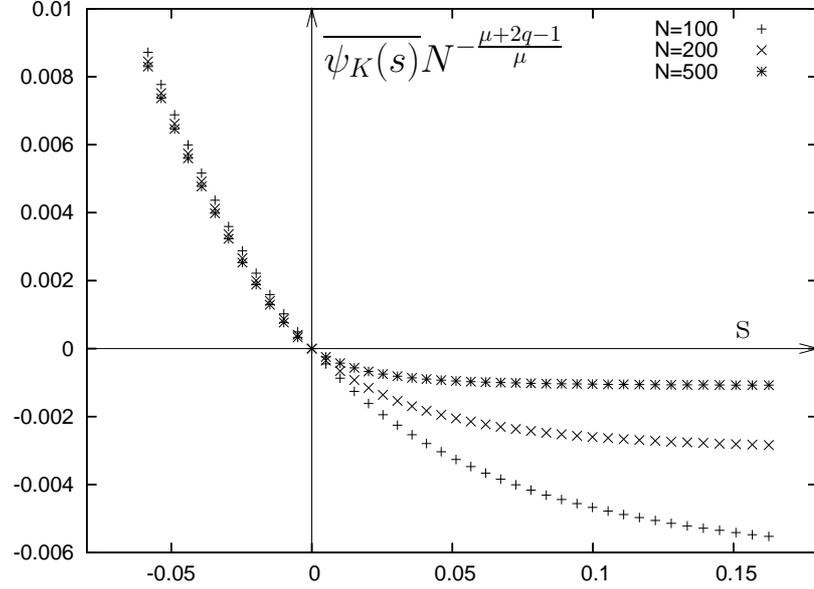


FIG. 5.3 – Évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  pour  $q = 0.9$  et  $\mu = 0.8$  ( $q + \mu > 1$ ) dans le modèle à énergies aléatoires.

est en accord avec la dynamique dans l'état physique à  $s = 0$  de ce système ; comme on l'a vu en section 2.2.3 la fonction de corrélation à l'équilibre décroît en fonction de temps selon :

$$\overline{C(t)} \propto t^{-2\mu/q} \quad \text{pour } q + \mu > 1. \quad (5.36)$$

On a vérifié numériquement que la transition est aussi présente quand  $q + \mu < 1$ , où la fonction de corrélation à l'équilibre possède une décroissance non-exponentielle donnée en (2.50) :

$$\begin{aligned} \overline{C(t)} &\propto t^{-\eta} e^{-Dt^\gamma} \quad \text{pour } q + \mu < 1 \text{ et } q < \frac{1}{2}, \\ \overline{C(t)} &\propto t^{-2\mu/(2q-1)} \quad \text{pour } q + \mu < 1 \text{ et } q > \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5.37)$$

où  $D$  est une constante,  $\gamma = \mu/(1-2q+\mu q/(1-q))$  et  $\eta = (2\mu/(1-q)-1)\gamma$ . Sur la figure 5.4, on montre le tracé de  $N^{-1/2}\overline{\psi_K(s)}$  en fonction de  $s$  pour  $q = 0.45$  et  $\mu = 0.45$ , où la fonction de corrélation suit une exponentielle étirée. Nos données montrent clairement une transition de phase dynamique en  $s = 0$ . De même, sur la figure 5.5, on montre

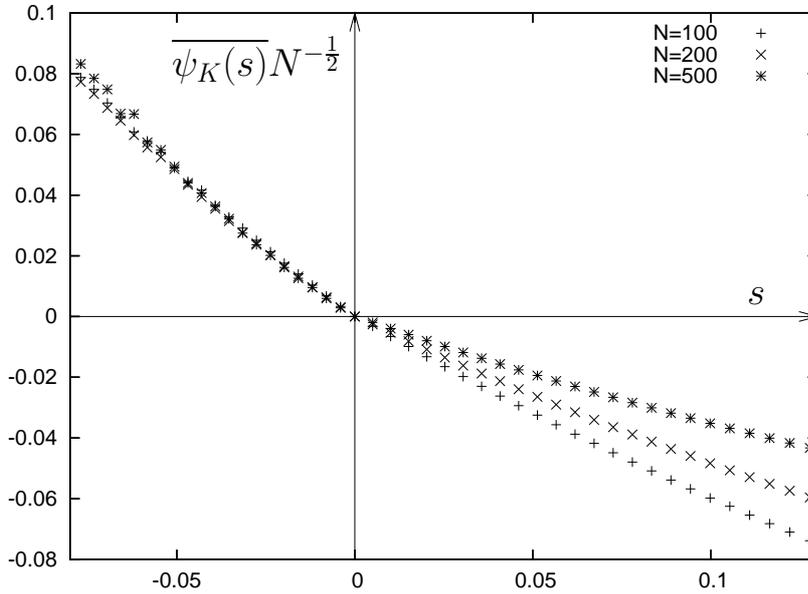


FIG. 5.4 – Évaluation numérique de la fonction de grandes déviations pour  $q = 0,45$  et  $\mu = 0,45$  ( $q + \mu < 1$  et  $q < 1/2$ ). Dans la phase active  $\overline{\psi_K(s)}$  se trouve être proportionnelle à  $N^{1/2}$ , et à  $N^{1/2-\alpha}$  avec  $\alpha > 0$  dans la phase inactive.

l'évaluation de  $\overline{\psi_K(s)} N^{-2(q-\mu)/\mu}$  en fonction de  $s$  pour  $q = 0,6$  et  $\mu = 0,35$ , où la fonction de corrélation décroît en loi de puissance. Là aussi nos résultats numériques prouvent l'existence d'une transition de phase dynamique en  $s = 0$ . Ces résultats ont été obtenus en moyennant sur plus de  $10^6$  réalisations du désordre.

Donc dans les trois cas on trouve un comportement anormal de la fonction de corrélation et une discontinuité dans les dérivées de la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$  à  $s = 0$  (voir figures 5.3, 5.4 et 5.5).

### 5.3 Relation avec la statistique des extrêmes

Le comportement vitreux des systèmes désordonnés se manifeste dans la phase à basse température où dans la limite de grands temps. Par exemple, dans le modèle de pièges, pour avoir une diffusion anormale et propriétés vitreuses on doit prendre un temps d'attente suivant une loi de Lévy pour que sa moyenne soit infinie. Également la

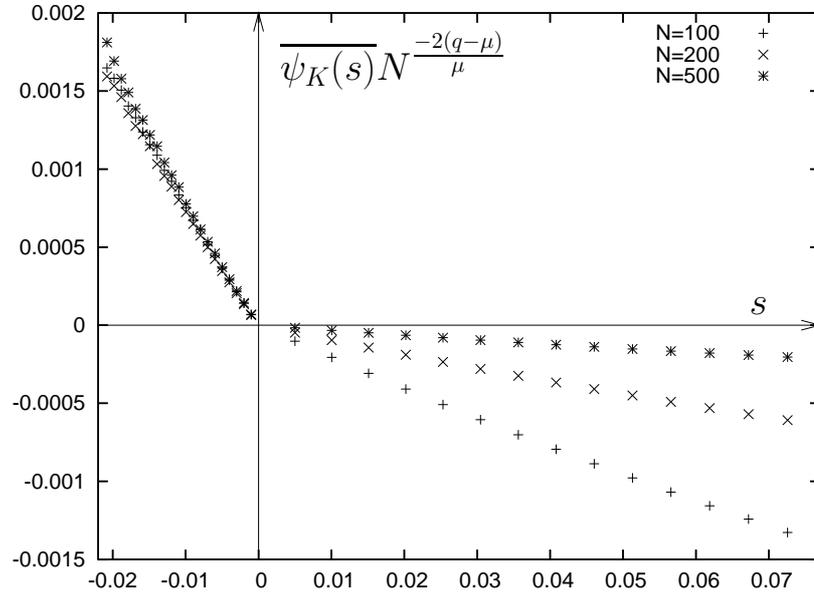


FIG. 5.5 – Évaluation numérique de la fonction de grandes déviations pour  $q = 0.6$  et  $\mu = 0.35$  ( $q + \mu < 1$  et  $q > 1/2$ ). On voit que  $\psi_K(s)$  est proportionnelle à  $N^{2(q-\mu)/\mu}$  dans la phase active et à  $N^{2(q-\mu)/\mu-\alpha'}$  avec  $\alpha' > 0$  dans la phase inactive de la dynamique.

distribution (5.24) des énergies aléatoires dans la phase à basse température du REM détermine les propriétés vitreuses du système. On remarque que la distribution des temps d'attente et des énergies aléatoires appartient à la même classe d'universalité dite de Gumbel, à laquelle appartiennent les distributions de probabilité du minimum de variables aléatoires définies sur tout l'axe réel et qui décroissent plus rapidement que toute loi de puissance à  $-\infty$ .

Il a été remarqué en [17] et [23] que la classe d'universalité de Gumbel correspond exactement aux modèles de verres où la solution à la méthode des répliques fonctionne avec un pas de brisure de symétrie des répliques. Il a aussi été élucidé que pour la classe de Weibull, la statistique des extrêmes pour des variables à domaine limité, et la classe de Fréchet pour des variables décroissant en loi de puissance, la méthode des répliques ne peut être utilisée sans y apporter des modifications substantielles [17],[23].

Pour savoir si la statistique des extrêmes des variables aléatoires influence les propriétés vitreuses du modèle désordonné en question, on a considéré deux versions du

modèle à énergies aléatoires dans la phase à basse température. On change la statistique des  $N$  niveaux d'énergie les plus bas en modifiant directement la distribution des facteurs de Boltzmann (2.48)  $B_j = e^{-\beta\epsilon_j}$  : plus précisément on considère des facteurs de Boltzmann distribués selon une loi exponentielle et selon une distribution uniforme. On trouve une transition de phase dynamique dans le premier cas mais pas dans le deuxième. Ces résultats sont appuyés par l'étude des fonctions d'autocorrélation à l'équilibre dans les deux cas.

### 5.3.1 Modèle à facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement

On considère une dynamique entre  $N$  niveaux d'énergie indépendants gouvernée par l'équation maîtresse :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{j \neq i} W_{ij} P_j(t) - \sum_{j \neq i} W_{ji} P_i(t) \quad (5.38)$$

où les taux de transition  $W_{ji} = B_j V_i V_j$  sont donnés par l'équation (2.48) avec  $V_i = N^{-p} B_i^{-q}$ ,  $p \geq 0$  et  $q \in (0, 1)$ . La distribution des facteurs de Boltzmann est choisie de la forme

$$p(B_i) = p(e^{-\beta\epsilon_i}) = \theta(B_i) e^{-B_i} . \quad (5.39)$$

Avec cette distribution, au contraire de la (5.24), tous les cumulants des facteurs de Boltzmann restent finis. La fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  est à nouveau la solution la plus grande de l'équation aux valeurs propres

$$\sum_i \frac{e^{-s} B_i V_i^2}{\zeta V_i + (e^{-s} - 1) B_i V_i^2 + \psi_K(s)} = 1 . \quad (5.40)$$

On résout numériquement l'équation (5.40) en moyennant la solution sur  $10^7$  réalisations du désordre. Le résultat est présenté sur la figure 5.6.

### 5.3.2 Modèle à facteurs de Boltzmann distribués uniformément

On considère des facteurs de Boltzmann distribués uniformément selon :

$$p(B_i) = N\theta\left(B_i - \frac{a}{N}\right)\theta\left(\frac{a+1}{N} - B_i\right) , \quad (5.41)$$

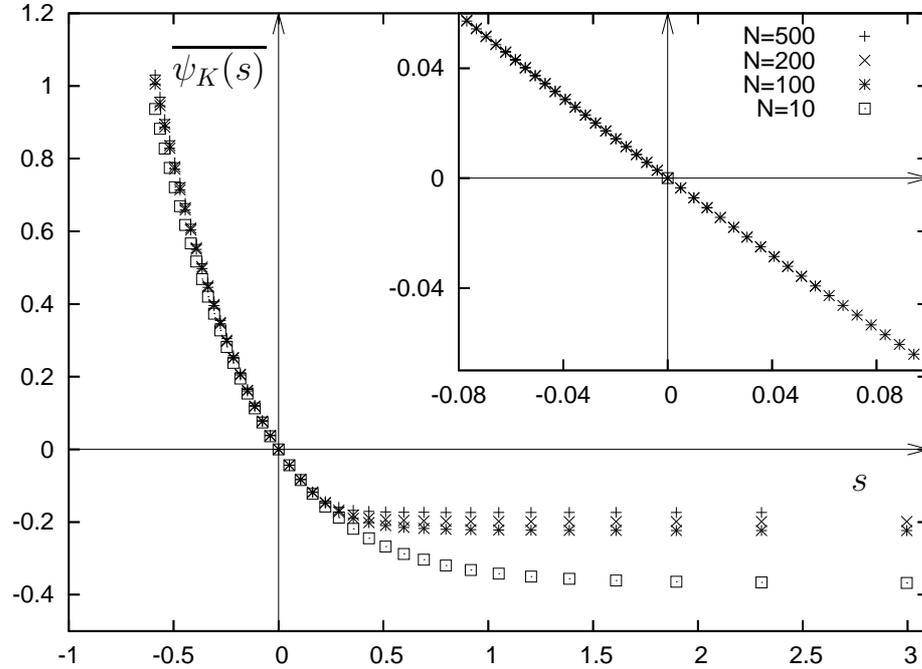


FIG. 5.6 – Évaluation numérique de la fonction de grandes déviations  $\overline{\psi_K(s)}$  pour des facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement, avec  $p = q = 0,9$ . Encart : évaluation numérique de  $\overline{\psi_K(s)}$  pour des facteurs de Boltzmann distribués uniformément, avec  $a = 1$ .

où  $a$  est une constante finie telle que  $0 \notin [a, a + 1]$ . Si on permet aux  $B_i$  de prendre la valeur  $B = 0$ , après un certain temps, vu la forme des taux de transition (2.48), le système sera gelé dans un seul niveau d'énergie.

En évaluant numériquement la fonction de grandes déviations de ce système on trouve une indépendance complète de  $\overline{\psi_K(s)}$  en la taille du système pour tout  $s$ , comme le montrent les données tracées dans l'encart de la figure 5.6, et on s'attend à n'observer aucun trait de la phénoménologie vitreuse dans ce système.

Pour vérifier ces prédictions on calcule par la suite les fonctions d'autocorrélation à l'équilibre pour le système avec des facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement et pour des facteurs distribués uniformément.

### 5.3.3 Fonctions de corrélation

Pour calculer les fonctions d'autocorrélation du modèle à énergies aléatoires à l'équilibre on suit une procédure identique à celle mise au point en [75] pour étudier les propriétés de relaxation du REM, qui a donné les fonctions d'autocorrélation (2.50).

Dans ce qui suit on récrit donc le calcul fait par Koper et Hilhorst [75] pour arriver à l'expression (5.51) pour la fonction d'autocorrélation en termes des facteurs  $B_i$ , puis on déduit de cette expression le comportement de la fonction d'autocorrélation aux temps longs dans le cas où ces facteurs soient distribués exponentiellement et uniformément.

L'équation maîtresse (5.22) avec des taux de transition (2.48) s'écrit :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = V_i B_i \sum_{j=1}^N V_j P_j(t) - V_i P_i(t) \zeta . \quad (5.42)$$

La probabilité de trouver le système dans le niveau  $i$  au temps  $t$  s'il était en  $j$  au temps  $t = 0$ , *i.e.* la fonction de Green, peut être écrite en termes des valeurs propres et des vecteurs propres de l'équation maîtresse. On appelle  $\phi_i^\lambda$  la composante  $i$  du vecteur propre de droite qui a comme valeur propre  $-\lambda$  :

$$\frac{d\phi_i^\lambda}{dt} = -\lambda \phi_i^\lambda . \quad (5.43)$$

En utilisant l'équation (5.42) on peut écrire :

$$\phi_i^\lambda = \frac{V_i B_i}{V_i \zeta - \lambda} \sum_{j=1}^N V_j \phi_j^\lambda , \quad (5.44)$$

d'où encore, en multipliant par  $V_i$  et en sommant sur  $i$  :

$$\sum_{i=1}^N \frac{V_i^2 B_i}{V_i \zeta - \lambda} = 1 \quad \text{si} \quad \sum_{j=1}^N V_j \phi_j^\lambda \neq 0 . \quad (5.45)$$

La condition de bilan détaillé implique que le vecteur propre de gauche soit  $\psi_i^\lambda = \phi_i^\lambda / B_i$ , de sorte que la fonction de Green prend la forme :

$$\begin{aligned} G_{ij}(t) &= \sum_{l=1}^N e^{-\lambda_l t} \frac{\phi_i^{\lambda_l} \psi_j^{\lambda_l}}{\sum_{k=1}^N \phi_k^{\lambda_l} \psi_k^{\lambda_l}} \\ &= \sum_{l=1}^N e^{-\lambda_l t} \frac{\frac{V_i B_i}{V_i \zeta - \lambda_l} \frac{V_j}{V_j \zeta - \lambda_l}}{\sum_{k=1}^N \frac{V_k^2 B_k}{(V_k \zeta - \lambda_l)^2}} . \end{aligned} \quad (5.46)$$

La fonction d'autocorrélation à l'équilibre exprimée en termes de ces fonctions de Green est :

$$C(t) \equiv \sum_{j=1}^N \{G_{jj}(t) - G_{jj}(\infty)\} P_j^{\text{eq}}, \quad (5.47)$$

où  $P_j^{\text{eq}} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_j(t) \propto B_j$ .

Pour éliminer la dépendance de la fonction d'autocorrélation  $C(t)$  en (5.47) des valeurs propres inconnues  $\lambda_l$  on considère sa transformée de Laplace  $\tilde{C}(s)$  qui, en utilisant l'équation (5.46), peut être écrite comme :

$$\tilde{C}(s) = \frac{1}{Z} \sum_{l=2}^N \frac{H(\lambda_l)}{(s + \lambda_l)F'(\lambda_l)} \quad (5.48)$$

où  $Z = \sum_{i=1}^N B_i$  et où

$$H(z) = \sum_{j=1}^N \frac{V_j^2 B_j^2}{(V_j \zeta - z)^2}, \quad F(z) = \sum_{j=1}^N \frac{V_j^2 B_j}{V_j \zeta - z} - 1. \quad (5.49)$$

On introduit  $g(z) = H(z)/((s+z)F(z))$ , qui a des pôles en  $z = -s$ , en  $z = V_j \zeta$  et dans les zéros de  $F(z)$ . On remarque à partir de l'équation (5.49) que la condition  $F(z) = 0$  est équivalente à l'équation aux valeurs propres (5.45), et que donc que la somme des résidus de  $g(z)$  dans les zéros de  $F(z)$ , à l'exception de  $z = 0$ , est exactement  $\tilde{C}(s)$ . Donc, vu que l'intégrale de contour de  $g(z)$  sur un cercle centré dans l'origine avec un rayon  $R$  s'annule quand  $R \rightarrow \infty$ , on trouve :

$$\tilde{C}(s) = -\frac{1}{s} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^N \sum_{k \neq j}^N \frac{V_j B_j V_k B_k}{(V_j \zeta + s)(V_k \zeta + s)}}{Z \sum_{l=1}^N \frac{V_l B_l}{V_l \zeta + s}} + \frac{1}{Z^2} \sum_{j=1}^N B_j^2 - 1 \right\}, \quad (5.50)$$

d'où on voit que  $\tilde{C}(s)$  a des pôles seulement sur l'axe réel négatif ( $s = 0$  n'est pas un pôle). En appliquant la transformée de Laplace inverse et en changeant la variable  $s$  en  $-s\zeta$  on obtient une expression sur la fonction d'autocorrélation  $C(t)$  :

$$C(t) = - \oint \frac{ds}{2\pi i} \frac{e^{-st\zeta} \sum_{j=1}^N \sum_{k \neq j}^N \frac{V_j B_j V_k B_k}{(s - V_j \zeta)(s - V_k \zeta)}}{sZ \sum_{l=1}^N \frac{V_l B_l}{s - V_l \zeta}} \quad (5.51)$$

avec  $Z = \sum_{i=1}^N B_i$  et où l'intégrale de contour est pris sur un contour orienté en sens antihoraire qui entoure tous les pôles sur l'axe positif. Si on moyenne cette expression,

comme fait en [75], sur une distribution de Lévy, on trouve le comportement asymptotique (2.50) qui caractérise la dynamique vitreuse du REM.

On moyenne dans la suite l'équation (5.51) sur une distribution exponentielle.

### Distribution exponentielle

On considère une distribution des facteurs de Boltzmann de la forme :

$$p(B) = N\theta(B)e^{-NB}, \quad (5.52)$$

et des taux de transition

$$W_{ij} = N^{-2q}B_i^{1-q}B_j^{-q}, \quad (5.53)$$

où la dépendance en  $N$  est choisie pour donner une limite thermodynamique bien définie de la fonction d'autocorrélation. En utilisant pour le dénominateur dans l'équation (5.51) la représentation intégrale  $\alpha^{-1} = \int_0^\infty d\lambda e^{-\alpha\lambda}$ , on obtient de l'équation (5.51) l'expression pour la fonction d'autocorrélation moyennée :

$$\begin{aligned} \overline{C}(t) = & \lim_{N \rightarrow \infty} N^4 \int_0^\infty dB_i \int_0^\infty dB_j \int_0^\infty d\lambda \int_0^\infty d\mu \oint \frac{ds}{2\pi i} \frac{B_i B_j}{s(sB_i^q - 1)(sB_j^q - 1)} \\ & \times e^{-N(B_i+B_j) - \lambda(B_i+B_j) - \mu(\frac{B_i}{sB_i^q-1} + \frac{B_j}{sB_j^q-1}) - stN^{-2q}(B_i^{1-q} + B_j^{1-q})} \times I_N^{N-2} \end{aligned} \quad (5.54)$$

où l'intégrale  $I_N$  est donnée par :

$$I_N = N \int_0^\infty dB e^{-NB - \lambda B - \mu \frac{B}{sB^q-1} - stN^{-2q}B^{1-q}}.$$

On change d'échelle en introduisant des variables  $B' = BN$  et on intègre par parties ; cela donne à l'ordre dominant en  $N$  :

$$I_N \simeq 1 - \frac{1}{N} \int_0^\infty dB e^{-B} (\lambda - \mu + stN^{-q}(1-q)B^{-q}) \quad (5.55)$$

Donc en utilisant ce développement pour  $N$  grand (5.55) dans la formulation (5.54), et en intégrant sur  $\lambda$  et  $\mu$  on a :

$$\begin{aligned} \overline{C}(t) = & \lim_{N \rightarrow \infty} N^4 \int_0^\infty dB_i \int_0^\infty dB_j \oint \frac{ds}{2\pi i} \frac{B_i B_j}{s(B_i + B_j + 1)} \\ & \times \frac{e^{-N(B_i+B_j) - stN^{-2q}(B_i^{1-q} + B_j^{1-q} + N^q\Gamma(2-q))}}{s(B_i^q B_j + B_i B_j^q) - B_i - B_j - (sB_i^q - 1)(sB_j^q - 1)} \end{aligned} \quad (5.56)$$

En changeant encore de variables selon  $NB_i = x$ ,  $NB_j = y$ , et en ne gardant que les ordres dominants en  $N$  on a :

$$\overline{C}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^4 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \oint \frac{ds}{2\pi i} xy \frac{e^{-(x+y)-stN^{-q}\Gamma(2-q)}}{s(sN^{-q}(x^q + y^q) - 1)}, \quad (5.57)$$

qui a un pôle en  $s = N^q/(x^q + y^q)$ . L'intégration sur le plan complexe donne donc :

$$\overline{C}(t) = \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy xy e^{-(x+y)} e^{-t \frac{\Gamma(2-q)}{x^q + y^q}}. \quad (5.58)$$

Enfin on change de variables selon  $x = x't^{1/(q+1)}$ ,  $y = y't^{1/(q+1)}$  et trouve l'expression suivante pour la fonction d'autocorrélation :

$$\overline{C}(t) = t^{\frac{4}{q+1}} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy xy e^{-t^{\frac{1}{q+1}} \tilde{g}(x,y)}, \quad (5.59)$$

où  $\tilde{g}(x,y) = x + y + \Gamma(2-q)/(x^q + y^q)$ .

On voit facilement que  $\tilde{g}(x,y)$  a un seul minimum sur  $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$  pour  $x^* = y^* = (q\Gamma(2-q)/4)^{1/(q+1)}$  et  $\partial_x^2 g(x^*, y^*) = \partial_y^2 g(x^*, y^*) = x^{*-1}$ .

Donc le comportement asymptotique de  $\overline{C}(t)$  est donné en l'évaluant à travers la méthode du col, ce qui donne :

$$\overline{C}(t) \sim 2\pi t^{\frac{3}{q+1}} x^{*3} e^{-t^{\frac{1}{q+1}} \tilde{g}(x^*, y^*)} \quad \text{for } t \gg 1 \quad (5.60)$$

qui montre, vu que  $q > 0$ , que la relaxation du système avec des facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement se fait de façon plus lente qu'une exponentielle.

### Distribution uniforme

On considère maintenant des facteurs de Boltzmann distribués uniformément selon :

$$p(B) = N\theta(B - \frac{a}{N})\theta(\frac{a+1}{N} - B), \quad (5.61)$$

où  $a$  est une constante positive. La moyenne de la fonction de corrélation (5.51) prend la forme :

$$\begin{aligned} \overline{C}(t) = & \lim_{N \rightarrow \infty} N^4 \int_{\frac{a}{N}}^{\frac{a+1}{N}} dB_i \int_{\frac{a}{N}}^{\frac{a+1}{N}} dB_j \int_0^\infty d\lambda \int_0^\infty d\mu \oint \frac{ds}{2\pi i} \frac{B_i B_j}{s(sB_i^q - 1)(sB_j^q - 1)} \\ & \times e^{-\lambda(B_i + B_j) - \mu(\frac{B_i}{sB_i^q - 1} + \frac{B_j}{sB_j^q - 1}) - stN^{-2p}(B_i^{1-q} + B_j^{1-q})} J_N^{N-2}, \end{aligned} \quad (5.62)$$

où

$$J_N = \int_{\frac{a}{N}}^{\frac{a+1}{N}} dB N e^{-\lambda B - \mu \frac{B}{sB^q - 1} - stN^{-2p} B^{1-q}} . \quad (5.63)$$

Puisque l'intervalle d'intégration est très petit quand  $N \gg 1$ , on peut considérer l'intégrand comme constant sur cet intervalle et faire l'approximation :

$$J_N \simeq \exp(-\lambda a N^{-1} + \mu a N^{-1} - stN^{-2p-(1-q)} a^{1-q}) , \quad (5.64)$$

d'où, après avoir intégré sur  $\lambda$  et  $\mu$  et avoir changé de variables selon  $x = NB_i$  et  $y = NB_j$ , la fonction d'autocorrélation devient :

$$\overline{C}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^{a+1} dx \int_a^{a+1} dy \oint \frac{ds}{2\pi i} x y \frac{e^{-stN^{-2p+q} a^{1-q}}}{sa^2 (sN^{-q}(x^q + y^q) - 1)} . \quad (5.65)$$

L'intégrand a un pôle en  $s = N^q/(x^q + y^q)$  donc on peut intégrer sur le plan complexe et, en choisissant  $p = q$ , on obtient :

$$\overline{C}(t) = \int_a^{a+1} dx \int_a^{a+1} dy \frac{xy}{a^2} e^{-t \frac{a^{1-q}}{x^q + y^q}} . \quad (5.66)$$

Le minimum de l'intégrand est atteint pour  $x = y = a$  et le maximum pour  $x = y = a+1$ , donc l'intégrale est limitée supérieurement et inférieurement par une exponentielle décroissante et on déduit :

$$\overline{C}(t) \sim e^{-tc(a)} , \quad (5.67)$$

où  $c(a)$  est une fonction positive de  $a$ . L'équation (5.67) décrit bien le comportement asymptotique de la fonction d'autocorrélation d'un système non-vitreux.

## 5.4 Conclusion

Les résultats obtenus sur le modèle de pièges et sur le modèle à énergies aléatoires sont en accord complet avec les résultats obtenus sur les modèles cinétiquement contraints, décrits dans le chapitre précédent.

En effet l'affirmation principale contenue dans ces deux travaux est que lorsqu'un système présente des propriétés vitreuses (ralentissement anormal de la dynamique, forme non-exponentielle des fonctions d'autocorrélation, dépendance anormale de la viscosité en température etc.) il apparaît hétérogène en espace et en temps, et une

transition de phase dynamique dans l'espace des réalisations temporelles, ou histoires, que le système peut suivre dans l'espace des configurations doit avoir lieu. En effet on trouve pour ces deux modèles désordonnés, ainsi que pour les modèles cinétiquement contraints décrits dans la chapitre 5, qu'une transition dynamique de premier ordre a lieu en  $s = 0$ .

De plus, dans le modèle à énergies aléatoires l'influence de la statistique suivie par le désordre sur l'hétérogénéité spatio-temporelle du système a été étudiée. En effet on trouve une transition de phase dynamique pour le REM avec des facteurs de Boltzmann distribués exponentiellement et on a montré que la dynamique est dans ce cas bien vitreuse en calculant les fonctions d'autocorrélation à l'équilibre et en montrant qu'elles décroissent de façon non-exponentielle en fonction du temps pour des temps longs. Pour finir on a considéré un modèle à énergies aléatoires avec des facteurs de Boltzmann à distribution uniforme et on a montré qu'aucune transition dynamique n'a lieu, en accord avec le fait que la fonction d'autocorrélation à l'équilibre est une exponentielle décroissante en temps.



# Chapitre 6

## Modèle à $p$ spins avec $p = 2$

Ce chapitre contient la partie du travail effectué durant la thèse qui consiste en l'application de la thermodynamique des histoires à un modèle à  $p$ -spins avec  $p = 2$ . Ce travail a été effectué en collaboration avec Frédéric van Wijland et Robert Jack, et fait l'objet de la publication [111].

Pour les raisons mentionnées dans la section 2.2.1 du chapitre 2, on considère la version suivante en champ moyen du modèle à  $p$ -spins *mous*, qui a comme hamiltonien :

$$\beta\mathcal{H} = -\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{u}{N} \sum_{i,j} \sigma_i^2 \sigma_j^2, \quad (6.1)$$

avec

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2}}. \quad (6.2)$$

Suivant [76, 33], on effectue un changement de base qui diagonalise la matrice des couplages  $J_{ij}$ . Les valeurs propres  $\{J_\mu\}_{\mu=1,\dots,N}$  de cette matrice  $N \times N$   $(J_{ij})_{i,j=1,\dots,N}$  sont distribuées, pour  $N \rightarrow \infty$ , selon la loi du demi-cercle de Wigner,

$$\rho(J_\mu) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{4 - J_\mu^2}. \quad (6.3)$$

On indique dorénavant les coordonnées des spins dans la base dans laquelle la matrice  $J_{ij}$  est diagonale par  $\phi_\mu$ , en termes desquelles l'hamiltonien s'écrit :

$$\beta\mathcal{H} = -\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu} J_{\mu} \phi_{\mu}^2 + \frac{u}{N} \left( \sum_{\mu} \phi_{\mu}^2 \right)^2. \quad (6.4)$$

Dans la section 6.1 on applique le formalisme thermodynamique des histoires à ce modèle en utilisant les techniques de De Dominicis et al. [34]; en particulier on donne l'expression de la fonction de grandes déviations et de la moyenne de la susceptibilité dans l'état- $s$ . Dans la section 6.2 on construit le diagramme des phases dynamiques de ce système : on montre d'abord que le système présente une transition de phase statique à une température  $T = T_c$ , puis que dans la phase ordonnée à  $T < T_c$  une transition de phase dynamique à  $s = 0$  a lieu dans l'espace des histoires suivies par le système. Dans la section 6.3 on montre comment, en utilisant une formulation alternative en termes d'intégrales de chemins empruntée à la mécanique quantique, on arrive aux mêmes résultats pour la susceptibilité dans l'état- $s$  du système.

## 6.1 Application du formalisme thermodynamique des histoires

Pour appliquer la thermodynamique des histoires à un modèle de spins continus il faut procéder différemment par rapport aux modèles vus dans les chapitres précédents dont la dynamique consistait dans des sauts entre un nombre fini de configurations. Dans le présent modèle les spins évoluent continûment et on ne peut, par exemple, pas définir l'activité d'une histoire comme la somme des changements de configurations.

Ce qu'on peut dire est qu'une histoire inactive correspond à une évolution qui porte les spins dans un état localement ordonné, où ils restent bloqués sur une valeur positive ou négative. Une histoire active va par contre correspondre à un changement fréquent de l'orientation des spins et à une succession d'états désordonnés.

On peut donc définir, en accord avec cette constatation, l'activité d'une histoire de la façon suivante :

$$K(t) = -\frac{1}{2} \sum_j \int_0^t dt \sigma_j^2(t) = -\frac{1}{2} \sum_\mu \int_0^t dt \phi_\mu^2(t). \quad (6.5)$$

Les histoires à dynamique rapide ont une activité et donc une aimantation proche de zéro, tandis que les histoires inactives ont une aimantation différente de zéro et une activité négative. Cette observable est bien extensive en temps, et sera le poids statistique dans nos moyennes dans les états- $s$ .

Pour établir l'existence d'une transition dynamique dans ce modèle on va utiliser comme paramètre d'ordre dans l'espace des histoires la susceptibilité dans l'état- $s$  stationnaire :

$$\chi(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}^2 \rangle_s \quad (6.6)$$

On appelle cette quantité susceptibilité par analogie avec la susceptibilité statique définie, pour un système de  $N$  spins à température inverse  $\beta$ , de la façon suivante :

$$\chi_{\text{statique}} = \frac{\beta}{N} \left( \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \sum_{i,j} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \right) . \quad (6.7)$$

Cette quantité est proportionnelle à la dérivée de l'aimantation du système par rapport au champ extérieur, ou aussi à la dérivée seconde par rapport au même champ de l'énergie libre statique. Dans notre modèle les variables de spin, exprimées dans la base qui rend la matrice de couplage diagonale, sont découplées donc la susceptibilité statique est donnée par l'expression (6.6) évaluée en  $s = 0$ . En effet c'est en évaluant cette quantité en  $s = 0$  qu'on montre dans la section 6.2.1 qu'une transition de phase statique a lieu pour ce modèle à une température  $T = T_c$  entre une phase désordonnée (qu'on appelle paramagnétique) et une phase ordonnée. À  $s \neq 0$ , dans la dynamique biaisée, la susceptibilité (6.6) est proportionnelle à la moyenne de l'activité donnée en (6.5), en effet pour  $t \gg 1$  on a :

$$\langle K \rangle_s \simeq -\frac{1}{2}t \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}^2 \rangle_s = -\frac{1}{2}tN\chi(s) . \quad (6.8)$$

Le calcul de  $\chi(s)$  va donc permettre de prouver que dans la phase à ordonnée à  $T < T_c$  une transition dynamique dans l'espace des histoires a lieu à  $s = 0$ . En effet une telle transition sera caractérisée par une discontinuité de la dérivée de l'énergie libre dynamique  $\psi_K(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \ln Z(s, t)/t$ , et donc par une discontinuité de la susceptibilité puisque :

$$\langle K \rangle = \frac{\langle K e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle} \Big|_{s=0} \simeq -t \frac{d}{ds} \psi_K(s) \Big|_{s=0} . \quad (6.9)$$

Pour calculer des moyennes dans un état- $s$  on a besoin de la fonction de partition dynamique :

$$Z(s, t) = \langle e^{-sK} \rangle . \quad (6.10)$$

Cette moyenne peut être effectuée de plusieurs façons. Dans la section 6.1.1 on exprime la moyenne sur les histoires en termes d'une intégrale fonctionnelle, et on calcule la fonction de grandes déviations. Dans la section 6.3 on moyenne en passant par l'évolution d'états quantiques à travers un opérateur hermitien, et les résultats évidemment coïncident.

### 6.1.1 Formulation en termes d'intégrales fonctionnelles

Pour utiliser les techniques de De Dominicis et al. on pourvoit les spins d'une dynamique de relaxation donnée par l'équation de Langevin :

$$\partial_t \sigma_i = -\frac{\delta \beta \mathcal{H}}{\delta \sigma_i(t)} + \eta_i(t) \quad (6.11)$$

où les  $\eta_i$  sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes de moyenne nulle et variance 2. On effectue le changement de base qui diagonalise la matrice des couplages  $J_{ij}$ , et on récrit l'équation de Langevin en termes des variables  $\phi_\mu$  :

$$\partial_t \phi_\mu = J_\mu \phi_\mu + 4u \phi_\mu \frac{1}{N} \sum_\nu \phi_\nu^2 + \eta_\mu(t) \quad (6.12)$$

où  $\eta_\mu$  est de nouveau un bruit blanc gaussien de moyenne nulle et variance 2.

La distribution de probabilité des histoires suivies par le système est donnée, dans cette formulation, en termes de l'équation de Langevin (6.12) :

$$P(\text{histoire}) = \prod_{\mu,t} P(\phi_\mu(t), t) = \overline{\prod_{\mu,t} \langle \delta(\partial_t \phi_\mu - J_\mu \phi_\mu + 4u \phi_\mu \frac{1}{N} \sum_\nu \phi_\nu^2 + \eta_\mu(t)) \rangle}, \quad (6.13)$$

où la probabilité d'une histoire est exprimée comme la probabilité conjointe d'avoir à chaque instant et sur chaque site une valeur des spins  $\phi_\mu$  qui satisfait l'équation de Langevin, moyennée sur toutes les réalisations du bruit possibles. Le produit sur les temps suppose une discrétisation  $t = n\tau$  et une limite pour  $\tau \rightarrow 0$ .

Au coeur de la formulation de De Dominicis [34] se trouve la représentation en termes d'une intégrale fonctionnelle de la fonction  $\delta$  :

$$P(\phi_\mu(t), t) = \int d\bar{\phi}_\mu(t) d\eta_\mu(t) e^{-\int_0^t dt' \bar{\phi}_\mu(\partial_t \phi_\mu - J_\mu \phi_\mu + 4u \phi_\mu \frac{1}{N} \sum_\nu \phi_\nu^2 + \eta_\mu(t))} e^{-\int_0^t dt' \frac{\eta_\mu^2}{4}} \quad (6.14)$$

La fonction de partition dynamique (6.10) devient donc :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \exp\left(- \int dt \sum_{\mu} (\bar{\phi}_{\mu}(\partial_t \phi_{\mu} - \beta J_{\mu} \phi_{\mu} + \frac{4u}{N} \sum_{\nu} \phi_{\nu}^2 \phi_{\mu} - \bar{\phi}_{\mu})) - \frac{s}{2} \phi_{\mu}^2\right). \quad (6.15)$$

On introduit dans l'exposant la susceptibilité fluctuante, non moyennée

$$X(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \phi_{\mu}^2(t), \quad (6.16)$$

et une susceptibilité complexe (6.5) :

$$\bar{X}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \bar{\phi}_{\mu}(t) \phi_{\mu}(t). \quad (6.17)$$

On remarque que  $X$  et  $\bar{X}$  sont des quantités automoyennantes dans la limite  $N \rightarrow \infty$ . En termes de ces quantités la fonction de partition devient :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \exp\left(- \int dt \sum_{\mu} (\bar{\phi}_{\mu}(\partial_t \phi_{\mu} - \beta J_{\mu} \phi_{\mu} + 4uX - \bar{\phi}_{\mu}) - (\frac{s}{2} - 4u\bar{X}) \phi_{\mu}^2)\right) \quad (6.18)$$

L'intégrale fonctionnelle de l'équation (6.18) peut être évaluée en imposant pour  $X$  et  $\bar{X}$  d'être des constantes par rapport aux champs, c'est-à-dire en introduisant une fonction delta de Dirac dans sa représentation fonctionnelle, puis en intégrant sur toutes les constantes. La contrainte est donc introduite à travers des multiplicateurs de Lagrange  $\lambda, \bar{\lambda}$ . La fonction de partition (6.18) devient :

$$Z = \int \mathcal{D}X \mathcal{D}\bar{X} \frac{N\mathcal{D}\bar{\lambda}}{2\pi i} \frac{N\mathcal{D}\lambda}{2\pi i} \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \exp\left(-N \int (\bar{\lambda}(t)X(t) + \lambda(t)\bar{X}(t) + 4uX\bar{X})\right) \exp\left(- \int \sum_{\mu} (\bar{\phi}_{\mu}(\partial_t \phi_{\mu} - \beta J_{\mu} \phi_{\mu}) - \frac{s}{2} \phi_{\mu}^2 - \bar{\phi}_{\mu}^2 - (\bar{\lambda}(t)\phi_{\mu}^2 + \lambda(t)\bar{\phi}_{\mu}\phi_{\mu}))\right) \quad (6.19)$$

Dans la limite  $N \rightarrow \infty$ , l'intégration sur les  $X, \bar{X}, \lambda$  et  $\bar{\lambda}$  peut être effectuée en utilisant la méthode du col, c'est-à-dire en évaluant le maximum de l'exposant en (6.19) : on peut donc remplacer  $X$  et  $\bar{X}$  par leurs valeurs moyennes

$$\chi(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}^2 \rangle_s \quad (6.20)$$

$$\bar{\chi}(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu} \bar{\phi}_{\mu} \rangle_s, \quad (6.21)$$

où on n'explicite plus la dépendance en temps de ces quantités puisqu'elle sont évaluées dans l'état- $s$  stationnaire. Pour cette raison dans la suite on va les évaluer à  $t = 0$ .

En dérivant (6.19) par rapport à  $\chi$  et  $\bar{\chi}$  on arrive aux valeurs stationnaires pour  $\lambda$  et  $\bar{\lambda}$  :

$$\bar{\lambda} = -4u\bar{\chi} \quad \text{et} \quad \lambda = -4u\chi. \quad (6.22)$$

En substituant dans la fonction de partition on a donc :

$$Z = e^{8uNt\bar{\chi}\chi} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S} \quad (6.23)$$

où l'action  $S_s$  dans la dynamique biaisée est donnée par :

$$S = \int \sum_{\mu} \left[ \bar{\phi}_{\mu} (\partial_t + 4u\chi - \beta J_{\mu}) \phi_{\mu} - \bar{\phi}_{\mu}^2 - \left( \frac{s}{2} - 4u\bar{\chi} \right) \phi_{\mu}^2 \right]. \quad (6.24)$$

Pour pouvoir intégrer sur les champs  $\phi, \bar{\phi}$  on écrit les champs en termes de leurs transformées de Fourier inverses en temps discret, ce qui donne, dans la limite où le pas de temps tend vers zéro, une action de la forme :

$$S = \sum_{\mu} \frac{t}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} (\bar{\phi}_{\mu}(-\omega) \phi_{\mu}(\omega)) \Gamma_{\mu}^s(\omega) \begin{pmatrix} \bar{\phi}_{\mu}(\omega) \\ \phi_{\mu}(-\omega) \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

où

$$\Gamma_{\mu}^s(\omega) = \begin{pmatrix} -2 & \frac{i\omega}{2} + 4u\chi - \beta J_{\mu} \\ -\frac{i\omega}{2} + 4u\chi - \beta J_{\mu} & -(s - 8u\bar{\chi}) \end{pmatrix}. \quad (6.26)$$

En retranchant une constante appropriée, *i.e.* en normalisant la fonction de partition de l'équation (6.23), l'intégrale sur les fréquences converge et donne l'expression suivante pour  $Z$  :

$$\begin{aligned} Z &= \exp \left( 8uNt\bar{\chi}\chi - \frac{t}{2} \sum_{\mu} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln \frac{\det \Gamma_{\mu}^s(\omega)}{\det \Gamma_{\mu}^0(\omega)} \right) = \\ &= \exp \left( 8uNt\bar{\chi}\chi - \frac{t}{2} \sum_{\mu} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln \left( 1 - \frac{2(s - 8u\bar{\chi})}{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 + \omega^2} \right) \right). \end{aligned} \quad (6.27)$$

### Fonction de grandes déviations

En transformant l'action (6.24) selon Fourier et en effectuant l'intégrale gaussienne résultant on arrive à l'expression suivante pour la fonction de grandes déviations :

$$\psi_K(s) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left[ \sqrt{(4u\chi(s) - J_{\mu}\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s))} - (4u\chi(s) - J_{\mu}\beta) \right] + 4uN\chi(s)\bar{\chi}(s) \quad (6.28)$$

Cette expression ne peut être évaluée exactement, mais on remarque qu'elle est continue en  $s = 0$ , et qu'elle satisfait bien la relation

$$\left. \frac{d\psi_K(s)}{ds} \right|_{s \rightarrow 0^+} = \frac{N}{2} \chi(s = 0^+) , \quad (6.29)$$

qui vient des équations (6.8) et (6.9). L'étude de ce système à travers le formalisme des histoires peut donc passer par le calcul de la susceptibilité dans l'état- $s$  définie en (6.6).

## 6.2 Diagramme des phases

Dans cette section on analyse les diagrammes des phases statiques et dynamiques de notre système en utilisant comme paramètre d'ordre la susceptibilité dans l'état- $s$ .

Les équations pour la valeur stationnaire de  $\bar{\chi}$  et  $\chi$  sont obtenues de façon auto-cohérente en moyennant les quantités (6.16), (6.17) à travers l'action donnée en (6.25). En exprimant les champs en termes de leurs transformées de Fourier on trouve :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}(\omega) \phi_{\mu}(-\omega) \rangle_s = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{1}{(4u\chi - J_{\mu}\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}) + \omega^2} \quad (6.30)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}(\omega) \bar{\phi}_{\mu}(-\omega) \rangle_s = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \left( \frac{-i\omega + 4u\chi}{(4u\chi - J_{\mu}\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}) + \omega^2} \right) . \quad (6.31)$$

ce qui donne, en intégrant :

$$\chi(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{1}{\sqrt{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (6.32)$$

$$2\bar{\chi}(s) + 1 = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{4u\chi - \beta J_{\mu}}{\sqrt{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (6.33)$$

Si la condition

$$\max_{\mu} \{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})\} = (4u\chi - 2\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}) > 0 \quad (6.34)$$

est satisfaite, on peut passer à la limite pour  $N \rightarrow \infty$  des équations (6.32, 6.33), ce qui donne :

$$\chi(s) = \int \frac{dJ_{\mu} \rho(J_{\mu})}{\sqrt{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (6.35)$$

$$2\bar{\chi}(s) + 1 = \int \frac{dJ_{\mu} \rho(J_{\mu}) (4u\chi - \beta J_{\mu})}{\sqrt{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (6.36)$$

L'équation (6.34) correspond à la condition pour laquelle le système est dans une phase désordonnée (paramagnétique). La quantité  $(4u\chi - 2\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})$  ne peut en tout cas jamais être négative parce que si elle l'était, la fonction de partition (6.23) ne serait pas définie.

Le système se trouve dans une phase ordonnée quand le mode correspondant à la valeur propre maximale  $J_{\mu} = 2$  se peuple macroscopiquement, et son poids statistique est dominant dans la fonction de partition. Le paramètre d'ordre de ce système est donc la moyenne thermique du mode le plus peuplé au carré  $q = \overline{\langle (\phi_{\mu; J_{\mu}=2})^2 \rangle}$  [76]. Pour évaluer ce paramètre dans la phase ordonnée on peut considérer le système en taille  $N$  finie de sorte que le mode correspondant à  $J_{\mu} = 2$  domine d'un facteur  $N$  les moyennes, ou bien appliquer un champ magnétique  $h$  couplé au mode à  $J_{\mu} = 2$ , et analyser la réponse du système à ce champ.

Les deux méthodes donnent le même résultat. La première façon de procéder est celle qu'on adopte dans la suite de ce chapitre, parce que ce travail a été initialement élaboré en ces termes-ci. La deuxième façon est décrite dans le papier [111] issu de cette partie du travail de thèse.

### 6.2.1 Phases statiques

Pour obtenir le diagramme des phases statiques du modèle on calcule la susceptibilité du système dans l'état stationnaire à  $s = 0$ , ce qui équivaut à évaluer le paramètre d'ordre du système comme il a été fait en [69].

Les équations (6.32, 6.33) pour la susceptibilité et sa partie complexe nous donnent,

pour  $s = 0$ , la condition de causalité  $\bar{\chi} = 0$  et l'équation suivante pour  $\chi$  :

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{1}{4u\chi - \beta J_{\mu}} . \quad (6.37)$$

Si  $\chi > \beta/2u$ , ce qui correspond à la condition en (6.34) pour  $s = 0$ , on peut approximer la somme sur les valeurs propres  $J_{\mu}$  par une intégrale sur la distribution  $\rho(J_{\mu})$ , ce qui donne :

$$\chi = \frac{1}{\beta^2} \left( 2u\chi - \sqrt{4u^2\chi^2 - \beta^2} \right) . \quad (6.38)$$

La solution de cette équation est donnée par

$$\chi_1 = \frac{1}{4u - \beta^2} , \quad (6.39)$$

à condition que  $\beta < \sqrt{2u}$ .

La température critique en dessous de laquelle le système s'ordonne est donc donnée par  $\beta_c = \sqrt{2u}$ . On remarque que cette transition statique a bien lieu d'être dans ce modèle vu la ressemblance avec le modèle sphérique [69] et le modèle à  $p$ -spins mous [10] qui possèdent tous les deux en une transition de phase statique.

Si  $\beta > \beta_c$ , le mode correspondant à la valeur propre  $J_{\mu} = 2$  se peuple macroscopiquement. On doit donc imposer que la susceptibilité soit donnée par

$$\chi_2 = \frac{\beta}{2u} + \frac{\epsilon}{N} . \quad (6.40)$$

Ensuite on sépare de la somme (6.37) le terme correspondant à  $J_{\mu} = 2$  et on fait tendre  $N \rightarrow \infty$  dans le reste de la somme ce qui donne :

$$\chi_2 = \frac{1}{4u\epsilon} + \frac{1}{2\beta^2} (4u\chi - \sqrt{(4u\chi)^2 - 4\beta^2}) , \quad (6.41)$$

d'où

$$\chi_2 = \frac{\beta}{2u} + \frac{\beta}{2N(\beta^2 - \beta_c^2)} + \mathcal{O}(N^{-2}) . \quad (6.42)$$

On remarque que la susceptibilité est discontinue au point critique :  $\chi_1(\beta_c) \neq \chi_2(\beta_c)$ . La susceptibilité est la dérivée seconde de l'énergie libre statique du système donc la transition de phase statique qu'on observe est de deuxième ordre.

### 6.2.2 Phases dynamiques

On analyse dans cette section la dynamique du système dans l'espace des histoires dans chacune des phases statiques  $\beta < \beta_c$  et  $\beta > \beta_c$ . En particulier on montre, en calculant l'énergie libre dynamique du système, que dans la phase ordonnée à  $\beta > \beta_c$  une transition dynamique a lieu à  $s = 0$ . Pour le montrer on évalue dans la suite les quantités  $\chi(s)$  et  $\bar{\chi}(s)$  dans les deux régimes de température qu'on a distingués dans la section précédente.

Dans ce qui suit on simplifie la notation en posant :

$$x(s) = 4u\chi(s) \quad (6.43)$$

$$y(s) = -2(s - 8u\bar{\chi}(s)). \quad (6.44)$$

On remarque que  $y(s) > 0$  quand  $s < 0$ , et donc la condition (6.34), qui se traduit en  $(x(s) - 2\beta)^2 + y(s) > 0$ , est toujours vérifiée pour  $s < 0$ . Cela fait que la phase à basse température ne soit ordonnée que si  $s \geq 0$ . Pour  $s < 0$  aucun mode n'est macroscopiquement peuplé et le système se trouve une phase désordonnée "non triviale", décrite dans la suite de cette section.

#### Phase paramagnétique

Dans la phase à haute température  $\beta < \beta_c$ , les états- $s$  pour lesquels le système est désordonné, *i.e.* la dynamique du système est active, sont ceux qui correspondent à  $s < s_c(\beta)$  où  $s_c(\beta)$  est la quantité positive solution de l'équation

$$(x(s_c) - 2\beta)^2 + y(s_c) = 0. \quad (6.45)$$

Pour  $s < s_c(\beta)$  les susceptibilités s'obtiennent en résolvant les équations (6.35, 6.36). Le problème est qu'on ne peut effectuer analytiquement les intégrales sur le désordre en (6.35, 6.36), on résout donc ces équations pour  $s \rightarrow 0^+$  et on obtient :

$$x(s \rightarrow 0^+) = \frac{4u}{\sqrt{4u - \beta^2}} + s \frac{u}{2(2u - \beta^2)\sqrt{4u - \beta^2}} \quad (6.46)$$

$$y(s \rightarrow 0^+) = -2s \frac{2u - \beta^2}{(4u - \beta^2)}. \quad (6.47)$$

On vérifie facilement que cette solution satisfait bien la condition  $(x(s) - 2\beta)^2 + y(s) > 0$  pour  $s$  petit. Quand la température s'approche de la température critique,  $\beta \rightarrow \beta_c^-$ ,

la dérivée de la susceptibilité, ou de façon équivalente,  $dx/ds$  diverge. Cela signale la présence d'une transition de phase de deuxième ordre vers une phase ordonnée. On peut montrer que cette transition vers la phase ordonnée survient à une température supérieur pour  $s > 0$ . En effet au point critique l'équation (6.45) nous donne une solution  $s_c(\beta_c) > 0$ . Pour calculer cette solution autour de  $s = 0$ , ou  $\beta = \beta_c$ , on résout l'équation (6.45) en utilisant les solutions (6.46, 6.47), et on voit que

$$\lim_{\beta \rightarrow \beta_c} s_c(\beta) = \mathcal{O}((\beta_c - \beta)^3) . \quad (6.48)$$

Pour avoir l'expression de  $s_c(\beta)$  on développe les intégrales (6.35), (6.36) en puissances de  $s$  pour  $s \ll 1$  et  $s/(\beta_c - \beta)^3$  fixé, d'où, en tenant compte de l'équation (6.45) on obtient :

$$s_c(\beta) = \frac{2\pi^2}{3\beta_c}(\beta_c - \beta)^3 \quad \text{pour } \beta \rightarrow \beta_c^- . \quad (6.49)$$

### Phase ordonnée

On considère le domaine de température dans lequel le système est ordonné en prenant  $\beta > \beta_c = \sqrt{2u}$  et  $s > 0$ .

On réécrit les équations (6.32, 6.33) en fonction des nouvelles variables :

$$x(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{4u}{\sqrt{(x - \beta J_{\mu})^2 + y}} \quad (6.50)$$

$$y(s) + 2s = 8u \left( \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{(x - \beta J_{\mu})}{\sqrt{(x - \beta J_{\mu})^2 + y}} - 1 \right) . \quad (6.51)$$

Le terme correspondant au mode peuplé macroscopiquement va dominer ces sommes. Pour  $s = 0$  on a imposé  $x(0) = 2\beta + \mathcal{O}(1/N)$ ; on impose donc que pour  $s$  petit

$$x(s) = 2\beta + x_0(s) + \frac{1}{N}x_1(s) + \mathcal{O}(N^{-2}) , \quad (6.52)$$

$$y(s) = y_0(s) + \frac{1}{N}y_1(s) + \mathcal{O}(N^{-2}) , \quad (6.53)$$

et que ces quantités soient telles que  $(x(s) - 2\beta)^2 + y(s) = \mathcal{O}(1/N^2)$ . En explicitant cette condition on a :

$$(x_0(s))^2 + y_0(s) = 0 \quad (6.54)$$

$$2x_0(s)x_1(s) + y_1(s) = 0 \quad (6.55)$$

qui, avec les équations (6.50, 6.51), déterminent de façon univoque nos quatre inconnues  $x_0(s)$ ,  $y_0(s)$ ,  $x_1(s)$  et  $y_1(s)$ . Il nous reste à isoler le terme divergent dans les équations (6.50, 6.51) et faire tendre  $N \rightarrow \infty$  dans le reste de la somme. L'équation (6.50) donne à l'ordre dominant :

$$\begin{aligned} \frac{x_0(s) + 2\beta}{4u} &= \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + 2x_0x_2 + y_2}} + \frac{1}{\beta} + \\ &+ \int dJ_\mu \rho(J_\mu) \left[ \frac{1}{\sqrt{\beta^2(2 - J_\mu)^2 + 2\beta x_0(2 - J_\mu)}} - \frac{1}{\beta(2 - J_\mu)} \right] \end{aligned} \quad (6.56)$$

où on a soustrait dans l'intégrale la partie singulière en  $s = 0$  pour que l'intégrale converge. On rajoute cette partie hors intégrale, ce qui donne le  $1/\beta$ .

On s'intéresse à l'intégrale en (6.56) : on change de variable en posant  $\beta(2 - J_\mu) = z x_0(s)$ , ce qui donne :

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{4\beta}{x_0}} \frac{dz}{2\pi} \frac{x_0}{\beta} \sqrt{\frac{z x_0}{\beta} \left( 4 - \frac{z x_0}{\beta} \right)} \left( \frac{1}{\sqrt{z^2 x_0^2 + 2z x_0^2}} - \frac{1}{z x_0} \right) \\ = \frac{\sqrt{x_0}}{\beta^2} \left( \frac{\sqrt{x_0}}{2} - \frac{2\sqrt{2\beta}}{\pi} - \frac{x_0}{3\pi} \sqrt{\frac{2}{\beta}} \right). \end{aligned} \quad (6.57)$$

En gardant seulement les termes d'ordre dominant quand  $s \rightarrow 0$  on a donc :

$$\frac{x_0(s)}{4u} + \frac{\beta^2 - 2u}{2u\beta} - \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + 2x_0x_2 + y_2}} = \frac{x_0}{2\beta^2} - \frac{2\sqrt{2x_0}}{\pi\beta^{3/2}} + \mathcal{O}(x_0^{3/2}). \quad (6.58)$$

En procédant de la même façon pour l'équation (6.51) on a une deuxième équation :

$$\frac{1}{\sqrt{x_1^2 + 2x_0x_2 + y_2}} = -\frac{x_0}{8u} + \frac{s}{4ux_0} - \frac{2\sqrt{2x_0}}{3\pi\beta^{3/2}} + \mathcal{O}(x_0^{3/2}). \quad (6.59)$$

En ne gardant que les termes  $\mathcal{O}(x_0^{1/2})$  on trouve enfin :

$$\frac{s}{4x_0} - \frac{8\sqrt{2x_0}}{3\pi\beta^{3/2}} = \frac{\beta^2 - 2u}{2u\beta} \quad (6.60)$$

ce qui donne :

$$x_0(s) = \frac{\beta}{2(\beta^2 - 2u)} s - \frac{8u\beta\sqrt{2}}{3\pi(\beta^2 - 2u)^{5/2}} s^{\frac{3}{2}} \quad (6.61)$$

Donc les quantités  $x(s)$  et  $y(s)$  sont données à l'ordre dominant en  $1/N$ , en tenant compte de l'équation (6.54), par :

$$x(s) = 2\beta + \frac{\beta}{2(\beta^2 - 2u)}s - \frac{8u\beta\sqrt{2}}{3\pi(\beta^2 - 2u)^{5/2}}s^{3/2} + o(s^{3/2}) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \quad (6.62)$$

$$y(s) = -\frac{\beta^2}{4(\beta^2 - 2u)^2}s^2 + o(s^2) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \quad (6.63)$$

On remarque que la solution  $y(s) < 0$  assure que  $(x(s) - 2\beta)^2 + y(s) = o(s^3)$ . Ces quantités divergent pour  $s$  fini et  $\beta \rightarrow \beta_c^+$ .

### Phase paramagnétique non-triviale

On prend maintenant  $s < 0$  mais on reste dans la phase à basse température. Le système se trouve dans une phase désordonnée puisque

$$(x(s) - 2\beta)^2 + y(s) > 0. \quad (6.64)$$

Cette phase désordonnée est néanmoins non-triviale et signale la présence d'une transition de phase dynamique à  $s = 0$  pour  $\beta > \beta_c$ . Pour le montrer on cherche la solution des équations (6.35,6.36), dont on reprend les intégrales :

$$I_1(x, y) = \int dJ_\mu \rho(J_\mu) \frac{1}{\sqrt{(x - \beta J_\mu)^2 + y}}. \quad (6.65)$$

$$I_2(x, y) = \int dJ_\mu \rho(J_\mu) \frac{(x - \beta J_\mu)}{\sqrt{(x - \beta J_\mu)^2 + y}}. \quad (6.66)$$

Pour effectuer l'intégration sur le désordre on change l'échelle de nos paramètres selon :

$$x \rightarrow x' = 2 - \frac{x}{\beta}, \quad y \rightarrow y' = \frac{y}{\beta^2}, \quad (6.67)$$

et on change la variable d'intégration  $J_\mu$  en  $z\beta = J_\mu\beta - x$ . On a donc :

$$I_1(x', y') = \int_{-4+x'}^{x'} \frac{dz}{2\pi\beta} \frac{\sqrt{4(x' - z) - (x' - z)^2}}{\sqrt{z^2 + y'}} \quad (6.68)$$

$$I_2(x', y') = \int_{-4+x'}^{x'} \frac{dz}{2\pi} \frac{-z\sqrt{4(x' - z) - (x' - z)^2}}{\sqrt{z^2 + y'}} \quad (6.69)$$

Puisque  $\beta > \beta_c$  et  $s < 0$ , on a que  $x', y' > 0$ . La limite pour  $s \rightarrow 0$  devient une limite pour  $y' \rightarrow 0$  mais si on prend la limite pour  $y' \rightarrow 0$  en gardant  $x' > 0$  on a

$I_1(x', y' \rightarrow 0) \rightarrow \infty$ . Donc résout les équations (6.68, 6.69) dans la limite  $x'^2 \ll 1$  et  $y'/x'^2 \ll 1$ .

On commence par évaluer la limite de l'intégrale (6.68) en la séparant en trois parties :

$$\beta I_1(x', y') = \int_{-x'}^{x'} \frac{dz}{2\pi} \frac{\sqrt{x'(4-x')}}{\sqrt{y'+z^2}} \quad (6.70)$$

$$+ \int_{-x'}^{x'} \frac{dz}{2\pi} \frac{\sqrt{4(x'-z) - (x'-z)^2} - \sqrt{x'(4-x')}}{\sqrt{z^2+y'}} \quad (6.71)$$

$$+ \int_{x'-4}^{-x'} \frac{dz}{2\pi} \frac{\sqrt{4(x'-z) - (x'-z)^2}}{\sqrt{z^2+y'}}. \quad (6.72)$$

La première intégrale s'effectue facilement et donne  $\sqrt{x'}/\pi \ln(4x'^2/y') + \mathcal{O}(\sqrt{x'})$ . Dans les deuxième et troisième parties on peut prendre d'abord la limite pour  $y' \rightarrow 0$  de l'intégrand puis intégrer, ce qui donne  $\mathcal{O}(\sqrt{x'})$  pour la deuxième ligne et  $1 + \mathcal{O}(\sqrt{x'})$  pour la troisième. On a donc l'expression suivante pour la limite  $y' \ll x'^2 \ll 1$  de l'équation (6.68) :

$$\beta I_1(x', y') = \pi^{-1} \sqrt{x'} \ln(4x'^2/y') + 1 + \mathcal{O}(\sqrt{x'}). \quad (6.73)$$

On évalue maintenant la limite pour  $(y'/x'^2) \rightarrow 0$  de l'expression (6.69). On utilise la méthode précédente en séparant l'intégrale en deux parties comme il suit :

$$I_2(x', y') - 1 = \int_{-x'}^{x'} \frac{dz}{2\pi} \sqrt{4(x'-z) - (x'-z)^2} \left( \frac{-z}{\sqrt{z^2+y}} - 1 \right) \quad (6.74)$$

$$+ \int_{x'-4}^{-x'} \frac{dz}{2\pi} \sqrt{4(x'-z) - (x'-z)^2} \left( \frac{-z}{\sqrt{z^2+y}} - 1 \right).$$

Dans la première intégrale on introduit  $w = z/x'$  et  $\sigma = y'/x'^2$ , d'où il vient :

$$(x')^{3/2} \int_{-1}^1 \frac{dw}{2\pi} \left( \frac{-w}{\sigma + w^2} - 1 \right) \sqrt{4(1-w) - x'(1-w)^2}. \quad (6.75)$$

La limite pour  $(y'/x'^2) \rightarrow 0$  de cette quantité peut être évaluée directement en prenant l'intégrand en  $\sigma = x' = 0$ , d'où on a  $-4(x')^{3/2}/(3\pi)[1 + \mathcal{O}(\sqrt{x'})]$ .

Pour le deuxième terme en (6.74), on développe l'intégrand en puissances de  $\sigma = y'/x'^2$ . Le terme d'ordre dominant s'annule et le deuxième terme est d'ordre  $\mathcal{O}(y'/\sqrt{x'})$ ,

ce qui est d'ordre inférieur aux termes d'ordre  $\mathcal{O}((x')^{3/2})$ . On arrive donc à l'expression pour (6.69) :

$$I_2(x', y') = 1 - \frac{4(x')^{3/2}}{3\pi}. \quad (6.76)$$

En utilisant les expressions (6.73, 6.76) on arrive à une équation auto-cohérente pour  $x'(s)$  :

$$\frac{\beta^2}{4u}(2 - x') = 1 + \frac{\sqrt{x'}}{\pi} \ln \frac{4x'^2}{y'} + \mathcal{O}(y'/\sqrt{x'}) + \mathcal{O}(\sqrt{x'}). \quad (6.77)$$

L'ordre qui va dominer l'expression  $x(s) = \beta[2 - x'(s)]$  pour  $y'/x'^2 \rightarrow 0$  est donné par :

$$x(s) = \beta \left( 2 - \frac{\pi^2}{4u^2} \frac{(\beta^2 - 2u)^2}{\ln^2(1/y'(s))} \right). \quad (6.78)$$

En remplaçant dans l'équation (6.76) l'expression pour  $x'$  on a une équation pour  $\bar{\chi}(s)$

$$\bar{\chi}(s) = -\frac{\pi^2}{12u^3} \frac{(\beta^2 - 2u)^3}{\ln^3(1/y'(s))}. \quad (6.79)$$

Vu que  $y' \ll (x')^2$  et que  $\bar{\chi}(s) \sim (x')^{3/2}$  on a que pour  $s \rightarrow 0$ ,  $\bar{\chi} \gg y'$ . Cela signifie, en considérant l'expression  $y' = -2(s - 8u\bar{\chi})/\beta^2$ , qu'à petit  $s$  on a  $s \simeq 8u\bar{\chi} + o(1)$ . Cela simplifie les expressions pour  $\chi(s)$  et  $\bar{\chi}$  qui deviennent :

$$\chi(s) = \frac{\beta}{2u} \left[ 1 - \left( \frac{3\pi}{16u} \right)^{\frac{2}{3}} (-s)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (6.80)$$

$$\bar{\chi}(s) = \frac{s}{8u} \quad (6.81)$$

pour  $s < 0$  et  $\beta > \beta_c$ . Donc pour  $s = 0$  on retrouve les résultats obtenus dans la phase ordonnée  $\bar{\chi} = 0$  et  $\chi = \beta/(2u)$ .

### 6.2.3 Transition de phase dynamique

De l'analyse précédente on obtient donc une susceptibilité pour  $T < T_c$  qui montre une singularité en  $s = 0$ . L'expression de  $\chi(s)$  change lors du passage par ce point critique, mais  $\chi(s \rightarrow 0^+) = \chi(s \rightarrow 0^-)$ . La susceptibilité est donc continue sur la ligne  $s = 0$  pour  $\beta > \beta_c$ , mais sa dérivée première subit une discontinuité.

Vu que la susceptibilité est proportionnelle à la dérivée première de la fonction de grandes déviations (voir équation (6.9)), la transition dynamique est du second ordre.

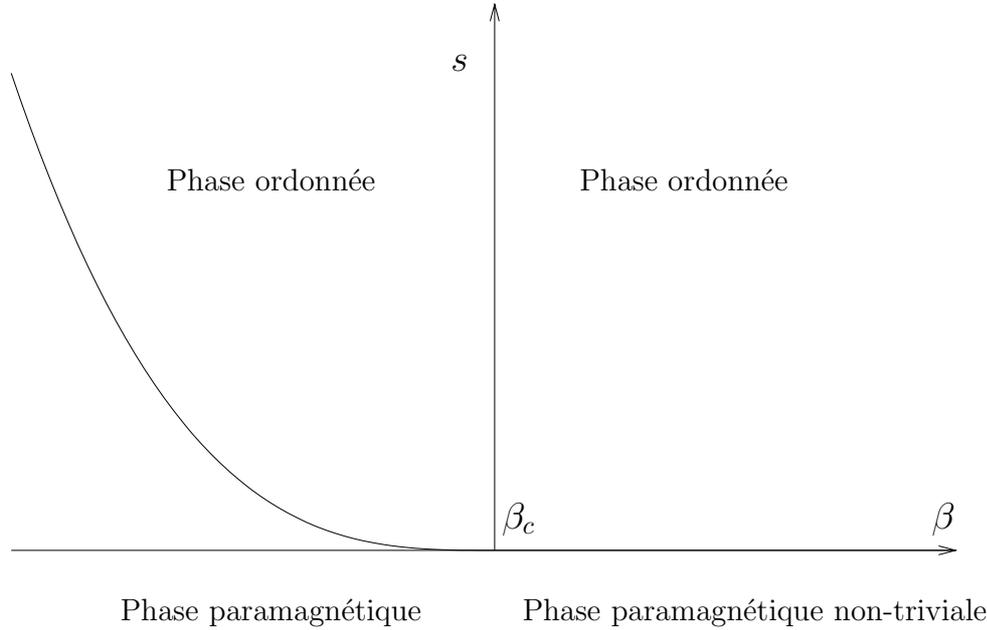


FIG. 6.1 – Le diagramme des phases pour le modèle à  $p = 2$  spins. L'origine des axes est mise en  $\beta = \beta_c$  et  $s = 0$ . Pour  $\beta < \beta_c$  la transition entre histoires actives et inactives advient à un  $s = s_c \neq 0$ , dont l'expression pour  $s \simeq 0$  est donnée en (6.45), tandis que pour  $\beta > \beta_c$  la transition a lieu à  $s = 0$ .

En figure 6.1 on représente le diagramme des phases du système. La transition de phase statique entre la phase désordonnée et la phase ordonnée à propriétés vitreuses se retrouve sur l'axe  $s = 0$ . Les phases indiquées sur le diagramme sont les phases dynamiques que le système suit dans l'espace des histoires. Pour  $\beta > \beta_c$  la transition a lieu sur l'axe  $s = 0$  : si  $s < 0$  on est dans une phase désordonnée, appelée phase paramagnétique non-triviale où la susceptibilité est donnée par l'équation (6.80), tandis que si  $s > 0$  on est dans une phase ordonnée, ferromagnétique, où la susceptibilité est donnée par l'équation (6.62). Pour  $\beta < \beta_c$  la ligne de transition est donnée par l'équation (6.49), qui est tracée en figure ; au dessous de cette ligne le système est dans sa phase désordonnée, où la susceptibilité est donnée par l'équation (6.46), par contre pour  $s > s_c(\beta)$  l'expression (6.46) n'est plus valable, et le système s'ordonne à nouveau.

Il y a donc une transition dynamique pour un  $s$  finie aussi pour  $\beta < \beta_c$ .

### 6.3 Formulation en termes d'un opérateur hermitien

On ouvre une parenthèse pour montrer qu'en traduisant la moyenne sur les histoires en une évolution d'états quantiques à travers un opérateur hermitien on arrive, à partir de l'hamiltonien (6.4), à écrire une action  $S$  différente de la (6.24), mais qui donne les mêmes moyennes d'observables physiques. En particulier on arrive au résultat obtenu précédemment pour la susceptibilité dans l'état- $s$  du système.

On veut calculer

$$Z_s = \int \mathcal{D}\phi P_K(\phi, s, t) = \langle e^{-sK} \rangle \sim e^{t\psi_K(s)} \quad (6.82)$$

où  $\phi$  est l'ensemble des  $N$  valeur des spins  $\phi = \{\phi_0, \dots, \phi_N\}$ , et  $\psi_K(s)$  est la plus grande valeur propre de l'opérateur d'évolution  $\mathbb{W}_K$ .

En mécanique quantique l'amplitude de probabilité de trouver le système dans un état  $\phi$  au temps  $t$ , est la projection de cet état final sur l'état fondamental du système, c'est à dire :

$$\langle \phi | e^{-\int_0^t \hat{H}_{\text{sym}}} | 0 \rangle \langle 0 | \text{in} \rangle \quad (6.83)$$

où  $|\text{in}\rangle$  est l'état initial du système,  $|0\rangle$  son état fondamental et l'opérateur d'évolution  $\hat{H}_{\text{sym}}$  est l'opérateur hamiltonien symétrisé selon :

$$\hat{H}_{\text{sym}} = e^{\frac{\mathcal{H}}{2}} \hat{H} e^{-\frac{\mathcal{H}}{2}}, \quad (6.84)$$

où  $\mathcal{H}$  est donné en (6.4) et

$$\hat{H} = \sum_{\mu} \frac{p_{\mu}^2}{2m} + \mathcal{H}. \quad (6.85)$$

On adopte dorénavant la convention  $2m = \hbar = 1$  qui donne des moments  $p_{\mu} = \dot{\phi}_{\mu}$ . En calculant la probabilité (6.83) on va avoir l'exponentielle de la plus grande valeur propre de l'opérateur d'évolution, qui va nous donner  $\psi_K(s)$ .

En explicitant l'équation (6.84) on trouve que l'opérateur d'évolution est :

$$\hat{H}_{\text{sym}} = - \sum_{\mu} \frac{\delta^2}{\delta \phi_{\mu}^2} + U_{\text{eff}} \quad \text{où} \quad U_{\text{eff}} = \sum_{\mu} \frac{1}{4} \left( \frac{\delta(\beta\mathcal{H})}{\delta \phi_{\mu}} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\delta^2(\beta\mathcal{H})}{\delta \phi_{\mu}^2}. \quad (6.86)$$

En traduisant l'évolution temporelle des spins en une intégrale de chemin on arrive (voir par exemple [114] pour une démonstration explicite) à l'expression suivante pour la fonction de partition donnée en (6.82) :

$$Z_s = \int \mathcal{D}\phi \exp - \sum_{\mu} \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{\partial \phi_{\mu}}{\partial t'} \right)^2 + U_{\text{eff}}(t') - \frac{s}{2} \phi_{\mu}^2 \right] \quad (6.87)$$

où le potentiel actif est donné à l'ordre dominant en  $N$  par :

$$U_{\text{eff}}(t) = \frac{1}{4} \sum_{\mu} [(4uX(t) - \beta J_{\mu})^2 \phi_{\mu}^2 - 2u\beta \phi_{\mu}^2] , \quad (6.88)$$

et où la quantité  $X(t)$  est la susceptibilité non-moyennée définie en (6.16). On est en tout cas obligé d'augmenter les degrés de liberté de notre système en introduisant une autre quantité fluctuante :

$$Y(t) = \frac{1}{4N} \sum_{\mu} (4uX(t) - \beta J_{\mu})^2 \phi_{\mu}^2 . \quad (6.89)$$

On considère les quantités  $X(t)$  et  $Y(t)$  comme constantes par rapport au champ  $\phi$  à l'aide de multiplicateurs de Lagrange  $\lambda$  et  $\lambda'$ , ce qui donne :

$$\begin{aligned} Z = \int N^2 \frac{d\lambda d\lambda'}{(2\pi i)^2} dX dY \mathcal{D}\phi \exp & \left[ -N \int_0^t dt' (\lambda(t')X(t') + \lambda'(t')Y(t')) + \right. \\ & - \sum_{\mu} \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{\partial \phi_{\mu}}{\partial t'} \right)^2 - \frac{1}{4} \sum_{\mu} [(4uX - \beta J_{\mu})^2 \phi_{\mu}^2] - \frac{s}{2} \phi_{\mu}^2 + 2u\beta \phi_{\mu}^2 \right. \\ & \left. \left. - (\lambda(t')\phi_{\mu}^2(t') + \lambda'(t')(4uX(t') - \beta J_{\mu})^2 \phi_{\mu}^2(t')/4) \right] \right] . \quad (6.90) \end{aligned}$$

Vu que les quantités  $X(t)$  et  $Y(t)$  sont des constantes dans les champs, on peut effectuer l'intégrale gaussienne sur les champs  $\phi$ . Par ailleurs, on veut évaluer cette fonction en utilisant la méthode du col. On remplace donc les valeurs fluctuantes par leurs valeurs moyennées

$$\chi(s) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle \phi_{\mu}^2 \rangle_s \quad (6.91)$$

$$\xi(s) = \frac{1}{4N} \sum_{\mu} \langle (4u\chi(s) - \beta J_{\mu})^2 \phi_{\mu}^2 \rangle_s , \quad (6.92)$$

qu'on va évaluer à  $t = 0$  puisqu'elle sont moyennées dans l'état- $s$  stationnaire. On écrit donc la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \int \frac{d\lambda d\lambda'}{(2\pi i)^2} d\chi d\xi \exp(-Nt\mathcal{F}(\lambda, \lambda', \chi, \xi)) \quad (6.93)$$

avec

$$\mathcal{F} = \lambda\chi + \lambda'\xi - \frac{1}{2}(s - 4u\beta)\chi - \xi - \frac{1}{2N} \sum_{\mu} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln \left( \frac{\omega^2}{2} + 2\lambda + \frac{\lambda'}{2}(4u\chi - \beta J_{\mu})^2 \right) \quad (6.94)$$

où l'on a effectué un passage en transformée de Fourier pour pouvoir intégrer sur les variables de spin  $\phi_{\mu}$ . On normalise la fonction de partition par la constante (infinie)  $\exp(-(t/2) \int \ln(\omega^2/2))$ , ce qui donne :

$$\mathcal{F} = \lambda\chi + \lambda'\xi - \frac{1}{2}(s - 4u\beta)\chi - \xi - \frac{1}{2N} \sum_{\mu} \sqrt{4\lambda + \lambda'(4u\chi - \beta J_{\mu})^2}. \quad (6.95)$$

On évalue enfin  $Z$  à travers la méthode du col : en dérivant l'équation (6.95) par rapport aux quatre variables en jeu on obtient :

$$\lambda' = 1, \quad (6.96)$$

$$\lambda = \frac{1}{2}(s - 4u\beta) - \frac{1}{2N} \sum_{\mu} \frac{4u(4u\chi - \beta J_{\mu})}{\sqrt{4\lambda + \lambda'(4u\chi - \beta J_{\mu})^2}}, \quad (6.97)$$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \frac{1}{\sqrt{4\lambda + \lambda'(4u\chi - \beta J_{\mu})^2}}, \quad (6.98)$$

$$\xi = \frac{1}{2N} \sum_{\mu} \frac{(4u\chi - \beta J_{\mu})^2}{\sqrt{4\lambda + \lambda'(4u\chi - \beta J_{\mu})^2}}. \quad (6.99)$$

En posant  $4\lambda = -2(s - 8u\bar{\chi})$  on arrive à une paire d'équations identiques aux équations (6.32, 6.33) pour la susceptibilité et sa partie complexe.

On a montré donc que pour traité ce problème on peut faire recours à deux formulations différentes.

## 6.4 Discussion des résultats

On a étudié ce modèle à  $p$ -spins mous avec  $p = 2$  en calculant la susceptibilité dynamique dans les différentes phases de la dynamique du système et on a trouvé une

transition de phase dynamique de second ordre en  $s = 0$  dans la phase à basse température. Ceci est en accord avec les résultats obtenus en appliquant le formalisme thermodynamique des histoires au modèle d'Ising en champ moyen, où comme dans notre modèle une transition de phase statique de second ordre a lieu entre une phase ordonnée et une phase désordonnée, et une transition dynamique a lieu dans la phase à basse température [80]. Cette transition dynamique semble donc une fois de plus caractériser la dynamique vitreuse de la phase à basse température de notre modèle.

La différence principale avec tous les modèles étudiés précédemment à travers ce formalisme est qu'ici la transition dynamique trouvée est du second et non du premier ordre. Il faut souligner à ce propos que le modèle à  $p = 2$ -spins n'a pas toutes les propriétés vitreuses classiques qu'ont par exemple les modèles à  $p$ -spin avec  $p \geq 3$  (voir [88, 69]). Le fait que la transition dynamique soit de deuxième ordre pourrait refléter le fait que la séparation spatio-temporelle entre différentes régions du système n'est pas si nette que dans les modèles considérés jusqu'ici dans cette thèse. Pour vérifier cette hypothèse on pourrait calculer la longueur de corrélation, définie par  $\langle |\phi_{\mathbf{k}}|^2 \rangle_s$ , où  $\phi_{\mathbf{k}}$  est la transformée de Fourier spatiale du champ  $\phi_{\mu}$ , dans chaque phase dynamique du système. Ceci a été fait en [111] pour une version en dimension finie du modèle ferromagnétique décrit en Appendice A, où pour  $\beta > \beta_c$  une longueur de corrélation qui diverge dans la phase ordonnée mais pas dans la phase paramagnétique non-triviale a été identifiée. Ce travail reste à faire dans le cas du modèle désordonné.

De même la transition à  $s \neq 0$  dans la phase à haute température n'a pas d'interprétation immédiate : le seul état physique du système, où la dynamique non-biaisée a lieu, est l'état à  $s = 0$ , donc si une transition dynamique advient en  $s = 0$  on peut l'associer à une coexistence entre plusieurs régimes dynamiques explicitée, à l'occasion, par un caractère dynamiquement hétérogène du système. Si par contre la transition a lieu à un  $s \neq 0$  pour tout  $N$ , on ne peut rien dire sur son interprétation physique.

En appendice A on reporte l'analyse de la version non-désordonnée de ce modèle, on discute ses propriétés vitreuses et décrit le diagramme des phases dynamiques du modèle.

# Conclusion

La ligne directrice de cette thèse a été de montrer qu'une dynamique de vitreuse est le reflet d'une discontinuité entre deux types de réalisations temporelles dans l'espace des configurations que le système peut suivre. Ces réalisations temporelles sont connues à travers l'application du formalisme thermodynamique des histoires de Ruelle adapté aux dynamiques markoviennes en temps continu. En particulier pendant ces trois ans mon travail a été d'évaluer, numériquement et analytiquement, la fonction de grandes déviations  $\psi_K(s)$  des systèmes étudiés par rapport à l'activité  $K$  des histoires suivies.

Dans le cas des modèles cinétiquement contraints la fonction de grande déviation a été évaluée numériquement via des simulations de dynamique dans l'espace des histoires. Les résultats numériques en taille finie ont complété des résultats analytiques existant en champ moyen, en confirmant l'hypothèse faite que l'hétérogénéité dynamique des modèles KCM est le reflet d'une transition dynamique de premier ordre dans l'espace des réalisations temporelles que le système a pu suivre.

Ensuite le passage aux modèles de verres avec désordre gelé a montré que ces affirmations sont bien fondées : en étudiant le modèle de pièges à dynamique dirigée et la phase à basse température du modèle à énergies aléatoires on a prouvé, à travers une démonstration heuristique et la résolution numérique d'équations aux valeurs propres, que la fonction de grandes déviations, ou énergie libre du système, présente une discontinuité de premier ordre là où la dynamique du système est vitreuse. On a remarqué que les caractéristiques dynamiques dépendent de la statistique des extrêmes du désordre utilisée : pour un modèle à énergies aléatoires dont la statistique du désordre donne une dynamique non-vitreuse, on a montré que la transition de phase dynamique n'est pas présente.

L'étude du modèle à  $p = 2$ -spin a représenté une difficulté majeure pour plusieurs raisons. D'abord le formalisme thermodynamique des histoires tel qu'il a été appliqué

aux chaînes de Markov ne peut être utilisé dans ce cas. Les variables étant continues, le calcul de la fonction de grandes déviations passe par une formulation proche de la théorie des champs, et ne peut se limiter à évaluer la plus grande valeur propre d'un opérateur, comme il a été fait pour les KCMs et le modèle de pièges et à énergies aléatoires. Deuxièmement la transition n'étant pas de premier ordre, l'interprétation en termes d'hétérogénéités dynamiques n'est pas si immédiate. Tout de même on a réussi à prouver que cette transition a lieu à  $s = 0$  seulement dans la phase ordonnée, à dynamique ralentie, de ce modèle.

Donc pour résumer on a établi en étudiant l'énergie libre dynamique de plusieurs modèles de verres que là où la dynamique est vitreuse, que ce soit à cause de la basse température, du type de désordre, ou d'une contrainte cinétique, une transition de phase dynamique a lieu à  $s = 0$ , c'est à dire que la dynamique physique du système, non biaisée par le paramètre  $s$ , se trouve en un point de coexistence entre deux régimes dynamiques différents : le régime à  $s < 0$  où la dynamique est active, et celui à  $s > 0$  où la dynamique est inactive. On a montré dans chaque cas que quand la cause du ralentissement dynamique disparaît, *i.e.* quand le système n'est plus vitreux, la transition de phase dynamique disparaît aussi.

## 6.5 Perspectives

On donne dans ce paragraphe quelques voies à explorer.

- Le formalisme thermodynamique des histoires devrait pouvoir s'adapter aux phénomènes décrits par des modèles de systèmes quantiques. Les transitions de phase quantiques, ou la décohérence qui caractérisent certains de ces systèmes, pourraient être, à notre avis, encore une fois une conséquence d'une discontinuité dans l'espace des histoires suivies par le système.
- La méthode de simulation de la dynamique dans l'espace des histoires, décrite en section 4.2.1 pourrait être adaptée aux simulations de dynamique moléculaire qui n'ont pas pour base une méthode Monte-Carlo, pour que la liaison entre les hétérogénéités dynamiques par exemple d'une solution de colloïdes et la dynamique dans l'espace des histoires puisse être explorée en détails.
- L'adaptation du formalisme de De Dominicis *et al* à l'étude de la dynamique dans l'espace des histoires faite dans la section 6.1 ouvre la porte à l'étude de tous les

modèles désordonnés qui présentent des propriétés vitreuses et qui sont étudiés en général à travers la méthode des répliques.

- L'étude de l'énergie libre dynamique, quantité centrale de ce travail, pourrait donner d'autres informations sur les caractéristiques dynamiques des systèmes hors l'équilibre, dépassant la liaison établie entre une discontinuité de cette fonction et une dynamique vitreuse. Cette fonction est un instrument puissant d'étude des phénomènes hors l'équilibre et mérite plus d'attention.
- Dans le cadre des phénomènes vitreux, une liaison précise entre le vieillissement d'un système vitreux et la dynamique dans l'espace des histoires du système reste encore à établir, ainsi que la caractérisation physique de l'ordre des transitions dynamiques.



# Annexe A

## Modèle Ferromagnétique

On s'intéresse dans cette section à la version sans désordre de notre modèle à  $p = 2$  spins *mous* avec une matrice de couplage constante. La dynamique de ce modèle est déterminée par l'Hamiltonien

$$\beta H = -\frac{\beta J}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \frac{u}{N} \sum_{i,j} \sigma_i^2 \sigma_j^2, \quad (\text{A.1})$$

invariant sous transformations du groupe des opérateurs de rotation  $O(N)$ . Il s'agit donc d'un cas particulier du modèle  $O(N)$  en dimension  $d$  quelconque et potentiel non-linéaire introduit en [85] et étudié dans plusieurs articles (voir par exemple [27] et [26]). Ce modèle représente un système qui, refroidi au deçà d'une température critique  $T_c$ , présente une croissance de domaines avec fluctuations non-triviales [26] et commence à vieillir. Il a été montré que ce modèle n'a pas les mêmes symétries qu'un modèle de verres [26], mais sa dynamique dans la phase ordonnée a des points en commun avec un modèle à  $p = 2$  spins [36].

En utilisant les mêmes techniques utilisées pour le modèle à  $p = 2$  spins dans le chapitre 6, on calcule pour ce modèle la fonction de grandes déviations, ou énergie libre dynamique, par rapport à l'observable  $K = -\frac{1}{2} \sum_{\mu} \phi_{\mu}^2$ , on analyse le diagramme des phases dynamiques du système, et discute l'interprétation des résultats.

## A.1 Application du formalisme thermodynamique des histoires

On procède comme en section 6.1 en appliquant à ce modèle le formalisme de De Dominicis *et al* [34]. On impose que les spins obéissent à l'équation de Langevin :

$$\partial_t \sigma_i = -\frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i} + \xi_i(t) \quad \text{avec} \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t-t') \quad \text{et} \quad \langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad (\text{A.2})$$

à travers laquelle la fonction de partition du système s'écrit :

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\bar{\sigma} \exp\left(-\int dt \sum_i \bar{\sigma}_i (\partial_t \sigma_i + \frac{\delta(\beta H)}{\delta \sigma_i} - \bar{\sigma}_i)\right). \quad (\text{A.3})$$

On diagonalise la matrice des couplages  $J_{ij}$  : cette matrice a tous les éléments égaux à  $J/N$ , donc elle a  $N-1$  valeurs propres nulles et une égale à  $J$ . On effectue une rotation des spins  $\sigma_i = \sum_\gamma \Gamma_{i\gamma} \phi_\gamma$ , où  $\Gamma$  est la matrice orthogonale qui diagonalise  $J_{ij}$ . On force la dynamique à explorer les états- $s$  correspondant à l'activité  $K = -\frac{1}{2} \sum_\mu \phi_\mu^2$ , et donc la fonction de partition  $Z_s = \langle e^{-sK} \rangle$  devient :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \exp\left(-\int dt \sum_\mu (\bar{\phi}_\mu (\partial_t \phi_\mu - \beta J \phi_\mu \delta_{\mu,N} + \frac{4u}{N} \sum_\nu \phi_\nu^2 \phi_\mu - \bar{\phi}_\mu)) - \frac{s}{2} \phi_\mu^2\right). \quad (\text{A.4})$$

En suivant la démarche de la section 6.1.1 on définit les quantités stationnaires :

$$\chi(s) = \frac{1}{N} \sum_\mu \langle \phi_\mu^2 \rangle_s, \quad (\text{A.5})$$

$$\bar{\chi}(s) = \frac{1}{N} \sum_\mu \langle \phi_\mu \bar{\phi}_\mu \rangle_s, \quad (\text{A.6})$$

en termes desquelles la fonction de partition devient

$$Z = e^{8uN \int \bar{\chi} \chi} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S_s} / \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S_0}, \quad (\text{A.7})$$

avec  $S_s$  donnée par

$$S_s = \int \sum_\mu \left[ \bar{\phi}_\mu (\partial_t + 4u\chi - \beta J \delta_{\mu,N}) \phi_\mu - \bar{\phi}_\mu^2 - \left(\frac{s}{2} - 4u\bar{\chi}\right) \phi_\mu^2 \right]. \quad (\text{A.8})$$

## A.2 Diagramme des phases

Dans cette section on analyse les diagrammes des phases statiques et dynamiques de notre système en utilisant comme paramètre d'ordre la susceptibilité dans l'état- $s$ .

Les équations pour la valeur stationnaire de  $\bar{\chi}$  et  $\chi$  sont obtenues de façon auto-consistante en évaluant les moyennes des quantités (A.5, A.5) à travers l'action donnée en (A.8). En écrivant les champs en termes de leurs transformées de Fourier, on calcule les moyennes de  $\phi_\mu(\omega)\phi_\mu(-\omega)$  et  $\phi_\mu(\omega)\bar{\phi}_\mu(-\omega)$ , d'où on obtient les valeurs stationnaires de la susceptibilité et de sa partie complexe :

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{(4u\chi)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} + \frac{1}{N} \frac{1}{\sqrt{(4u\chi - J\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (\text{A.9})$$

$$\bar{\chi} = -\frac{1}{2} + \frac{4u\chi}{2\sqrt{(4u\chi)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} - \frac{1}{2N} + \frac{4u\chi - J\beta}{2N\sqrt{(4u\chi - J\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi})}} \quad (\text{A.10})$$

Pour pouvoir passer à la limite pour  $N \rightarrow \infty$  de ces équations il faut que la condition :

$$(4u\chi - \beta J)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}) > 0 \quad (\text{A.11})$$

soit satisfaite pour tout  $s$ . Comme dans le cas du  $p$ -spin la condition (A.11) correspond à la condition pour laquelle le système est dans une phase désordonnée. Le système se trouve dans une phase ordonnée quand le mode  $\mu = N$  correspondant à la valeur propre non-nulle de la matrice de couplage se peuple macroscopiquement, et son poids statistique est dominant dans la fonction de partition. La condition (A.11) devient dans ce cas

$$(4u\chi - \beta J)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (\text{A.12})$$

Ici aussi, dans le cas où  $s < 0$  la condition (A.11) est toujours vérifiée, donc une phase paramagnétique non-triviale est présente aussi dans ce modèle.

### A.2.1 Phases statiques

Les équations (A.9, A.10) pour  $s = 0$  donnent :

$$\chi = \frac{1}{4u\chi} + \frac{1}{N(4u\chi - \beta J)} \quad \text{et} \quad \bar{\chi} = 0 \quad (\text{A.13})$$

avec la condition  $4u\chi(s = 0) - J\beta > 0$ .

Si cette condition est vérifiée on trouve

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{4u}}. \quad (\text{A.14})$$

La transition d'une phase à l'autre a donc lieu à  $\beta_c = \sqrt{4u}/J$ .

Si  $\beta > \beta_c$  on doit considérer l'ordre  $N$  de l'éq. (A.13) en choisissant

$$\chi = \frac{\beta J}{4u} + \frac{\epsilon}{N}, \quad (\text{A.15})$$

qui, inséré en (A.13) donne :

$$\chi(\beta > \beta_c) = \frac{\beta}{\sqrt{4u}\beta_c} + \frac{\beta}{NJ(\beta^2 - \beta_c^2)}. \quad (\text{A.16})$$

Dans la limite thermodynamique la susceptibilité est donc continue au point critique. En taille finie la susceptibilité diverge au point critique.

## A.2.2 Transition de phase dynamique

On analyse la dynamique dans l'état- $s$  du système dans les deux régimes de température.

Dans la phase désordonnée à  $\beta < \beta_c$  on impose que  $s < s_c(\beta)$  où  $s_c(\beta)$  est la solution de l'équation  $(4u\chi(s_c) - J\beta)^2 - 2(s_c - 8u\bar{\chi}(s_c)) = 0$ .

Tant que  $s < s_c(\beta)$  les susceptibilités  $\chi$  et  $\bar{\chi}$  sont la solution de la limite pour  $N$  grand des équations (A.9, A.10) :

$$\chi(s) = \frac{1}{\sqrt{(4u\chi(s))^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s))}} \quad (\text{A.17})$$

$$\bar{\chi}(s) = \frac{2u\chi(s)}{\sqrt{(4u\chi(s))^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s))}} - \frac{1}{2}. \quad (\text{A.18})$$

On trouve :

$$\chi(s) = \frac{\sqrt{s + 4u + \sqrt{s^2 + 8us + 64u^2}}}{4u\sqrt{3}} \quad (\text{A.19})$$

$$\bar{\chi}(s) = \frac{s - 8u + \sqrt{s^2 + 8us + 64u^2}}{24u} \quad (\text{A.20})$$

qui satisfait la condition  $(4u\chi(s))^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s)) > 0$ .

Dans la phase ferromagnétique on doit imposer que :

$$(4u\chi(s) - J\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s)) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (\text{A.21})$$

ce qui fait que le terme correspondant au mode  $\mu = J$  n'est plus d'ordre  $\mathcal{O}(1/N)$  dans les équations (A.9, A.10).

On pose :

$$\chi(s) = \chi_0(s) + \frac{\epsilon(s)}{N} \quad (\text{A.22})$$

$$\bar{\chi}(s) = \bar{\chi}_0(s) + \frac{\bar{\epsilon}(s)}{N} \quad (\text{A.23})$$

où  $\chi_0(s)$  et  $\bar{\chi}_0(s)$  satisfont  $(4u\chi_0(s) - J\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}_0(s)) = 0$ .

En imposant que les termes d'ordre  $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$  dans les éq.s (A.9, A.10) disparaissent on a la contrainte :

$$\bar{\epsilon}(s) = \frac{1}{2}(J\beta - 4u\chi_0(s))\epsilon(s). \quad (\text{A.24})$$

En résolvant le système d'équations dans la limite pour  $s \ll 1$  on obtient

$$\chi_0(s) = \frac{J\beta}{4u} + s \frac{J\beta}{4u(4u - J^2\beta^2)} + s^2 \frac{J\beta(4u + J^2\beta^2)}{8u(4u - J^2\beta^2)^3} \quad (\text{A.25})$$

$$\bar{\chi}_0(s) = s \frac{1}{8u} - s^2 \frac{J^2\beta^2}{16u(4u - J^2\beta^2)^2} \quad (\text{A.26})$$

$$\epsilon(s) = \frac{J\beta}{J^2\beta^2 - 4u} + s \frac{J\beta(J^2\beta^2 + 4u)}{(J^2\beta^2 - 4u)^3} + s^2 \frac{J^3\beta^3(12uJ^2\beta^2)}{(J^2\beta^2 - 4u)^5} \quad (\text{A.27})$$

$$\bar{\epsilon}(s) = s \frac{J^2\beta^2}{2(J^2\beta^2 - 4u)^2} + s^2 \frac{3J^2\beta^2(J^2\beta^2 + 4u)}{4(J^2\beta^2 - 4u)^4}. \quad (\text{A.28})$$

On vérifie que cette solution satisfait  $(4u\chi_0(s) - J\beta)^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}_0(s)) = \mathcal{O}(s^3)$ . En taille finie ou à  $s$  fini ces quantités divergent lorsque  $\beta \rightarrow \beta_c^+$ .

Pour  $s < 0$  la condition (A.11) est toujours vérifiée. Le calcul de la susceptibilité dans cette phase se réduit donc au calcul dans la phase paramagnétique qui donne les expressions (A.19), (A.20). Ce calcul est en effet indépendant de la température, à différence du calcul de la susceptibilité dans la phase paramagnétique non-triviale du  $p = 2$ -spin.

La fonction de grandes déviations de ce système est facilement écrite en intégrant sur les variables de champ la fonction de partition donnée en éq. (A.7), ce qui donne :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\psi_K(s)}{N} = \frac{1}{2}(4u\chi(s) - \sqrt{(4u\chi(s))^2 - 2(s - 8u\bar{\chi}(s))}) + 8u\chi(s)\bar{\chi}(s). \quad (\text{A.29})$$

Cette quantité satisfait la relation donnée en (6.9) entre la susceptibilité et la dérivée de la fonction de partition.

En développant l'expression (A.19) autour de  $s = 0$  on trouve que :

$$\chi(s) = \frac{1}{\sqrt{4u}} + \frac{1}{32u\sqrt{u}} s, \quad (\text{A.30})$$

ce qui montre que pour  $\beta > \beta_c$  la susceptibilité, et donc la dérivée première de la fonction de grandes déviations subit une discontinuité en  $s = 0$ , et une transition de phase dynamique a lieu. En particulier :

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \chi(\beta > \beta_c) > \lim_{s \rightarrow 0^-} \chi(\beta > \beta_c) \quad (\text{A.31})$$

ce qui prouve que dans la phase inactive à  $s < 0$  la solution qui maximise la fonction de grandes déviations est bien la solution ordonnée écrite en (A.25), tandis que dans la phase active à  $s > 0$  la susceptibilité ne dépend pas de la température, et se trouve être la (A.19).

Le diagramme des phases de ce modèle est en tout point équivalent au diagramme du  $p = 2$ -spin représenté en figure 6.1, sauf que la transition qui a lieu à  $s = 0$  pour  $\beta > \beta_c$  est de premier ordre.

# Remerciements

Un simple regard sur mon travail de thèse me suffit pour savoir qui remercier d'abord et surtout : Frédéric van Wijland -Le Chef.

Du début à la fin de cette thèse Frédéric m'a proposé des problèmes intéressants, a discuté avec moi en me stimulant à insister sur une piste ou à aller vers d'autres, m'a permis de choisir, de développer des solutions nouvelles, m'a donné beaucoup de temps là où il n'en avait pas beaucoup, m'a faite participer à des collaborations très fructueuses, m'a pressée pour que je finisse des travaux et les publie en temps utile...autrement dit il a rempli que trop bien son rôle de directeur de thèse, même si je n'ai pas toujours fait de même avec mon rôle de thésarde. De plus son enthousiasme pour la recherche toujours renouvelé et sa curiosité naturelle, ainsi que l'ambiance joyeuse et calme qu'il arrive à créer autour de lui, arrivent à donner envie de faire ce travail abstrait et quelques fois déprimant qu'est le travail du chercheur.

Je remercie également les chercheurs avec lesquels j'ai collaboré, Grégory Schehr, Robert Jack, Estelle Pitard, Juan-P Garrahan, Vivien Lecomte, pour les discussions et les encouragements.

Je remercie cette thèse d'avoir bien voulu assister à la rencontre entre moi et Marco, personne très admirable qui remplit ma vie d'amour, de joie et de motivation, et avec laquelle j'ai eu la chance inouïe de me fusionner.

Je remercie Dino pour sa confiance toujours renouvelée.

Je remercie Vivien pour les discours, les livres, les films, pour l'ambiance werthérienne qu'il crée autour de lui, et surtout pour son soutien et sa disponibilité, eux aussi toujours renouvelés.

Je remercie Camilla pour tous les repas passés ensemble et les discours variés, pour sa présence forte et douce en même temps, pour être une vraie femme et ma copine de bureau.

Je remercie Suzie, Franck, Damien, Gérald, et bon aussi Démosthène, parce qu'ils ont participé à construire les beaux souvenirs que j'ai maintenant du temps passé au laboratoire, et je remercie le laboratoire tout entier.

Je remercie Frédéric pour son humour.

Je remercie Ismaïl et Ilyesse parce que je crois que pendant la thèse ils sont devenus mes amis.

Je remercie Internet et l'État Français qui m'a permis de faire cette thèse en béatitude tandis que partout dans le monde la force de l'injustice jetait des peuples entiers, des espèces entières dans la souffrance.

Je remercie le panorama surréel des immeubles en construction dans le nouveau quartier Paris 13 Rive Gauche surtout au coucher de soleil tandis que la fabrique de nuages éteint l'une de ses cheminées.

Bien sûr je remercie Paris.

# Bibliographie

- [1] G. Adam et J. H. Gibbs, *On the temperature dependence of cooperative relaxation properties in glass forming liquids*, J. Chem Phys. **43**, 139-146 (1965).
- [2] D. Aldous et P. Diaconis, *The asymmetric one-dimensional constrained Ising model rigorous results*, J. Stat. Phys., **107** (5-6), 975 (2002).
- [3] P. Allegrini, J.F. Douglas et S.C. Glotzer, Phys. Rev. E **60**, 5714 (1999), *Dynamic entropy as a measure of caging and persistent particle motion in supercooled liquids*.
- [4] C. A. Angell, *Formation of glasses from liquids and biopolymers*, Science **267**, 1924-1939 (1995).
- [5] C.A. Angell, J. Non-Cryst. Solids **73**, 1 (1985).
- [6] G. Ben Arous, A. Bovier et J. Cerny, *Universality of REM-like aging in mean field spin glasses*, J. Stat. Mech. L04003 (2008).
- [7] G. Ben Arous, A. Bovier et J. Cerny, *Universality of the REM for Dynamics of Mean-Field Spin-Glasses*, Commun. Math. Phys. **282** (3), 663 (2008).
- [8] G. Ben Arous, A. Bovier et V. Gaynard, *Aging in the Random Energy Model* Phys. Rev. Lett. 88, 087201 (2002).
- [9] G. Ben Arous et J. Cerny, *Bouchaud's model exhibits two different aging regimes in dimension one*, Annals of Applied Probability **15** 2, 1161-1192 (2005).
- [10] T.H. Berlin et M. Kac, *The spherical model of a ferromagnet*, Phys. Rev. **86** (6), 821 (1952).
- [11] L. Berthier, G. Biroli, L. Cippelletti, D. El Masri, D. L'Haste, F. Ladieu et M. Pierno, Science **310**, 1797 (2005).

- 
- [12] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, et C. Landim, *Macroscopic fluctuation theory for stationary non-equilibrium states*, J. Stat. Phys. **107** 635 (2002).
- [13] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Phys. Rev. Lett. **94** 030601 (2005), *Current fluctuations in stochastic lattice gases*
- [14] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, J. Stat. Phys. **123** 237 (2006), *Non equilibrium current fluctuations in stochastic lattice gases*
- [15] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, *Large deviations of the empirical current in interacting particle systems*
- [16] K. Binder et A.P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986), *Spin Glasses : Experimental facts, theoretical concepts, and open questions.*
- [17] G. Biroli, J.P. Bouchaud, M. Potters, *Extreme value problems in Random Matrix Theory and other disordered systems*, J. Stat. Mech. **07**, 07019 (2007).
- [18] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92** 180601 (2004), *Current fluctuations in non-equilibrium diffusive systems : an additivity principle*
- [19] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. E **72** 066110 (2005), *Distribution of current in non-equilibrium diffusive systems and phase transitions*
- [20] T. Bodineau and B. Derrida, J. Stat. Phys. **123** 277 (2006), *Current large deviations for asymmetric exclusion processes with open boundaries.*
- [21] J.-P. Bouchaud, J. Physique I (France) **2**, 1705 (1992).
- [22] J.-P. Bouchaud, L. Cugliandolo, J. Kurchan, M. Mézard, *Mode-Coupling Approximations, Glass Theory and Disordered Systems*, Physica A **226**, 243 (1996).
- [23] J.P. Bouchaud et M. Mézard, *Universality classes for extreme value statistics*, J. Phys. A : Math. Gen. **30**, 7997 (1997).
- [24] N. Cancrini, F. Martinelli, C. Roberto et C. Toninelli, *Relaxation times of kinetically constrained spin models with glassy dynamics* J. Stat. Mech. L03001 (2007).
- [25] S. Capaccioli, G. Ruocco, F. Zamponi, J. Phys. Chem. B **112**, 10652 (2008).
- [26] C. Chamon, L.F. Cugliandolo et H. Yoshino, *Fluctuations in the coarsening dynamics of the  $O(N)$  model : are they similar to those in glassy systems ?*, J. Stat. Mech, P01006 (2006).

- 
- [27] F. Corberi, E. Lippiello, and M. Zannetti, Phys. Rev. E **65**, 046136 (2002); F. Corberi, E. Lippiello, and M. Zannetti, J. Stat. Mech. 12007 (2004).
- [28] A. Crisanti et F. Ritort, Philosophical Magazine B **82**, No 2, 143-149 (2002).
- [29] A. Crisanti, F. Ritort, A. Rocco, et M. Sellitto, J. Chem. Phys. **113** (23), 10615 (2000).
- [30] A. Crisanti et H.-J. Sommers, *The spherical p-spin interaction spin glass model : the statics*, Z. Phys. B **87**, 341-354 (1992).
- [31] A. Crisanti, H. Horner et H.-J. Sommers, *The spherical p-spin interaction spin glass model : the dynamics*, Z. Phys. B **92**, 257-271 (1993).
- [32] B. Coluzzi, A. Crisanti, E. Marinari, F. Ritort et A. Rocco, EPJ B **32** (4), 495 (2003).
- [33] L.F. Cugliandolo et D.S. Dean, *Full dynamical solution for a spherical spin-glass model*, J. Phys. A : Math. Gen. **28** 15, 4213-4234 (1995).
- [34] C. de Dominicis, J. Phys. (Paris) Colloq. **1**, C-247 (1976); C. de Dominicis and L. Peliti, Phys. Rev. B **18**, 353 (1978); H.K. Janssen, Z. Phys. B **23**, 377 (1976); R. Bansch, H.K. Janssen and H. Wagner, ibid. **24**, 113 (1976).
- [35] C. De Dominicis, H. Orland et F. Laine, J. Phys. (Paris) **46**, L463 (1985).
- [36] C. De Dominicis et I. Giardinà, *Random fields and spin glasses, a field theory approach*, Cambridge University Press, (2006).
- [37] B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **45**, 79 (1980); B. Derrida, Phys. Rev. B **24**, 2613 (1981).
- [38] M. Doi, J. Phys. A **9**, 1465 (1976); L. Peliti, J. Physique **46**, 1469 (1985).
- [39] C. Donati, F. Douglas, W. Kob, S.J. Plimpton, P.H. Poole et S.C. Glotzer, Phys. Rev. Lett. **80** (11), 2338 (1998); C. Donat, S.C. Glotzer, P.H. Poole, W. Kob et S.J. Plimpton, Phys Rev. E **60** (3), 3107 (1999).
- [40] M. D. Ediger, *Spatially heterogeneous dynamics in supercooled liquids*, Annu. Rev. Phys. Chem. : **51**, 99 (2000).
- [41] D. S. Fisher, P. Le Doussal, C. Monthus *Random Walkers in 1-D Random Environments : Exact Renormalization Group Analysis*, Phys. Rev. E, **59** 4795 (1999).
- [42] E. Follana et F. Ritort, *Evidence of a critical time in constrained kinetic Ising model*, Phys. Rev. B **54** (2), 930 (1996).

- 
- [43] S. Franz, R. Mulet, G. Parisi, *Kob-Andersen model : a non-standard mechanism for the glass transition*, Phys. Rev. E **65** (2), 021506 (2002).
- [44] G.H. Fredrickson et H.C. Andersen, *Kinetic Ising-model of the Glass transition*, Phys. Rev. Lett. **53** (13), 1244 (1984).
- [45] G.H. Fredrickson et H.C. Andersen, *Facilitated kinetic Ising-models and the glass-transition* J. Chem. Phys. **83** (11), 5822 (1985).
- [46] G. Gallavotti et E.G.D. Cohen, *Dynamical Ensembles in Stationary States*, J. Stat. Phys. **80**, 5/6 (1995).
- [47] E. Gardner, *Spin glasses with p-spin interactions*, Nuclear Physics B **257**, 747-765 (1985).
- [48] J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, *Dynamic first-order transition in kinetically constrained models of glasses*, Phys. Rev. Lett. **98** 195702.
- [49] J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, *First-order dynamical phase transition in models of glasses : an approach based on ensembles of histories*, J. Phys. A **42**, 075007 (2009).
- [50] J.P. Garrahan, D. Chandler, *Geometrical explanation and scaling of dynamical heterogeneities in glass forming systems*, Phys. Rev. Lett **89** (3), 035704 (2002).
- [51] P. Gaspard and X.-J. Wang, *Noise, chaos, and  $(\epsilon, \tau)$ -entropy per unit time*, Phys. Rep. **235** 291 (1993).
- [52] P. Gaspard, *Entropy production in open volume-preserving systems*, J. Stat. Phys. **88**, 1215, (1997).
- [53] P. Gaspard, *Chaos, scattering and statistical mechanics*, Cambridge Nonlinear Science Series vol. 9 (Cambridge UP, 1998).
- [54] P. Gaspard, *Time-Reversed Dynamical Entropy and Irreversibility in Markovian Random Processes*, J. Stat. Phys. **117**, 599, (2004).
- [55] C. Giardinà, J. Kurchan and L. Peliti, *Direct evaluation of large-deviation functions*, Phys. Rev. Lett. **96**, 120603 (2006).
- [56] S. Glotzer, *Spatially heterogeneous dynamics in liquids : insights from simulation*, J. Non-cryst. Solids **274**, 342 (2000).
- [57] A.O. Golosov, Commun. Math. Phys. **92**, 491 (1984).

- [58] W. Götze et L. Sjögren, *Relaxation processes in supercooled liquids*, Rep. Prog. Phys. **55** (3), 241 (1992); W. Götze et L. Sjögren, *The mode coupling theory of structural relaxation*, Transp. Theory Stat. Phys. **24** (6-8), 801 (1995).
- [59] M. Goldstein, J. Chem. Phys. **64**, 4767 (1976).
- [60] D.J. Gross et J. Mézard, Nucl. Phys. B **240**, 431 (1984).
- [61] T. Hwa, E. Marinari, K. Sneppen et L. Tang, PNAS **100** 8, 4411-4416 (2003).
- [62] R.L. Jack, J.P. Garrahan et D. Chandler, *Space-time thermodynamics and subsystem observables in a kinetically constrained model of glassy systems*, J. Chem. Phys. **125**, 184509 (2006).
- [63] R. Jack, P. Mayer, P. Sollich, J. Stat. Mech P03006 (2006).
- [64] J. Jäckle, *Models of glass-transition*, Rep. Prog. Phys. **49** (2), 171 (1986).
- [65] J. Jäckle et S. Eisinger, Zeitschr. Phys. B **84** (1), 115 (1991)
- [66] J. Jäckle et A. Krönig, *A kinetic lattice-gas model for the triangular lattice with strong dynamic correlations. 1 : Self-diffusion*, J. Phys. Cond. Matt. **6** (38), 7633 (1994).
- [67] J. Jäckle et A. Krönig, *A kinetic lattice-gas model for the triangular lattice with strong dynamic correlations. 2 : Collective Diffusion*, J. Phys. Cond. Matt. **6** (38), 7655 (1994).
- [68] J. Jäckle, Progress of Theoretical Physics Supplement, **126**, 53 (1997).
- [69] T.R. Kirkpatrick et D. Thirumalai, Phys. Rev. Lett. **58** 20, 2091 (1987); T.R. Kirkpatrick et D. Thirumalai, Phys. Rev. B **36** 10, 5388 (1987).
- [70] W. Kob et H.C. Andersen, *Kinetic Lattice-gas model of cage effects in high-density liquids and a test of mode-coupling theory of the ideal glass transition*, Phys. Rev. E **48** (6), 4364 (1993).
- [71] W. Kob, F. Sciortino et P. Tartaglia, Europhys. Lett. **49** (5), 590 (2000).
- [72] W. Kob, C. Donati, S;J. Plimpton, P.H. Poole et S.C. Glotzer, Phys. Rev. Lett. **79**, 2827 (1997).
- [73] W. Kob et H.C. Andersen, Phys. Rev. E **51**, 4626 (1995); W. Kob et H.C. Andersen, Phys. Rev. E **52**, 4134 (1995).

- [74] A. N. Kolmogorov, Dokl. Acad. Sci. USSR **119**, 861 (1958), *A new metric invariant of transient dynamical systems and automorphisms in Lebesgue spaces*; Dokl. Acad. Sci. USSR **124**, 754 (1959), *Entropy per unit time as a metric invariant of automorphisms*
- [75] G.J.M. Koper et H.J. Hilhorst, *Nonexponential relaxation in the Random Energy Model*, Physica A **160**, 1-23 (1989).
- [76] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless et R.C. Jones, *Spherical model of a ferromagnet*, Phys. Rev. Lett. **36** 20, 1217 (1976).
- [77] L. Santen et W. Krauth, Nature **405**, 550 (2000), *Absence of thermodynamic phase transition in a model glass former*.
- [78] V. Lecomte, *Fluctuations dans les systèmes hors l'équilibre*, Thèse de doctorat (2007).
- [79] V. Lecomte, C. Appert-Rolland and F. van Wijland, *Chaotic properties of systems with Markov dynamics*, Phys. Rev. Lett. **95** 010601 (2005).
- [80] V. Lecomte, C. Appert-Rolland and F. van Wijland, *Thermodynamic formalism for systems with Markov dynamics*, J. Stat. Phys. **127** 51 (2007).
- [81] V. Lecomte and J. Tailleur, *A numerical approach to large deviations in continuous-time*, J. Stat. Mech. P03004 (2007).
- [82] P.C. Martin, E.D. Siggia et H.A. Rose, *Statistical Dynamics of Classical Systems*, Phys. Rev. A **8**, 423-437 (1973).
- [83] L.-M. Martinez et C.A. Angell, *A thermodynamic connection to the fragility of glass-forming liquids*, Nature **410**, 663-667 (2001).
- [84] P. Mayer, P. Sollich, Peter Mayer, Peter Sollich, J. Phys. A **40**, 5823 (2007).
- [85] G. F. Mazenko and M. Zannetti, Phys. Rev. Lett. **53**, 2106; Phys. Rev. B **32**, 4565 (1985). A. Coniglio and M. Zannetti, Europhys. Lett. **10** 575 (1989). A. Coniglio, P. Ruggiero, and M. Zannetti, Phys. Rev. E **50**, 1046 (1994).
- [86] M. Merolle, J.P. Garrahan et D. Chandler, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **102**, 10837 (2005).
- [87] M. Mezard et G. Parisi, J. de Phys. I **1**, 809 (1991).
- [88] M. Mezard et G. Parisi, J. Phys.Chem. **111**, 1076 (1999).

- 
- [89] M. Mezard, G. Parisi et M.A. Virasoro, *Random free energies in spin glasses*, J. de Physique Lett. **46**, L217 (1985).
- [90] C. Monthus, J.-P. Bouchaud, *Models of traps and glass phenomenology*, J. Phys. A **29** 3847 (1996).
- [91] C. Monthus, *Anomalous diffusion, Localization, Aging and Sub-aging effects in trap models at very low temperature*, Phys. Rev. E **68**, 036114 (2003).
- [92] C.T. Moynihan et al., Ann. N. Y. Acad. Sci. **279**, 15 (1976).
- [93] M.A. Muñoz, A. Gabrielli, H. Inaoka et L. Pietronero, Phys. rev. E **57** (4), 4354 (1998).
- [94] L. Onsager et S. Machlup, *Fluctuations and irreversible processes, I, II*, Phys. Rev. **91**, 1505-1512, 1512-1515 (1953).
- [95] A.C. Pan, J.P. Garrahan et D. Chandler, Phys. Rev. E **72**, 041106 (2005).
- [96] D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, 1978, Addison-Wesley, Reading (Mass.).
- [97] B. Rinn, P. Maass et J.-P. Bouchaud, Phys. Rev. Lett. **84**, 5403 (2000).
- [98] F. Ritort et P. Sollich, Advances in Physics **52**, 219-342 (2003), *Glassy dynamics of kinetically constrained models*.
- [99] F. Ritort, *Universal dependence of the fluctuation-dissipation ratio on the transition rates in trap models*, Journal of Physics A (Math. Gen.) **36**, 10791 (2003).
- [100] E.V. Russell et N.E. Israeloff, Nature **408**, 695 (2000).
- [101] R. Schiener, R. Bahmer, A. Loidl et R.V. Chamberlin, Science **274**, 752 (1996); W. Kob, C. Donati, S.J. Plimpton, P.H. Poole et S.C. Glotzer, Phys. Rev. Lett. **79**, 2827 (1997); R. Bahmer et al., J. Non-Cryst. Solids **235**, 1 (1998).
- [102] R.H. Schonmann, *On the behavior of some cellular automata related to bootstrap percolation*, Ann. Probab., **20** (1), 174 (1992).
- [103] H. Sillescu, J. Non-Cryst. Solids **243**(2-3), 81 (1999).
- [104] Ya.G. Sinai, Dokl. Acad. Sci. USSR **124**, 768 (1959), *On the concept of entropy for a dynamic system*
- [105] F.H. Stillinger et T.A. Weber, Phys. Rev. A **25** (2), 978 (1982).
- [106] U. Tracht et al. Phys. Rev. Lett. **81**, 2727-2730 (1998), *Length scale of dynamic heterogeneities at the glass transition determined by multidimensional nuclear magnetic resonance*.

- 
- [107] W. Kob, F. Sciortino et P. Tartaglia, *Europhys. Lett.* **49** (5), 590 (2000) ; F. H. Stillinger, *Phys. Rev. E* **52** (5PtA), 4685 (1995).
- [108] C. Toninelli, M. Wyart, L. Berthier, G. Biroli et J. Bouchaud, *Phys. Rev. E* **71**, 041505 (2005), *What do we learn from the shape of the dynamical susceptibility of glass-formers ?*
- [109] C. Toninelli, G. Biroli, S.D. Fisher, *Cooperative Behavior of Kinetically Constrained Lattice Gas Models of Glassy Dynamics*, *Journal of Statistical Physics* **120** (1-2), 167 (2004).
- [110] K. van Duijvendijk, G. Schehr et F. van Wijland, *Slow relaxation, dynamic transitions and extreme value statistics in disordered systems*, *Phys. Rev. E* **78**, 011120 (2008).
- [111] K. van Duijvendijk, R. Jack et F. van Wijland, *Second-order dynamic transition in a disordered and soft  $p = 2$ -spin model*, cond-mat 0905.4878, soumis.
- [112] E.R. Weeks, J.L. Crocker, A.C. Levitt, A. Schofield et D.A. Weitz, *Science* **287**, 627-629 (2000).
- [113] S. Whitelam, L. Berthier et J.P. Garrahan, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 185705 (2004).
- [114] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Éditions Clarendon Press - Oxford (1993).

# Publications

- P1** J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, *Dynamic first-order transition in kinetically constrained models of glasses*, Phys. Rev. Lett. **98** 195702 (2007).
- P2** K. van Duijvendijk, G. Schehr et F. van Wijland, *Slow relaxation, dynamic transitions and extreme value statistics in disordered systems*, Phys. Rev. E **78**, 011120 (2008).
- P3** J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, *First-order dynamical phase transition in models of glasses : an approach based on ensembles of histories*, J. Phys. A **42**, 075007 (2009).
- P4** R. Jack, K. van Duijvendijk et F. van Wijland, *Second-order dynamic transition in a disordered and soft  $p = 2$ -spin model*, cond-mat 0905.4878 (2009).