

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
1.1	Les systèmes désordonnés : éléments communs et exemples . . . . .	5
1.1.1	Frustration et événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre . . . . .	6
1.2	Aspects des systèmes désordonnés analysés dans cette thèse . . . . .	9
1.2.1	Les systèmes à connectivité finie . . . . .	9
1.2.2	La dynamique . . . . .	11
1.3	Résumé du travail de thèse . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Introduction aux systèmes à connectivité finie</b>	<b>15</b>
2.1	La méthode des répliques pour les systèmes à connectivité finie . . . . .	15
2.1.1	Le paramètre d'ordre $c(\vec{\sigma})$ . . . . .	15
2.1.2	Interprétation physique de $c(\vec{\sigma})$ . . . . .	18
2.1.3	Champs effectifs et Ansatz à un pas de brisure de la symétrie des répliques . . . . .	19
2.1.4	Hamiltonien effectif . . . . .	21
2.2	Les verres de spins sur des réseaux aléatoires . . . . .	23
2.2.1	Quelques propriétés des graphes aléatoires . . . . .	23
2.2.2	Généralisations : systèmes à connectivité finie ou dilués . . . . .	25
2.3	Quelques applications simples . . . . .	26
2.3.1	Phase de haute température du modèle de Viana et Bray . . . . .	26
2.3.2	Phase de Griffiths et hétérogénéités . . . . .	28
2.3.3	Méthode variationnelle et fluctuations de la connectivité . . . . .	31
2.3.4	Etats fondamentaux et minima de l'énergie . . . . .	32
2.4	Conclusion . . . . .	34
<b>3</b>	<b>Transitions de phase en informatique</b>	<b>35</b>
3.1	Introduction . . . . .	35
3.2	Un panorama des différentes approches aux problèmes d'optimisation . . .	37
3.2.1	Une introduction informelle à la théorie de la complexité computationnelle . . . . .	37
3.2.2	Deux approches différentes : le pessimiste et le pragmatique . . . .	40
3.2.3	Les algorithmes . . . . .	41

3.3	Introduction au problème de la satisfiabilité . . . . .	42
3.3.1	Définition du problème . . . . .	42
3.3.2	Simulations numériques et résultats mathématiques . . . . .	43
3.3.3	La théorie RS . . . . .	46
3.4	Approche variationnelle et brisure de la symétrie des répliques . . . . .	51
3.4.1	L'analyse RS . . . . .	51
3.4.2	L'analyse RSB . . . . .	54
3.4.3	Image de la K-SAT donnée par le calcul variationnel . . . . .	57
3.5	Discussion et conclusion . . . . .	58
3.6	Annexe I : dérivation de l'équation RS avec la cavité . . . . .	60
<b>4</b>	<b>Désordre géométrique et localisation</b>	<b>65</b>
4.1	Introduction . . . . .	65
4.1.1	Définition du modèle . . . . .	66
4.1.2	Motivations . . . . .	68
4.2	Analyse du modèle . . . . .	70
4.2.1	Simulations numériques . . . . .	70
4.2.2	Lien entre localisation et défauts géométriques : un argument simple	72
4.2.3	Théorie du milieu effectif et approximation à un défauts . . . . .	74
4.2.4	Un approche générale : théorie des liquides à $d + n$ dimensions . . .	78
4.3	Discussion et conclusion . . . . .	79
<b>5</b>	<b>La phase vitreuse et les verres de spins discontinus : analyse de la relation entre structures inhérentes et états purs</b>	<b>81</b>
5.1	Introduction . . . . .	81
5.1.1	La transition vitreuse . . . . .	81
5.1.2	Analogie avec les verres de spins généralisés . . . . .	84
5.2	La phase vitreuse et l'image à plusieurs bassins . . . . .	87
5.2.1	Les structures inhérentes et l'entropie configurationnelle . . . . .	87
5.2.2	Les états TAP et la complexité . . . . .	89
5.2.3	Au-delà des analogies . . . . .	91
5.3	Différences entre états purs et structures inhérentes . . . . .	91
5.3.1	L'entropie configurationnelle et la complexité . . . . .	91
5.3.2	États purs à température nulle et configurations infiniment stables .	93
5.4	Discussion . . . . .	95
5.5	Conclusion . . . . .	97
<b>6</b>	<b>Le paysage de l'énergie libre et la dynamique à grands temps</b>	<b>99</b>
6.1	Introduction . . . . .	99
6.2	Relation entre les échelles de temps les plus longues et l'énergie libre . . . .	100
6.2.1	Analogie avec un problème quantique . . . . .	100
6.2.2	L'approximation grand spin (large S) . . . . .	101
6.2.3	Discussion . . . . .	104

6.3	L'approche TAP dynamique . . . . .	104
6.3.1	Les équations TAP dynamiques . . . . .	105
6.3.2	Analyse asymptotique des équations TAP dynamiques . . . . .	109
6.3.3	Paysage d'énergie exploré pendant l'évolution dynamique . . . . .	110
6.4	Conclusion . . . . .	111
<b>7</b>	<b>Etats métastables dans les systèmes vitreux</b>	<b>113</b>
7.1	Introduction . . . . .	113
7.2	Définition dynamique d'état métastable . . . . .	114
7.2.1	Exemples et remarques simples . . . . .	115
7.2.2	Définition mathématique . . . . .	117
7.2.3	Moyenne uniforme sur les états métastables . . . . .	118
7.3	Analyse d'un modèle de champ moyen . . . . .	119
7.3.1	Quelques détails techniques . . . . .	119
7.3.2	Caractéristiques de la solution dynamique et résultats . . . . .	121
7.3.3	Brisure de la symétrie des répliques à la Bray et Moore et brisure de supersymétrie. . . . .	123
7.4	Conclusion . . . . .	125
	<b>Bibliographie</b>	<b>129</b>
<b>9</b>	<b>Chapitre des publications</b>	<b>139</b>
	Publication 1 : A Variational description of the ground state structure in random satisfiability problems . . . . .	140
	Publication 2 : A single defect approximation for localized states on random lattices . . . . .	159
	Publication 3 : From inherent structures to pure states : Some simple remarks and examples . . . . .	169
	Publication 4 : Relationship between long timescales and the static free-energy in the Hopfield model . . . . .	179
	Publication 5 : Dynamical TAP approach to mean field glassy systems . . .	187
	Preprint 1 : Metastable states in glassy systems . . . . .	213
	Compte-rendu 1 : The role of the free energy landscape in the dynamics of mean field glassy systems . . . . .	237



# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Les systèmes désordonnés : éléments communs et exemples

Au cours de cette thèse je me suis intéressé à différents aspects de la physique des systèmes désordonnés. Il me semble donc approprié de rappeler leurs éléments caractéristiques avant de décrire les travaux effectués.

Les systèmes désordonnés sont en général caractérisés par une séparation d'échelles de temps entre degrés de liberté rapides et lents. Lorsque les échelles de temps de ces derniers sont beaucoup plus grandes que celles expérimentales les degrés de liberté lents peuvent être considérés comme *gelés* dans une configuration particulière, dépendante de l'échantillon considéré. La thermodynamique de ces systèmes peut être étudiée en utilisant la distribution de Boltzmann seulement pour les degrés de liberté rapides et en considérant les autres comme des paramètres dépendants de l'échantillon. En général les observables thermodynamique, comme par exemple l'énergie, ont une limite thermodynamique indépendante de l'échantillon. Cette propriété, appelée d'auto-moyennage, est utilisée pour analyser la thermodynamique de ces systèmes. En effet, puisque il est en général impossible de calculer une observable macroscopique pour un échantillon donné, en s'appuyant sur la propriété d'auto-moyennage on calcule la moyenne de l'observable sur tous les échantillons. D'un point de vue de mécanique statistique on se ramène donc à l'étude d'un système caractérisé par un nombre extensif de paramètres, qui correspondent aux degrés de liberté lents et qui peuvent être considérés comme des variables aléatoires, dont la distribution est déterminée par la probabilité qu'une certaine configuration des paramètres se réalise pour un échantillon donné. Pour cette raison ces systèmes sont appelés *désordonnés avec du désordre gelé*.

Un exemple très étudié, que nous considérerons dans cette thèse, est celui des verres de spins [1, 2, 3, 4]. Ces systèmes sont formés par des ions magnétiques couplés par des interactions aléatoires. Un exemple physique est celui des métaux nobles dilués avec des ions magnétiques. Dans ce cas les ions magnétiques sont figés aléatoirement dans la matrice métallique. Par conséquent leur interaction mutuelle, dont l'intensité et le signe dépendent de leur distance, devient une variable aléatoire.

Un autre exemple, qui nous intéressera dans la suite, est celui de la propagation d'une onde classique ou d'une particule quantique dans un milieu désordonné. Dans ce cas on s'intéresse aux propriétés de transmission de l'onde ou aux propriétés des états propres de la particule quantique.

Il y a aussi des systèmes, comme les verres, pour lesquels on dit que *le désordre est auto-induit*<sup>1</sup> par la dynamique : en refroidissant suffisamment un liquide le temps de relaxation structurelle devient tellement grand, à une certaine température, que le liquide n'arrive plus à équilibrer dans les échelles de temps de l'expérience et le système devient un matériau rigide amorphe (appelé verre). La différence entre les systèmes caractérisés par un désordre gelé et les systèmes désordonnés, tels que les verres, est que pour ces derniers on ne peut pas séparer a priori les degrés de liberté lents, qui se gèlent à basse température, de ceux rapides.

Dans la sous-section suivante je présenterai les éléments, qui à mon avis caractérisent plus les systèmes désordonnés. Ensuite, je développerai les deux aspects des systèmes désordonnés sur lesquels cette thèse est axés. Enfin, dans la section (1.3) je résumerai le travail de thèse.

### 1.1.1 Frustration et événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre

En général l'énergie d'un système est constituée d'une somme de contributions locales et souvent pour les systèmes ordonnés les minima de l'énergie peuvent être obtenus en minimisant simultanément chaque contribution locale à l'énergie. Par exemple pour trouver les états fondamentaux du modèle d'Ising, on peut d'abord demander que chaque interaction soit satisfaite, ce qui implique que des spins voisins doivent être orientés dans la même direction. Ensuite en imposant que tous les contributions locales à l'énergie soient satisfaites simultanément on obtient les deux états fondamentaux avec tous les spins égaux à  $+1$  ou  $-1$ .

Dans le cas des systèmes désordonnés le paysage d'énergie est en général très irrégulier. Souvent les minima absolus ne peuvent pas être obtenus avec la procédure précédente puisque il n'y a aucune configuration qui satisfait toutes les interactions simultanément. Ce phénomène, appelé *frustration*, peut être décrit en considérant un système de quatre spins d'Ising sur un carré ayant trois interactions égales à  $+1$  et une égale à  $-1$ , voir fig. 1.1. Dans ce cas il est clair qu'il n'y a aucune façon de satisfaire simultanément toutes les interactions. De façon générale les états fondamentaux d'un système désordonné sont des configurations pour lesquelles le nombre d'interactions non satisfaites est le plus petit possible (si les interactions peuvent avoir beaucoup de valeurs possibles, ce qui est le cas général, il faut alors minimiser le nombre d'interactions non satisfaites en tenant compte

---

<sup>1</sup>La distinction entre *désordre auto-induit* et *désordre gelé* fait référence aux modèles théoriques, qui sont a priori désordonnés pour les verres de spins et non désordonnés pour les verres, plutôt qu'à une réelle différence physique. En effet, dans les deux cas le désordre est toujours induit par un refroidissement du système.

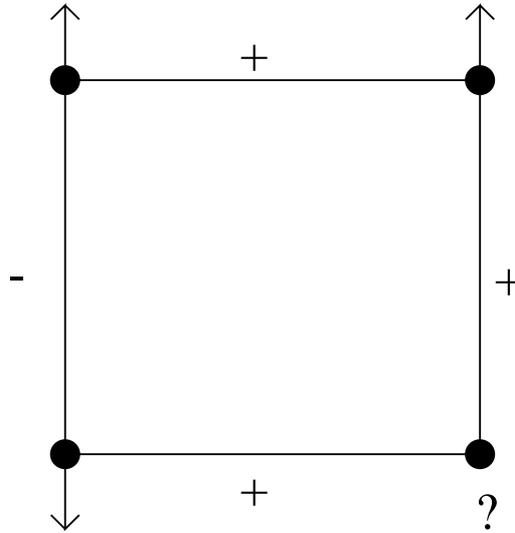


FIG. 1.1 – Quatre spins d’Ising sur un carré avec trois interactions égale à  $+1$  et une égale à  $-1$ . Il y a huit états fondamentaux, chacun caractérisé par une interaction non satisfaite, i.e. *frustrée*.

de leurs valeurs) : trouver les états fondamentaux d’un système désordonnés peut être par conséquent un problème d’optimisation très compliqué. En outre, la frustration implique que l’état fondamental d’un système peut être très dégénéré ou quasi-dégénéré. Par exemple pour le système à quatre spins en fig. 1.1 on obtient 8 états fondamentaux avec énergie égale à  $-2$ .

Le deuxième élément, qui à notre avis est caractéristique des systèmes désordonnés, est la présence des événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre. Ces événements rares peuvent avoir des conséquences très importantes sur la physique des systèmes désordonnés. Deux exemples sont les queues de Lifshitz [5] et les singularités de Griffiths [6]. Le premier phénomène intervient dans l’étude d’une particule quantique dans un milieu désordonné. Ce milieu induit sur la particule un potentiel aléatoire qui, avec une probabilité faible, peut devenir très attractif et donner lieu à des états liés, localisés dans certaines régions de l’espace. Lifshitz a montré que les états quantiques avec les énergies les plus basses sont de ce type : localisés dans une région de l’espace à la place d’être étendus sur tout le système comme cela arrive pour les systèmes invariants par translation. Un exemple similaire, qui est lié aux singularités de Griffiths, concerne la dynamique d’un modèle d’Ising ferromagnétique aléatoire (les couplages sont aléatoires, mais tous positifs). Dans ce cas, si la distribution des couplages a un support sur l’axe réel positif alors la dynamique à grands temps, même à des températures plus grandes que la température de transition, est caractérisée par une relaxation anormalement lente [7, 8]. Ceci est dû à la présence de régions rares induisant des temps de relaxation anormalement longs. En effet, à n’importe quelle température il existe avec probabilité finie (mais faible) une portion finie de l’espace ayant des valeurs des couplages très positives. Dans ces régions le système est

localement ordonné et donc le temps de relaxation le plus long est de l'ordre de  $2e^{cL^{d-1}}$ , où  $L$  est la taille de la région considérée et  $d$  est la dimension de l'espace. La probabilité (par site) qu'une région de ce type existe est de l'ordre  $e^{-c'L^d}$ . Par conséquent avec une probabilité très faible il peut y avoir des régions extrêmement grandes ( $L \gg 1$ ) caractérisées par des temps de relaxation extrêmement longs; ceci donne lieu à un ralentissement de la dynamique.

La frustration et les événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre jouent un rôle très important dans l'analyse théorique des systèmes désordonnés. A ce propos, le cas des verres de spins est emblématique. La modélisation de ces systèmes fut introduite par Edwards et Anderson [9]. Le modèle qui porte leurs noms est un système de spins sur réseau cubique interagissant à travers des couplages aléatoires, qui sont des variables gelées gaussiennes indépendantes. Souvent une simplification ultérieure consiste à considérer des spins d'Ising  $S_i$  (pouvant prendre seulement les valeurs  $+1$  ou  $-1$ ). Le hamiltonien du modèle résultant est égal à :

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{i,j} S_i S_j \quad (1.1)$$

où la notation  $\sum_{\langle ij \rangle}$  dénote une somme sur les plus proches voisins et les couplages  $J_{ij}$  sont des variables aléatoires gelées de distribution gaussienne.

L'analyse de ce modèle n'est pas encore achevée; en particulier son comportement physique reste sujet à controverse. Les deux approches analytiques qui ont été développées pour l'étudier sont la théorie de champ moyen et les théories d'échelle. Ces deux approches sont chacune axées principalement sur un seul de deux éléments caractéristiques des systèmes désordonnés que nous avons présentés auparavant : la théorie de champ moyen sur la frustration et les théories d'échelles sur les événements rares dûs aux fluctuations du désordre. En particulier, l'approche de champ moyen consiste à étudier une généralisation du modèle d'Edwards et Anderson, qui a été introduite par Sherrington et Kirkpatrick (SK) [10]. Le hamiltonien du modèle SK est le suivant :

$$H = - \sum_{i < j} J_{i,j} S_i S_j \quad (1.2)$$

où les couplages  $J_{ij}$  sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes de moyenne nulle et variance  $J^2/N$ , où  $N$  est le nombre de spins. Il est important de remarquer que dans le hamiltonien (1.2) chaque spin interagit avec tous les autres; les systèmes caractérisés par cette propriété sont appelés complètement connectés et sont en général suffisamment simples pour être étudiés analytiquement [2, 3, 4, 11]. Leur analyse a montré que la quasi-dégénérescence des états fondamentaux, induite par la frustration, peut donner lieu à l'existence d'un grand nombre de phases (états purs). La thermodynamique et la dynamique de (1.2) peuvent être alors comprises et expliquées en termes de recouvrements entre états, du nombre d'états avec une certaine énergie libre, . . . [2, 3, 4, 11]. Malheureusement, la

---

$2e^{cL^{d-1}}$  est le temps caractéristique pour retourner un amas ordonné de taille  $L$ .

procédure qui consiste à prendre en compte les corrections au champ moyen se révèle être d'une complexité énorme [12]. Pour cette raison l'extension de ces résultats à la dimension trois n'a pas été possible jusqu'à maintenant.

Parallèlement différents auteurs [13, 14, 15, 16, 17] ont développé des théories d'échelle pour décrire le comportement physique du modèle d'Edwards et Anderson à trois dimensions. Ces théories, qui au moins dans leur version plus simple sont basées sur l'existence de deux états fondamentaux et sur les lois d'échelle, fournissent une image physique dans laquelle la thermodynamique est décrite en terme d'excitations locales, appelées gouttelettes ("droplets"), où les spins sont dans l'état retourné par rapport à l'état fondamental, et la dynamique est présentée comme une croissance de domaines. Par exemple, Fisher et Huse [15] proposèrent une description de la dynamique d'équilibre similaire à celle que nous avons rappelée pour le modèle d'Ising ferromagnétique aléatoire, la différence entre ces deux cas étant que pour les systèmes ferromagnétiques la probabilité de trouver des régions avec une relaxation anormalement lente est exponentiellement faible en  $\ln t$ , tandis que pour les verres de spins cette probabilité décroît comme une loi de puissance en  $\ln t$ . Ces deux approches semblent donner une description assez différente de la physique des verres de spins. Cependant, il est intéressant de remarquer que des résultats numériques récents [18], concernant les propriétés des excitations en fonction de leur taille, semblent suggérer qu'une réconciliation des deux méthodes est peut être possible.

## 1.2 Aspects des systèmes désordonnés analysés dans cette thèse

### 1.2.1 Les systèmes à connectivité finie

Les modèles de verre de spins complètement connectés sont d'un point de vue théorique très intéressants parce qu'ils peuvent être étudiés analytiquement. Cependant, ils fournissent une image physique dans laquelle les effets dûs aux événements rares associés aux fluctuations spatiales du désordre, qui sont sûrement très importantes pour les systèmes en dimension finie, sont complètement absents. La cause principale est que la connectivité infinie ne permet pas d'avoir un comportement très différent de spin à spin.

Dans cette thèse, afin d'étendre et mieux comprendre les résultats obtenus pour les systèmes complètement connectés, et aussi pour introduire dans l'approche de champ moyen les événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre, j'ai analysé certains aspects de la physique des systèmes à connectivité finie, dits dilués. Ces modèles sont intermédiaires entre ceux complètement connectés et ceux en dimension finie, voir fig. 1.2 (un exemple de ces systèmes est un verre de spins, avec hamiltonien du type (1.1), défini sur un graphe aléatoire à connectivité fixe  $c$ , c'est-à-dire sur un ensemble de points connexe par arêtes, et tel que chaque point ait une connectivité<sup>3</sup>  $c$ ). D'une part, comme les modèles complètement connectés les systèmes à connectivité finie se ramènent à travers la méthode des répliques à

---

<sup>3</sup>Localement un graphe aléatoire à connectivité fixe est équivalent à un arbre de Cayley.

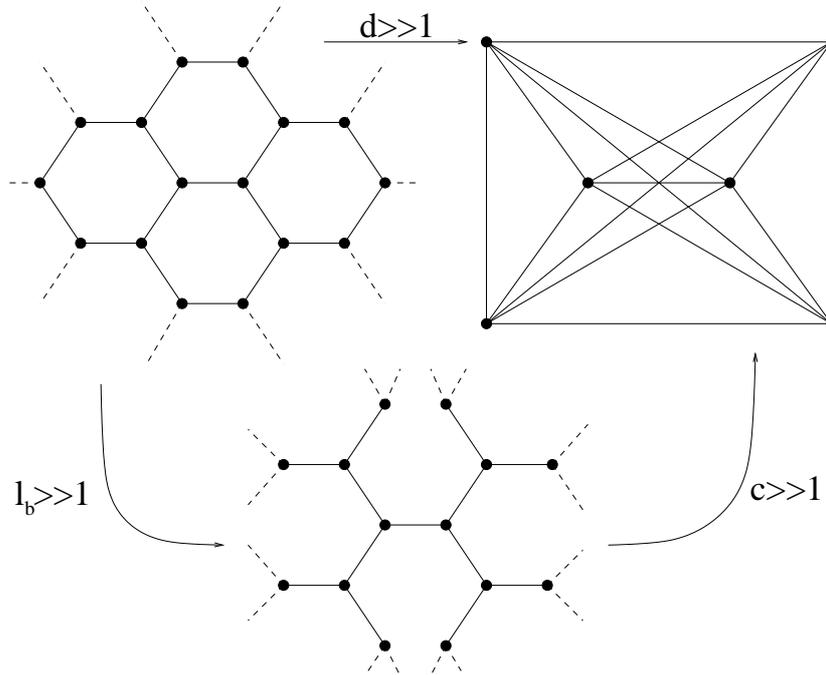


FIG. 1.2 – Pour montrer la différence entre systèmes en dimension finie, à connectivité finie et complètement connectés, on a dessiné une portion de réseau hexagonal à deux dimension, de graphe aléatoire à connectivité fixe (égale à trois) et de réseau complètement connecté. On peut remarquer que le réseau hexagonal et le graphe aléatoire se ressemblent localement, la différence entre les deux systèmes est que le premier est caractérisé par des boucles de longueur ( $l_b$ ) finie, tandis que le deuxième non. Le réseau complètement connecté peut être obtenu à partir des deux réseaux précédents comme une déformation de dimension ( $d$ ) infinie ou de connectivité ( $c$ ) infinie.

*un problème à un spin auto-cohérent* et pour cette raison sont à priori exactement solubles. D'autre part, puisque chaque spin a une connectivité finie et les couplages sont d'ordre un, ces systèmes montrent des effets dûs aux événements rares associés aux fluctuations spatiales du désordre, comme par exemple la localisation [19, 20] (et chapitre 4), et la phase de Griffiths [21] (et chapitre suivant), qui sont absents dans leur correspondants complètement connectés.

De plus, le comportement de basse température de ces modèles s'est révélé être très important pour la théorie de l'optimisation. En effet comme nous avons remarqué dans la sous-section précédente trouver l'état fondamental d'un verre de spins peut être vu comme un problème d'optimisation. Cette remarque naïve cache un lien profond, découvert il y a quinze ans [22, 23], entre la théorie des verres de spins et les problèmes d'optimisation. En fait, beaucoup de problèmes très étudiés en théorie de l'optimisation et en informatique théorique peuvent être réécrits et étudiés en terme de l'analyse de basse température de modèles à *connectivité finie*. Ceci est donc un motif en plus pour analyser et comprendre la physique de ces systèmes.

## 1.2.2 La dynamique

Les systèmes désordonnés sont en général caractérisés par une dynamique hors-équilibre à basse température. Par conséquent d'un point de vue tant théorique qu'expérimental, la dynamique est un des aspects plus importants et intéressants de ces systèmes.

Dans cette thèse je me suis intéressé à l'étude de la dynamique des modèles en champ moyen, qui, même s'ils sont une version très simplifiée des systèmes en dimension finie, montrent des effets très intéressants [11]. En particulier il a été découvert que ces modèles, à basse température, restent toujours hors équilibre, et la dynamique aux grands temps est caractérisée par une séparation d'échelle de temps et par le vieillissement (c'est-à-dire que plus le temps passe plus les degrés de libertés lents évoluent lentement)<sup>4</sup>, comme pour les systèmes vitreux réels. De plus, la dynamique hors équilibre de ces systèmes est caractérisée par une généralisation du théorème de fluctuation et dissipation [25]. Différentes simulations numériques ont montré que cette généralisation semble être réalisée dans beaucoup systèmes désordonnés en dimension finie [11]!

Pendant ma thèse j'ai étudié la dynamique de certains systèmes désordonnés en champ moyen d'une part dans le but de mieux comprendre le comportement de ces modèles et d'autre part pour analyser leurs limitations et chercher à aller au-delà de l'approche de champ moyen.

## 1.3 Résumé du travail de thèse

De nombreuses études ont porté sur la thermodynamique [1, 3, 2, 4] et la dynamique [11] des systèmes désordonnés complètement connectés, et tout particulièrement de certain modèles spécifiques, qui ont suscité beaucoup d'intérêt comme le modèle à p-spins sphériques [26, 27]. Ceci n'est pas le cas des systèmes à connectivité finie. Par conséquent dans le chapitre 2, je présente une introduction à ce type de systèmes, en particulier aux systèmes de spins à connectivité finie. Cette introduction ne se veut pas exhaustive, mais vise plutôt à présenter les techniques développées pour étudier ces modèles, et à montrer des applications simples, qui permettent de dévoiler leur richesse physique et les différences par rapport à leurs correspondants complètement connectés. Dans ce chapitre je présente des dérivations originales de résultats déjà connus, mais aussi (s'il n'y a aucune référence) des résultats non publiés que j'ai obtenu pendant ma thèse.

Le chapitre 3 contient d'abord une introduction au lien entre les problèmes d'optimisation et la physique statistique. En particulier je présente une introduction à la recherche effectuée en optimisation, avec un prédilection particulière pour son côté plus théorique. Ensuite je rappelle les résultats mathématiques, numériques et "physiques" obtenus jusqu'à maintenant pour la K-SAT, qui est un des problèmes clef en optimisation. Enfin, je présente le travail "A variational description of the ground state structure in random

---

<sup>4</sup>Plus précisément, le vieillissement est relié à l'existence d'une fonction de corrélation  $C(t, t')$  qui ne devient pas une fonction seulement de  $t - t'$  même quand  $t' \gg 1$ . Par exemple, dans le cas de la croissance de domaines [24], la fonction d'auto-corrélation s'écrit comme  $C(t, t') \simeq C_{eq}(t - t') + C_{h-eg}(t/t')$  quand  $t, t' \gg 1$ .

satisfiability problems”, qui a donné lieu à la publication I : en utilisant la méthode des répliques et une approche variationnelle, nous avons pu étudier le régime où la symétrie des répliques est brisée, en dévoilant une structure riche de l’espace des solutions et en améliorant les résultats quantitatifs obtenus jusqu’à maintenant.

Le chapitre 4 présente une étude des effets de localisations induits par un désordre géométrique. Plus, précisément nous avons étudié les propriétés spectrales de l’opérateur de la diffusion sur un graphe aléatoire grâce à une approximation, que nous avons appelée “à un défaut”. Nous avons trouvé un lien entre les défauts géométriques et la localisation et en plus nous avons développé un cadre mathématique qui pourrait permettre d’étendre notre analyse à l’étude des modes instantanées de vibration des liquides. Ceci a donné lieu à la publication II : “A single defect approximation for localized states on random lattices”.

Nous remarquons que les systèmes à connectivité finie, qui en principe sont exactement solubles, donnent lieu en pratique à des équations auto-cohérentes trop compliquées pour pouvoir être résolues analytiquement. Par conséquent les techniques développées et utilisées dans les publications I et II sont d’intérêt général pour l’analyse des systèmes désordonnés à connectivité finie, comme nous montrons, sur des exemples simples, dans le chapitre 2.

Le chapitre 5 présente, d’abord, une brève introduction aux caractéristiques des verres structuraux, et à l’analogie entre ces systèmes physiques et les modèles des verres de spins généralisés. Nous montrons en particulier que cette analogie est basée sur la correspondance entre le concept d’état pur ou état TAP et celui de structure inhérente. Ensuite, nous étudions dans les détails la relation qui existe entre ces deux notions. Ceci d’une part permet de comprendre comment certains concepts, comme celui d’état TAP, qui interviennent pour les modèles complètement connectés s’étendent en dimension finie ou à des systèmes à connectivité finie ; d’autre part ceci nous permet aussi de dévoiler les points faibles de l’analogie précédente, et de montrer que pour obtenir une théorie de la phase vitreuse (en dimension finie) basée sur l’analogie avec les verres de spins généralisés il est nécessaire d’introduire une définition “temporelle” d’état. Ce travail a donné lieu à la publication III : “From inherent structures to pure states : some simple remarks and examples”.

Le chapitre 6 présente deux travaux différents concernant le lien entre la dynamique et le paysage d’énergie libre. D’abord nous exposons le contenu de la publication IV : “Relationship between long time scales and the static free-energy in the Hopfield model”, dans laquelle nous avons calculé les valeurs propres les plus petites, associées aux temps de relaxation les plus longs, de la matrice de Glauber du modèle de Hopfield (avec un nombre de patterns fini), qui est un modèle désordonné intermédiaire entre le simple modèle de Mattis et le modèle de Sherrington et Kirkpatrick plus riche. Nous avons trouvé que les inverses des temps de relaxations les plus longs coïncident avec les modules des valeurs propres de l’énergie libre autour de ses points de stationnarité. Le calcul peut être généralisé aux modèles en dimension finie dans le cadre de l’approximation large  $S$ , comme nous montrons dans ce chapitre. Ensuite nous présentons le travail qui a donné lieu à la publication V (et au compte-rendu I) : “Dynamical TAP approach to mean field glassy systems” ; afin de comprendre la relation entre paysage d’énergie libre et évolution dynamique nous avons généralisé l’approche de Thouless, Anderson et Palmer (TAP) à la dynamique du modèle à

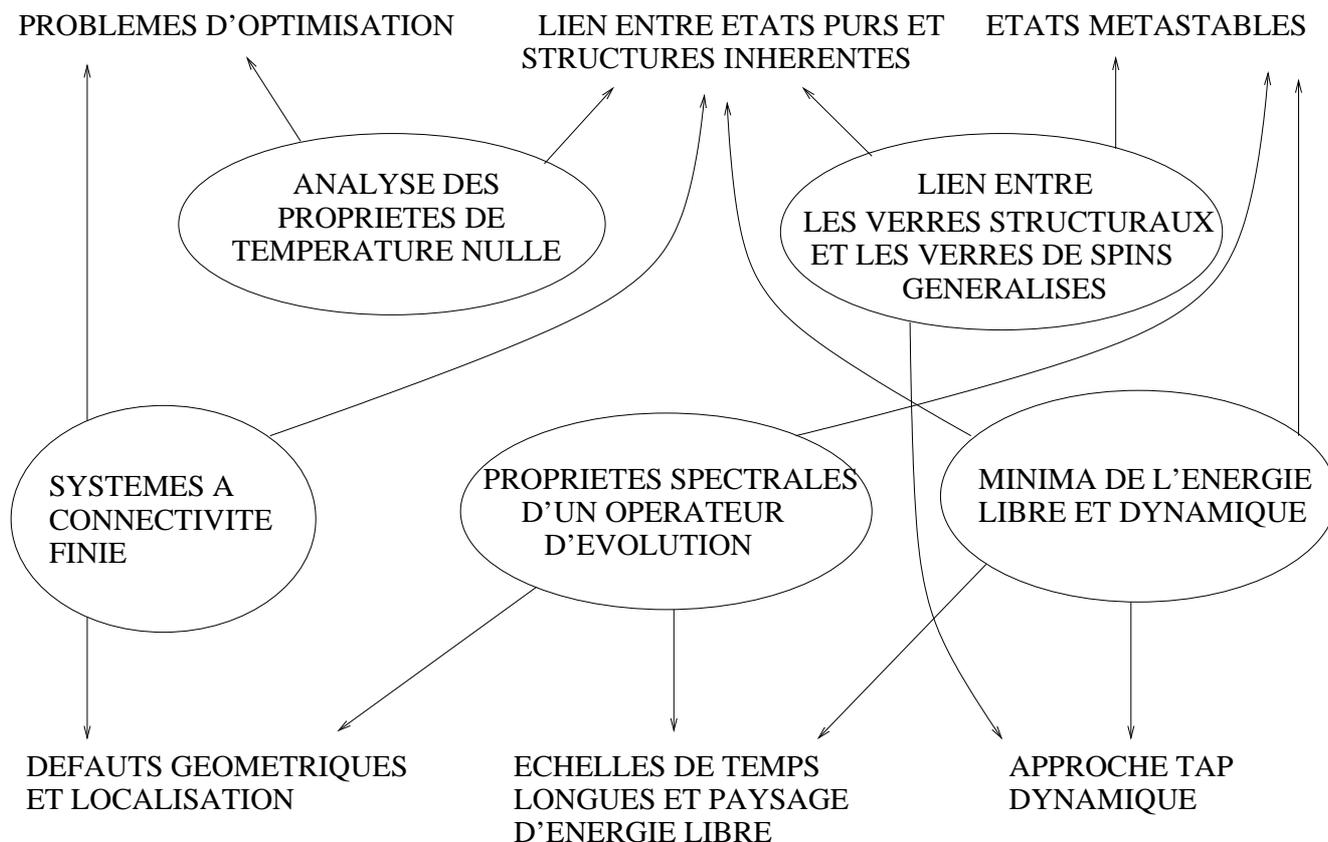


FIG. 1.3 – Dans cette figure je montre les interconnexions physiques et techniques entre les travaux effectués pendant cette thèse.

$p$ -spins sphériques (notre démarche est généralisable à d'autres modèles de champ moyen). Ceci nous a permis de montrer explicitement que les états TAP sont reliés aux lois de probabilité dynamiquement stables et que le vieillissement peut être vu comme une évolution dans les directions plates de l'énergie libre.

Enfin, dans le chapitre 7 à travers des exemples simples et des résultats mathématiques récents nous proposons une définition "temporelle" d'état (plus précisément d'état métastable) et nous développons un formalisme dynamique afin de généraliser la description de la phase vitreuse, obtenue par l'analyse des verres de spins généralisés, en dimension finie. De plus, l'application de ce formalisme au modèle à  $p$ -spins sphériques nous permet de dévoiler les caractéristiques de la solution dynamique intervenant dans le calcul des propriétés des états métastables, qui est d'un type nouveau par rapport aux solutions trouvées jusqu'à maintenant. Enfin, nous établissons un lien entre ce calcul dynamique et la brisure de la symétrie des répliques à la Bray et Moore, qui permet de comprendre la signification et les limites de l'Ansatz à deux groupes. Ce travail a donné lieu au preprint I : "Metastable states in glassy systems".

Dans la fig. 1.3 je résume les points physiques et techniques en commun entre ces six travaux.



# Chapitre 2

## Introduction aux systèmes à connectivité finie

Dans les chapitres suivants nous analyserons différents aspects de la physique des systèmes désordonnés à connectivité finie ou dilués. Ces modèles ont l'avantage d'avoir beaucoup de propriétés en commun avec les systèmes en dimension finie en restant encore des modèles de champ moyen, donc à priori exactement solubles. Le but des sections suivantes est de montrer comment ce type de modèles interviennent naturellement dans l'étude des systèmes désordonnés en dimension finie et quels sont les nouveaux ingrédients physiques et techniques qui apparaissent par rapport à leur correspondants complètement connectés.

Chronologiquement Viana et Bray [28] sont les premiers à avoir étudié par la méthode des répliques les systèmes désordonnés à connectivité finie et donc à s'être aperçus que pour ces modèles le paramètre d'ordre correspond à une généralisation de la matrice  $Q^{a,b}$  de Parisi. Cette généralisation complique beaucoup l'analyse thermodynamique. Mézard et Parisi [29] et Orland [30] ont montré que même en faisant l'hypothèse que la symétrie des répliques n'est pas brisée le paramètre d'ordre, qui dans le modèle SK est un simple paramètre, devient une fonction. Les techniques que nous développerons dans la suite et qui se révèlent être le formalisme plus adapté pour analyser les systèmes désordonnés à connectivité finie ont été introduites par De Dominicis et Mottishaw [31] et par Monasson [32, 33].

### 2.1 La méthode des répliques pour les systèmes à connectivité finie

#### 2.1.1 Le paramètre d'ordre $c(\vec{\sigma})$

Dans cette section nous nous concentrerons sur les verres de spins, mais les raisonnements qui suivent peuvent être généralisés à beaucoup d'autres systèmes désordonnés. Comme nous avons expliqué dans l'introduction, les verres de spins sont constitués d'ions

distribués aléatoirement dans l'espace ; les interactions entre ces ions dépendent de leur distance et par conséquent elles sont aussi des variables aléatoires. Les ions magnétiques sont modélisés par des spins classiques ; souvent une simplification ultérieure consiste à considérer des spins d'Ising  $\sigma_i$  (pouvant prendre seulement les valeurs  $+1$  ou  $-1$ ). L'énergie potentielle du modèle résultant est alors :

$$H = - \sum_{i < j} J(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \sigma_i \sigma_j \quad (2.1)$$

où  $\mathbf{r}_i$  est la position de l'ions  $i$  dans l'échantillon considéré et  $J(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  représente le couplage entre les ions  $i$  et  $j$ . Les quantités thermodynamiques peuvent être calculées à partir de l'énergie libre :

$$F = -\frac{1}{\beta} \overline{\log Z}, \quad Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H(\{\sigma_i\})} \quad (2.2)$$

où nous utilisons les notations  $\langle O \rangle$  et  $\overline{O}$  pour indiquer respectivement la moyenne thermique et la moyenne par rapport aux différents échantillons de l'observable  $O$ <sup>1</sup>.

La moyenne par rapport aux différents échantillons peut être effectuée en utilisant l'astuce des répliques, qui consiste à prolonger analytiquement  $\overline{Z^n}$  par rapport à  $n$  et à calculer l'énergie libre grâce à la relation :

$$\overline{\log Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n} \quad (2.3)$$

Avec cette procédure on remplace le problème original avec celui des  $n$  systèmes couplés non désordonnés. En fait, après avoir moyenné sur les échantillons, on se retrouve avec un hamiltonien effectif d'un système de  $N$  spins d'Ising vectoriels à  $n$  composantes :  $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^1, \dots, \sigma_i^n)$ .

$$\overline{Z^n} = \sum_{\{\vec{\sigma}_i\}} e^{-\beta N \mathcal{H}}, \quad -\beta N \mathcal{H} = \ln \left( \exp \left( -\beta \sum_{a=1}^n H(\{\sigma_i^a\}) \right) \right) \quad (2.4)$$

Par exemple, pour le modèle SK, on trouve :

$$-\beta N \mathcal{H} = \frac{(\beta J)^2}{4N} \sum_{i \neq j} (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j)^2 \quad (2.5)$$

La loi de probabilité sur les échantillons est invariante par permutation des ions, c'est à dire que si l'on considère une configuration aléatoire des positions des ions magnétiques,

---

<sup>1</sup>Pour l'énergie libre d'un système en dimension finie, par exemple le modèle d'Edwards et Anderson, on peut prouver rigoureusement que la limite thermodynamique est indépendante de l'échantillon. Cette propriété est appelé auto-moyennage et implique que pour un échantillon fixé la densité d'énergie libre est égale à sa valeur moyenne.

toutes les configurations obtenues à partir de la précédente en permutant les indices des ions ont le même probabilité. Ceci implique que le hamiltonien effectif  $\mathcal{H}$  dépend de la configuration  $\{\vec{\sigma}_i\}$  seulement à travers :

$$c(\vec{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\vec{\sigma}_i, \vec{\sigma}}. \quad (2.6)$$

Au nouveau on peut utiliser l'exemple du modèle SK pour vérifier cette propriété ; en effet (2.5) peut se réécrire en terme de  $c(\vec{\sigma})$  de la façon suivante (a des termes d'ordre un près) :

$$-\beta N \mathcal{H} = N \frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} c(\vec{\sigma}) c(\vec{\tau}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau})^2 \quad (2.7)$$

Notons que l'interprétation de (2.6) est très simple : pour chaque  $\vec{\sigma}$ ,  $c(\vec{\sigma})$  est égale à la fraction des sites qui ont un spin vectoriel  $\vec{\sigma}_i = \vec{\sigma}$ . La somme en (2.4) contient alors un terme combinatoire simple, parce que les configurations  $\{\vec{\sigma}_i\}$ , ayant la même fraction  $c(\vec{\sigma})$  de sites pour lesquels  $\vec{\sigma}_i = \vec{\sigma}$ , donnent  $N! / \prod_{\vec{\sigma}} (N c(\vec{\sigma})!)$  fois la même contribution. On peut donc réécrire la moyenne sur les échantillons du  $n^{\text{ème}}$  moment de la fonction de partition comme :

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} &= \left( \prod_{\vec{\sigma}} \sum_{N c(\vec{\sigma})=0}^N \right)' \frac{N!}{\prod_{\vec{\tau}} (N c(\vec{\tau})!)} e^{-\beta N \mathcal{H}(c(\vec{\sigma}))} \\ &\simeq N^{2n} \int_0^1 \prod_{\vec{\sigma}}' dc(\vec{\sigma}) \exp N \left( - \sum_{\vec{\sigma}} c(\vec{\sigma}) \ln c(\vec{\sigma}) - \beta \mathcal{H}(c(\vec{\sigma})) \right) \end{aligned} \quad (2.8)$$

où le prime indique que la mesure d'intégration et la série sont restreintes aux  $c(\vec{\sigma})$  normalisés :  $\sum_{\vec{\sigma}} c(\vec{\sigma}) = 1$ . Pour obtenir la dernière expression nous avons réécrit la somme comme une intégrale, utilisé la formule de Stirling et négligé des termes qui ne donnent pas de contributions à la densité d'énergie libre. L'intégrale en (2.8) peut être effectuée par la méthode du col dans la limite de  $N$  grand. Par conséquent le calcul de la densité d'énergie libre se traduit dans un problème variationnel :

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{extr}'_{c(\vec{\sigma})} \left( - \sum_{\vec{\sigma}} c(\vec{\sigma}) \ln c(\vec{\sigma}) - \beta \mathcal{H}(c(\vec{\sigma})) \right) \quad (2.9)$$

où la notation  $\text{extr}'$  signifie que il faut chercher l'extremum dans l'espace des fonctions  $c(\vec{\sigma})$  positives et normalisées .

Pour obtenir l'énergie libre on est donc confronté à trois problèmes principaux : il faut d'abord calculer le hamiltonien effectif  $\mathcal{H}$  en fonction de  $c(\vec{\sigma})$ , ensuite pour chaque valeur de  $n$  résoudre le problème variationnel (2.9) et enfin prolonger analytiquement le résultat et prendre la limite  $n$  qui tend vers zéro<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>Cette procédure n'est pas bien définie d'un point de vue mathématique. En effet si, pour  $N$  fini, on était capable de calculer tous les moments de la fonction de partition et  $Z$  était bornée, le prolongement

### 2.1.2 Interprétation physique de $c(\vec{\sigma})$

Pour les verres de spins et plus généralement pour les systèmes vitreux le paysage d'énergie est très irrégulier, ceci peut donner lieu à l'existence d'un grand nombre de phases, appelées aussi états purs. Dans chaque état pur les valeurs des aimantations  $m_i = \langle S_i \rangle$  peuvent être très différentes et dépendre de l'échantillon. Il n'y pas une façon univoque d'identifier les états purs en étudiant toutes les façons possibles de briser la symétrie (quelle symétrie d'ailleurs?) ou en fixant un champ magnétique (dans quelle direction?). La procédure, qui a été introduite en [2], pour avoir des informations sur les différents états purs  $\alpha_1, \dots, \alpha_L$ , consiste à les comparer en étudiant leurs recouvrements :

$$q_k = \frac{1}{N} \sum_i m_i^{\alpha_1} \cdots m_i^{\alpha_k} \quad (2.10)$$

ou plus précisément la loi de probabilité  $P_k(q)$  des recouvrements (moyennée sur les échantillons), qui est égale à la probabilité que  $k$  états purs pris au hasard avec des probabilités  $w_{\alpha_i} = e^{-\beta F_{\alpha_i}} / \sum_j e^{-\beta F_{\alpha_j}}$  aient un recouvrement  $q_k = q$ , où  $F_{\alpha}$  est l'énergie libre de l'état  $\alpha$ .  $P_k(q)$  peut être reconstruite à partir de ses moments, qui sont reliés aux fonctions de corrélation :

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^l} \sum_{i_1, \dots, i_l} \overline{\langle s_{i_1} \cdots s_{i_l} \rangle^k} &= \frac{1}{N^l} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_k} \sum_{i_1, \dots, i_l} \overline{\prod_{j=1}^k (w_{\alpha_j}(m_{i_1}^{\alpha_j} \cdots m_{i_l}^{\alpha_j}))} \\ &= \int P_k(q) q^l dq \quad , \end{aligned} \quad (2.11)$$

où l'on a utilisé la propriété que les fonctions des corrélation connexes entre deux sites très distants sont nulles dans un état pur (propriété de "clustering") [2]. Dans le cadre de la théorie effective des répliques (2.8) les fonctions de corrélation précédentes peuvent être réécrites comme :

$$\frac{1}{N^l} \sum_{i_1, \dots, i_l} \overline{\langle s_{i_1} \cdots s_{i_l} \rangle^k} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{C_n^k} \sum_{a_1 < \dots < a_k} (Q^{a_1, \dots, a_k})^l \quad , \quad (2.12)$$

où  $Q^{a_1, \dots, a_k}$  sont la généralisation au cas dilué de la célèbre matrice  $Q^{a,b}$  de Parisi [2] et sont égales aux moments du paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  :

$$Q^{a_1, \dots, a_k} = \sum_{\{\vec{\sigma}\}} c(\vec{\sigma}) \sigma^{a_1} \cdots \sigma^{a_k} \quad (2.13)$$

Par conséquent le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  peut être vu comme la fonctionnelle génératrice de toutes les lois de probabilité des recouvrements  $P_k(q)$ . Pour les modèles complètement analytique serait unique (théorème des moments de Carlson). Même dans les cas où on peut démontrer que  $Z$  est bornée, l'utilisation de la méthode du col est justifiée seulement si  $n \ll N$ , donc on n'a pas accès à tous les moments de la fonction de partition. Par conséquent le prolongement analytique n'est pas unique et il faut savoir choisir le bon!

connectés les tenseurs  $Q^{a_1, \dots, a_k}$  avec  $k > 2$  n'interviennent pas parce que  $\mathcal{H}$  est une fonction seulement de  $Q^{a,b}$  ; par exemple pour le modèle SK :

$$-\beta\mathcal{H} = \frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{a,b} (Q^{a,b})^2 \quad (2.14)$$

par conséquent le calcul de la densité d'énergie libre se traduit dans un problème variationnel plus simple que (2.9) portant seulement sur  $Q^{a,b}$ .

En utilisant les identités (2.11,2.12) on peut comprendre facilement la signification de la brisure de la symétrie des répliques. S'il y a un seul état toutes les fonctions  $P_k(q)$  deviennent des fonctions delta concentrées autour d'une certaine valeur  $q_k$ , ceci implique que toutes les fonctions des corrélations (2.11) dépendent trivialement de  $l$  et sont égales à  $q_k^l$ . Ce comportement pose des contraintes sur les  $Q^{a_1, \dots, a_k}$  à travers les équations (2.12). Une façon simple de satisfaire de satisfaire toutes les contraintes, mais qu'on peut montrer être la seule possible, est que les  $Q^{a_1, \dots, a_k}$  soient invariantes par permutation des  $a_1, \dots, a_k$  ; ceci implique que  $c(\vec{\sigma})$  est invariant par permutation des indices des répliques. Donc l'existence d'un seul état pur est directement reliée à l'invariance du paramètre d'ordre par rapport au groupe des permutations des répliques (cas RS). Maintenant, raisonnant à l'envers, on s'attend à ce que, si les distributions  $P_k(q)$  ne sont pas simplement des fonctions delta, le paramètre d'ordre ne soit plus invariant et que la symétrie des répliques soit spontanément brisée.

### 2.1.3 Champs effectifs et Ansatz à un pas de brisure de la symétrie des répliques

Comme nous avons souligné dans la section précédente si un système est caractérisé par l'existence de plusieurs états purs alors pour chaque état pur  $\gamma$  et chaque échantillon il y a un ensemble  $\{m_i^\gamma\}$  d'aimantations correspondantes. On définit le champ effectif  $h_i^\gamma$  par la relation :

$$\tanh \beta h_i^\gamma = m_i^\gamma \quad (2.15)$$

Physiquement il est intéressant de connaître la loi de distribution des champs effectifs. Cette loi de probabilité est contenue de façon implicite dans le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$ . Dans la suite on montrera le lien entre cette loi de probabilité et le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$ . Plutôt que démontrer ce lien en utilisant la méthode de cavité [2], nous le présenterons comme un fait accompli et nous le vérifierons à posteriori.

D'abord nous considérons le cas RS dans lequel  $c(\vec{\sigma})$  est invariant par rapport à la permutation des répliques et il y a un seul état pur. Pour un échantillon donné il existe alors un seul ensemble d'aimantations et des champs effectifs possibles  $\{\tanh \beta h_i\}$ . Dans ce cas on définit la loi de distribution des champs effectifs comme suit :

$$P(h) = \frac{1}{N} \sum_i^N \overline{\delta(h - h_i)} \quad (2.16)$$

Grâce à cette fonction, qui intervient naturellement dans la formulation avec les répliques, on se ramène (pour  $n \rightarrow 0$ ) à un problème variationnel dans le sous-espace des  $c(\vec{\sigma})$  invariants par rapport à la symétrie des répliques. Un premier pas pour effectuer ce calcul est de réécrire le paramètre d'ordre d'une façon telle que le prolongement soit facile à faire. La façon plus naturelle, et qu'on peut montrer être correcte grâce à la méthode de cavité, est la suivante :

$$c(\vec{\sigma}) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(h) \frac{e^{\beta h \vec{\sigma} \cdot \vec{1}}}{(2 \cosh \beta h)^n} dh \quad (2.17)$$

où  $\vec{1} = (1, \dots, 1)$  est un vecteur à  $n$  composantes et  $\vec{\sigma} \cdot \vec{1} = \sum_a \sigma_a$ . Le paramètre d'ordre (2.17) peut avoir pour chaque valeur de  $n$  au plus  $n$  valeurs différentes, qui correspondent aux différentes valeurs possibles de  $\vec{\sigma} \cdot \vec{1}$ . Par conséquent on comprend facilement que si l'expression (2.17) doit être vraie pour n'importe quelle valeur de  $n$  alors il faut utiliser une fonction  $P(h)$  pour pouvoir contenir toute l'information incluse en  $c(\vec{\sigma})$ . On peut vérifier à partir des résultats de la section précédente que ce lien entre  $P(h)$  et  $c(\vec{\sigma})$  est compatible avec l'interprétation physique de  $P(h)$ . En effet nous trouvons que :

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_i \overline{m_i^k} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{C_n^k} \sum_{a_1 < \dots < a_k} \sum_{\{\vec{\sigma}\}} c(\vec{\sigma}) \sigma^{a_1} \dots \sigma^{a_k} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} P(h) (\tanh \beta h)^k dh \end{aligned} \quad (2.18)$$

On considère maintenant le cas dans lequel la symétrie des répliques est spontanément brisée et on veut élucider le lien entre la distribution des champs effectifs et la solution  $c(\vec{\sigma})$  à un pas de brisure de la symétrie des répliques (1RSB)[2, 32, 33]. Dans ce cas il existe plusieurs états purs. Par conséquent le champ effectif  $h_i^\gamma$  d'un spin fluctue

- d'un état à l'autre. On tient compte de cette fluctuation en introduisant la distribution

$$\rho_i(h) = \sum_{\gamma} w_{\gamma} \delta(h - h_i^{\gamma})$$

où  $w_{\gamma}$ , qu'on a défini précédemment, est le poids de Boltzmann associé à l'état pur  $\gamma$ .

- d'un spin à l'autre. On tient compte de ce type de fluctuation en introduisant la distribution fonctionnelle des  $\rho_i(h)$  :

$$\mathcal{P}[\rho] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \overline{\delta[\rho(h) - \rho_i(h)]}$$

où  $\delta[\cdot]$  indique une delta fonctionnelle.

Comme dans le cas RS, dans le formalisme avec les répliques il faut choisir une bonne paramétrisation de  $c(\vec{\sigma})$  qui correspond à l'invariance associée à la brisure à un pas de la

symétrie des répliques. La façon plus naturelle et qu'on peut montrer être correcte grâce à la méthode de cavité [2, 32, 33] est la suivante :

$$c(\vec{\sigma}) = \int \mathcal{D}\rho \mathcal{P}[\rho] \prod_{b=1}^{n/m} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dh \rho(h) \prod_{a=1+(b-1)m}^{bm} \left( \frac{e^{\beta h \sigma_a}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} \right) \right\} \quad (2.19)$$

où  $m$  est le paramètre de la brisure à un pas, qui est relié au poids des états :  $1 - m = \sum_{\gamma} \overline{w_{\gamma}^2}$ . L'expression (2.19) est la forme plus générale pour paramétriser, pour  $n$  quelconque, une fonction  $c(\vec{\sigma})$  qui est invariant par permutations à l'intérieur des  $n/m$  blocs et par permutations des blocs entre eux. De plus, on peut vérifier à partir des résultats de la section précédente que le lien (2.19) entre  $\mathcal{P}[\rho]$  et  $c(\vec{\sigma})$  est compatible avec l'interprétation physique de  $\mathcal{P}[\rho]$ .

Avant de terminer cette section nous rappelons la forme de  $P(h)$  et de  $\mathcal{P}[\rho]$  pour les modèles complètement connectés. Ceci est utile pour montrer un exemple de  $P(h)$  et de  $\mathcal{P}[\rho]$  et pour dévoiler les simplifications techniques qui surviennent pour ces modèles. Pour simplifier la notation on considérera le cas où le système est invariant par  $\{\sigma_i\} \rightarrow \{-\sigma_i\}$ .  $P(h)$  est alors une fonction gaussienne de moyenne zéro et de variance  $q$ , qui pour le modèle SK correspond au recouvrement entre deux configurations prises au hasard avec le poids de Boltzmann. Tandis que  $\mathcal{P}[\rho]$  s'écrit comme :

$$\mathcal{P}[\rho(\tilde{h})] = \int_{-\infty}^{\infty} dh G_{q_0}(h) \delta \left[ \rho(\tilde{h}) - \frac{G_{q_1}(\tilde{h} - h)(2 \cosh \beta \tilde{h})^m}{\int dh' G_{q_1}(h' - h)(2 \cosh \beta h')^m} \right], \quad (2.20)$$

où on a utilisé la notation  $G_{\Delta}(x)$  pour une gaussienne normalisée avec variance égale à  $\Delta$  et moyenne nulle. Pour le modèle SK,  $q_0$  correspond au recouvrement entre deux états différents pris au hasard avec le poids de Boltzmann et  $q_1$  correspond à l'auto-recouvrement d'un état pris au hasard avec le poids de Boltzmann. De façon générale pour tous les modèles complètement connectés la forme de  $P(h)$  et de  $\mathcal{P}[\rho]$  est celle donnée dans les deux expressions précédentes. On comprend bien alors pourquoi les calculs pour les modèles complètement connectés sont assez simples : dans le cas RS au lieu d'optimiser sur une fonction il faut seulement optimiser sur un paramètre  $q$ , dans le cas 1RSB au lieu d'optimiser sur une fonctionnelle il faut seulement optimiser sur deux paramètres  $q_0, q_1$ .

### 2.1.4 Hamiltonien effectif

Le but de cette sous-section est de montrer que les systèmes à connectivité finie interviennent naturellement dans le cadre d'une analyse approchée des systèmes en dimension finie. En particulier ces systèmes peuvent être considérés comme une première approximation des systèmes réels.

En fait, puisque le calcul de le hamiltonien effectif en fonction de  $c(\vec{\sigma})$  ne peut pas être effectué exactement pour un système en dimension finie, on peut introduire un schéma d'approximation qui permet de calculer  $\mathcal{H}$  perturbativement. L'idée principale est de réécrire le hamiltonien effectif comme une série dans laquelle les termes, qui font intervenir des

moyennes sur les lois de distribution d'un nombre de plus en plus grand de particules, apparaissent de plus en plus tard : c'est à dire qu'il faut connaître la distribution à deux particules des ions pour calculer le premier terme, la distribution à trois et quatre particules pour calculer le deuxième terme, etc.

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \overline{\prod_{\langle i,j \rangle} [1 + u_{i,j}]} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( 1 + \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{1}{m!} \sum' \overline{u_{i_1,j_1} \cdots u_{i_m,j_m}} \right) \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left( \sum_{\langle i,j \rangle} \overline{u_{i,j}} + \frac{1}{2} \sum'_{\langle i_1,j_1 \rangle, \langle i_2,j_2 \rangle} \overline{u_{i_1,j_1} u_{i_2,j_2}}^C + \dots \right) \\
u_{i,j} &= (e^{\beta J(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j} - 1)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

où le prime indique que il faut sommer sur tous les produits des  $m$  couples différents, et nous avons utilisé que la moyenne de  $u_{i,j}$  est d'ordre  $1/N$  (ceci est dû au fait que la probabilité que deux particules soient à une distance finie l'une de l'autre est d'ordre  $1/N$ ). Nous remarquons que ce développement est similaire à celui du viriel (dans l'ensemble canonique).

Dans la suite nous considérerons l'approximation qui consiste à négliger les corrélations entre  $u_{i,j}$ . Cette approximation devient exacte pour les systèmes à connectivité finie (voir la section suivante).

La moyenne de  $u_{i,j}$  peut s'écrire comme :

$$\overline{u_{i,j}} = \frac{\alpha}{N} \int dJ p(J) (e^{\beta J \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j} - 1) \tag{2.22}$$

où  $\alpha$  peut s'interpréter comme le nombre moyen de voisins et  $p(J)$  comme la probabilité d'avoir une interaction  $J$  avec un voisin ;  $p(J)$  est donc normalisé à un. A cet ordre d'approximation le hamiltonien effectif en fonction de  $c(\vec{\sigma})$  s'exprime simplement comme :

$$-\beta\mathcal{H} = \frac{\alpha}{2} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\sigma}} \int p(J) dJ c(\vec{\sigma}) c(\vec{\tau}) (e^{\beta J \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1) \tag{2.23}$$

Notons qu'on peut retrouver le hamiltonien du modèle SK comme une "déformation" de connectivité infinie de (2.23). En effet si l'on considère une fonction  $p(J)$  paire concentrée sur des  $J$  d'ordre  $1/\sqrt{N}$  et une connectivité  $\alpha$  d'ordre  $N$ , on retrouve bien le hamiltonien effectif (2.14).

Dans notre schéma d'approximation le terme successif à (2.22) fait intervenir la loi de probabilité jointe de deux interactions  $J, J'$ . Ce terme correspond au cas où les voisins d'un ions sont voisins entre eux et donc interagissent. La probabilité de cet événement devient de plus en plus petite quand la dimension augmente et le nombre moyen de voisins reste d'ordre un.

Il faut souligner que considérer seulement le premier terme dans l'expansion (2.21) comporte déjà des grandes difficultés techniques. Par conséquent, jusqu'à maintenant les termes successifs en (2.21) n'ont été jamais pris en compte.

## 2.2 Les verres de spins sur des réseaux aléatoires

Comment on a déjà anticipé dans la sous-section précédente l'approximation qui consiste à négliger les corrélations entre  $u_{i,j}$  en (2.21) devient exacte pour certains modèles, appelés à connectivité finie. L'exemple plus connu porte le nom de Viana et Bray, qui l'ont introduit et étudié pour la première fois [28]. Ceci est un modèle de spins d'Ising interagissant à travers des couplages qui sont des variables indépendantes distribuées avec la loi suivante :

$$P(J_{i,j}) = \left(1 - \frac{\alpha}{N}\right) \delta(J_{i,j}) + \frac{\alpha}{N} p(J_{i,j}) \quad (2.24)$$

Deux spins quelconque ont donc une probabilité  $1 - \alpha/N$  de ne pas interagir, et  $\alpha/N$  d'interagir à travers un couplage qui est une variable aléatoire tirée au hasard avec la distribution  $p(J_{i,j})$  (qui est supposé avoir un poids fini en zéro). La loi de probabilité (2.24) définit de façon naturelle un graphe aléatoire, qui est le réseau de points construit en joignant tous les points avec  $J_{i,j} \neq 0$ . Le modèle de Viana-Bray est donc un système de spins d'Ising défini sur un graphe aléatoire.

Le graphe aléatoire en tant que structure mathématique a été introduit et largement étudié par Erdős and Rényi [34] dans les années soixante. Il existe une très vaste littérature mathématique sur ce sujet [35]. Nous nous contenterons de rappeler quelques propriétés simples qui seront utiles dans la suite<sup>3</sup>.

### 2.2.1 Quelques propriétés des graphes aléatoires

La propriété plus spectaculaire des graphes aléatoires est sans doute la transition de percolation : pour des faibles valeurs de  $\alpha$  le graphe aléatoire est constitué d'amas disjoints, mais il existe un  $\alpha_c$  telle que pour  $\alpha > \alpha_c$  un amas infini connexe, qui contient une fraction finie de sites, apparaît. La probabilité  $A$  que un point appartient à l'amas infini satisfait l'équation :

$$1 - A = e^{-\alpha A} \quad (2.25)$$

Cette équation peut être facilement analysée et sa solution  $A(\alpha)$  est tracé en fig.2.1 : les principaux résultats sont que la courbe  $A(\alpha)$  devient différente de zéro pour  $\alpha > \alpha_c = 1$  et tend vers un pour  $\alpha$  grand. Pour  $\alpha > 1$  le graphe aléatoire est formé d'un amas infini connexe et d'un nombre d'ordre  $N$  d'amas finis. Concernant les propriétés géométriques locales, la probabilité qu'un site ait une connectivité  $k$  est :

$$p_k = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{\alpha}{N}\right)^k \left(1 - \frac{\alpha}{N}\right)^{k-N} \frac{N!}{(N-k)!k!} = e^{-\alpha} \frac{\alpha^k}{k!} \quad (2.26)$$

---

<sup>3</sup>Puisque nous sommes intéressés à la limite thermodynamique nous considérerons les propriétés d'un graphe aléatoire dans la limite de  $N$  infini. Donc quand on écrira que un graphe aléatoire a une certaine propriété, ça sera toujours sous-entendu qu'un graphe aléatoire a cette propriété avec une probabilité qui tend vers un dans la limite  $N \rightarrow \infty$ .

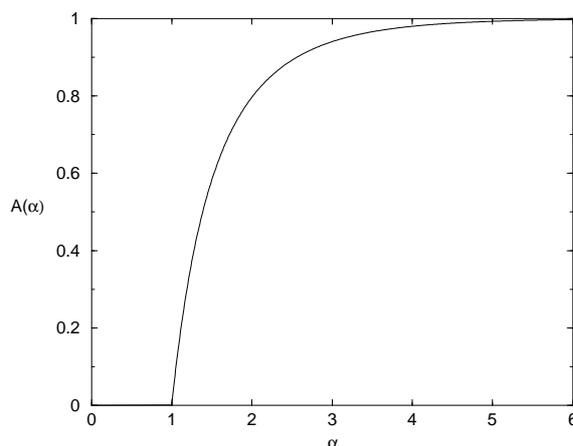


FIG. 2.1 – Probabilité  $A(\alpha)$  qu'un site appartient à l'amas infini en fonction de la connectivité moyenne  $\alpha$ . La transition de percolation est à  $\alpha_c = 1$  ; pour des valeurs plus grands de  $\alpha$  le graphe aléatoire contient un amas infini de sites connectés.

La connectivité d'un site quelconque est donc une variable aléatoire poissonnienne de moyenne  $\alpha$ . On peut montrer aussi que le nombre moyen de voisins d'un site qui a déjà un voisin est  $\alpha + 1$ . Ces résultats permettent de justifier à posteriori que  $\alpha_c = 1$  : l'amas infini apparaît quand chaque site a plus d'un voisin en moyenne. On peut aussi retrouver avec un argument heuristique l'éq. (2.25). En effet on peut écrire que la probabilité  $1 - A$  que un site n'appartienne pas à l'amas infini est égale à la probabilité  $e^{-\alpha}$  qu'il soit un site isolé plus la probabilité que ses voisins n'appartiennent pas à l'amas infini. Si on réécrit cette deuxième probabilité comme la somme sur la probabilité  $p_k$  d'avoir  $k$  voisin, multipliée par la probabilité  $(1 - A)^k$  que les  $k$  voisins n'appartiennent pas à l'amas infini on retrouve l'éq. (2.25). Un autre résultat intéressant concernant les propriétés géométriques locales est qu'un graphe aléatoire n'a pas de boucles de longueur finie, donc localement un graphe aléatoire est équivalent à un arbre avec une connectivité aléatoire, voir fig. 2.2. La probabilité d'avoir une boucle commence à être différente de zéro seulement pour des tailles d'ordre  $\ln N$ . On peut comprendre ce résultat avec un argument heuristique simple ; la stratégie est la suivante : on explore le graphe aléatoire en partant d'un point et on cherche quelle est la taille de la première boucle qu'on rencontre avec probabilité finie. Puisque le nombre de  $k^{\text{èmes}}$  voisins d'un site est en moyenne  $\alpha^k$ , la probabilité que un site ait comme  $k^{\text{ème}}$  voisin un site qui a été déjà visité devient non négligeable pour  $k \sim \ln N$ . Donc la taille de la première boucle est au plus d'ordre  $\ln N$ .

Les graphes aléatoires appartiennent à la classe des structures appelées à connectivité finie ou diluées, qui ont d'une part certaines caractéristiques typiques des modèles en dimension finie, comme par exemple la connectivité finie, mais aussi des caractéristiques typiques des modèles en dimension infinie, comme par exemple le fait que la probabilité que deux sites soient connectés ne dépende pas de la paire de sites choisie.

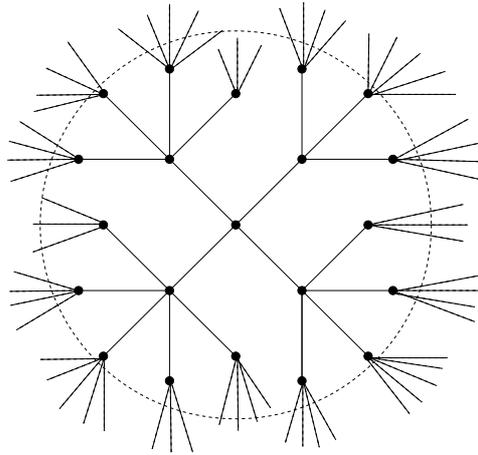


FIG. 2.2 – Exemple de structure locale d'un graphe aléatoire. Il n'y a pas de boucles de taille finie, donc localement le graphe aléatoire est équivalent à un arbre avec une connectivité aléatoire.

## 2.2.2 Généralisations : systèmes à connectivité finie ou dilués

Nous avons introduit les graphes aléatoires comme un type de réseau de spins pour lesquels l'approximation (2.23) est exacte. Il y d'autres raisons pour lesquelles les graphes aléatoires et leurs généralisations sont intéressants. On peut commencer par mentionner le motif qui a poussé Viana et Bray [28] à introduire et étudier les verres de spins sur un graphe aléatoire. Il existe des composites comme  $\text{Eu}_x \text{Sr}_{1-x} \text{S}$  dont les propriétés magnétiques dépendent beaucoup de la concentration  $x$ , parce que l'un des atomes,  $\text{Sr}$  dans ce cas, est magnétiquement inerte. Ces matériaux peuvent avoir une transition ferromagnétique ou de type verre de spin suivant la valeur de  $x$ . Viana et Bray ont proposé que le modèle le plus simple pour modéliser un système dans lequel la dilution et le désordre jouent en même temps un rôle essentiel est un verre de spin sur graphe aléatoire. Dans cette correspondance, la dilution  $x$  est reliée à la connectivité moyenne  $\alpha$  et le désordre à la loi de probabilité des couplages  $p(J_{i,j})$ , cf. eq.(2.24). Pour cette raison ce modèle, et ses généralisations, sont souvent appelés dilués ou plus généralement à connectivité finie.

Il y a encore d'autres motifs pour lesquels les graphes aléatoires et leurs généralisations sont intéressants : d'une part ils peuvent être étudiés en tant que structures mathématiques intermédiaires entre les systèmes en dimension finie et les modèles complètement connectés et d'autre part depuis les années quatre-vingt on s'est aperçu qu'ils interviennent dans la modélisation de beaucoup de problèmes d'optimisation [22, 23].

On citera en particulier deux autres exemples de systèmes à connectivité finie, qui nous seront utiles dans la suite : les graphes aléatoires à connectivité fixe et les hypergraphes aléatoires. Ce deuxième type de systèmes est la généralisation naturelle des graphes aléatoires : à la place des liens on considère les  $C_N^k$  différents façons de coupler  $k$  sites. L'hypergraphe aléatoire d'indice  $k$  est obtenu en prenant chaque couplage avec probabilité  $\alpha/N^{k-1}$  et on en ne le prenant pas avec probabilité  $1 - \alpha/N^{k-1}$ . Cette structure aléatoire est ca-

ractérisée par une transition de percolation à  $\alpha_c = (k - 2)!$  [36]. Par contre les graphes aléatoires à connectivité fixe sont des graphes tirés au hasard avec une distribution uniforme dans l'espace des graphes connexes ayant cette connectivité. Ces structures n'ont évidemment pas une transition de percolation, mais comme les graphes aléatoires, sont caractérisées par des boucles qui ont au minimum une taille d'ordre  $\ln N$ ; par conséquent localement elles sont équivalentes à des arbres à connectivité fixe, des arbres de Cayley.

## 2.3 Quelques applications simples

### 2.3.1 Phase de haute température du modèle de Viana et Bray

La condition d'extrémisation de la fonctionnelle (2.9) se traduit pour le modèle de Viana et Bray dans l'équation sur le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  suivante :

$$c(\vec{\sigma}) = \mathcal{N} \exp \left( \alpha \int dJ \sum_{\{\vec{\tau}\}} p(J) (e^{\beta J \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1) c(\vec{\tau}) \right) \quad (2.27)$$

où  $\mathcal{N}$  est un paramètre de normalisation. Cette équation est très compliquée et en général ne peut pas être résolue exactement. Dans le régime de haute température le système est dans la phase paramagnétique, par conséquent il y a un seul état pur, l'état paramagnétique, avec toutes les aimantations nulles. Donc chaque loi de distribution des recouvrements  $P_k(q)$  et la distribution des champs effectifs sont des fonctions delta concentrées en zéro. Par conséquence on s'attend, et on peut aisément vérifier, que la solution de (2.27) soit particulièrement simple :  $c(\vec{\sigma}) = 2^{-n}$ . Ceci traduit simplement le fait que dans la phase paramagnétique l'entropie l'emporte sur l'énergie et chaque valeur de  $\vec{\sigma}$  est équiprobable. Cette solution décrit la phase paramagnétique du modèle de Viana et Bray. En dessous d'une certaine température  $T_c$  cette solution devient instable et le système entre dans la phase verre de spins ou ferromagnétique [28]. Pour identifier la transition nous calculerons la stabilité de la solution paramagnétique en généralisant le calcul de Almeida et Thouless [37] à des systèmes à connectivité finie. D'abord nous considérons le hessien :

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial c(\vec{\sigma}) \partial c(\vec{\tau})} \right|_{c(\vec{\sigma})=2^{-n}} = \frac{1}{\beta} \left( 2^n \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} - \alpha \int p(J) e^{\beta J \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} dJ \right) \quad , \quad (2.28)$$

qui est une matrice invariante par translations discrètes sur l'hypercube à  $2^n$  dimensions. Ceci se voit en réécrivant  $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$  comme  $2^n + (\vec{\sigma} - \vec{\tau})^2 / 2$ . Par conséquent ses vecteurs propres sont les ondes planes définies sur l'hypercube :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{\sigma}) = 2^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{i\pi}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{k}} \quad , \quad (2.29)$$

où  $\vec{k}$  est un vecteur à  $n$  composantes binaires qui ont comme valeurs possibles 0 ou 1. Les valeurs propres correspondantes sont égales à :

$$\lambda_{\vec{k}} = \frac{2^n}{\beta} \left( 1 - \alpha \int p(J) (\cosh \beta J)^n (\tanh \beta J)^{\sum_a k^a} dJ \right) \quad , \quad (2.30)$$

L'existence et la stabilité de la phase paramagnétique sont liées à la positivité de  $\lambda_{\vec{k}}$  pour  $n$  qui tend vers zéro. Cela se comprend facilement en remarquant que dans la phase paramagnétique toutes ces valeurs propres sont reliées aux susceptibilités :

$$\Xi_{(k)} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \overline{\langle s_i s_j \rangle_c^k} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{N}{C_n^k} \sum_{a_1 < \dots < a_k} \overline{(Q^{a_1, \dots, a_k})^2} \quad , \quad (2.31)$$

Ces quantités doivent être d'ordre un pour des raisons thermodynamiques<sup>4</sup>, et en effet pour l'état paramagnétique on a que  $(Q^{a_1, \dots, a_k})^2 \sim 1/N$ , ce qui redonne bien des susceptibilités finies. Les quantités  $\overline{(Q^{a_1, \dots, a_k})^2}$  peuvent être calculées facilement à partir de leur définition et du fait que le hessien de l'énergie libre se diagonalise dans l'espace de Fourier ; on trouve que :

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{N}{C_n^k} \sum_{a_1 < \dots < a_k} \overline{(Q^{a_1, \dots, a_k})^2} = \frac{1}{\lambda_{n \rightarrow 0}^{(k)}} \quad , \quad (2.32)$$

où  $\lambda_{n \rightarrow 0}^{(k)}$  est le prolongement analytique à  $n = 0$  de la valeur propre correspondant à un vecteur  $\vec{k}$  avec  $k$  composantes égales à un et celles restantes égales à zéro. Re-injectant (2.32) en (2.31) nous trouvons finalement l'expression recherchée des susceptibilités généralisées :

$$\Xi_{(k)} = \beta \left( 1 - \alpha \int p(J) (\tanh \beta J)^k dJ \right)^{-1} \quad . \quad (2.33)$$

Lorsque l'une de ces susceptibilités diverge, l'état paramagnétique devient instable et la transition de phase survient. Utilisant les propriétés de la tangente hyperbolique on peut se convaincre que  $\Xi_{(2)} \geq \Xi_{(2l)}$  et  $\Xi_{(2m)} \geq \Xi_{(2m+1)}$  ( $m, l = 1, 2, \dots$ ). Par conséquent la transition de phase a lieu à une température à la quelle  $\Xi_{(2)}$  ou  $\Xi_{(1)}$  deviennent divergentes. Si la loi de probabilité  $p(J)$  a un support seulement sur l'axe réel positif, le système est désordonné mais ferromagnétique, et dans ce cas  $\Xi_{(1)}$  diverge pour première ; par contre si  $p(J)$  est paire alors  $\Xi_{(1)} = \beta$  et donc la transition de phase correspond à la divergence de  $\Xi_{(2)}$ . Pour ces raisons  $\Xi_{(1)}$  et  $\Xi_{(2)}$  sont appelées respectivement susceptibilités ferromagnétique et verre de spins.

Dans la section 2.1.4 nous avons montré que les verres des spins sur un graphe aléatoire peuvent être vus comme une approximation des verres des spins en dimension finie. En particulier on peut interpréter le modèle de Viana et Bray comme une approximation de grande dimension du modèle de Edwards et Anderson, où la distribution  $p(J)$  et  $\alpha + 1$ , cf. eq. (2.24), correspondent respectivement à la distribution de couplages entre plus proche voisins et à la connectivité du réseau du modèle de Edwards et Anderson. Il est donc intéressant de calculer la température de transition du modèle de Viana et Bray et de la

---

<sup>4</sup>En fait ces susceptibilités sont reliés à la dérivé  $k + 2^{\text{ème}}$  de l'énergie libre par rapport à un champ magnétique uniforme[3]. La divergence d'une des susceptibilités se traduit alors dans la divergence d'une dérivé de l'énergie libre par rapport au champ magnétique. Par conséquent on s'attend que dans une phase stable toutes ces susceptibilités restent finies.

$d$	$K_B T^{vb}/J$	$K_B T^{d,s}/J$
9	3.88	$3.82^d$
7	3.33	$3.22^d$
5	2.67	$2.41^d$
3	1.8	$0.95 \pm 0.04^s$

TAB. 2.1 – Dans cette table on compare les températures de transition du modèle d’Edwards et Anderson en dimension  $d$  et du modèle de Viana et Bray avec une connectivité moyenne égale à  $2d - 1$ . La distribution des couplages est gaussienne et les températures de transition du modèle de Edwards et Anderson sont obtenues à partir des meilleurs développements de haute température (d) [38] et des simulations numériques (s) [39].

comparer aux résultats obtenus par les développement d’haute température [38] et par les simulations numériques [39] sur le modèle de Edwards et Anderson, voir table 2.1. L’accorde est d’autant meilleur que la dimension de l’espace est grande. En particulier pour  $d = 3$ , ce serait nécessaire de calculer les corrections au hamiltonien effectif de Viana et Bray pour obtenir un bon résultat.

### 2.3.2 Phase de Griffiths et hétérogénéités

La phase de Griffiths [6] est une caractéristique importante des systèmes désordonnés, qui est due à l’existence d’une transition de phase combinée à la présence d’hétérogénéités ou d’événements rares dus aux fluctuations spatiales du désordre. Les singularités de Griffiths ont été découvertes en considérant les propriétés d’analyticité de l’énergie libre comme fonction du champ magnétique imaginaire pour un système ferromagnétique dilué en dimension finie. La dilution était prise telle que chaque site est présent avec probabilité  $p$  et absent avec probabilité  $1 - p$ . En dimension plus grande que un, et pour  $p$  plus grand que le seuil de percolation  $p_c$ , le système à une transition de phase ferromagnétique à une température  $T_c(p)$ , qui est zéro pour  $p = p_c$  et croît avec  $p$ , la valeur à  $p=1$  étant la température de transition du modèle d’Ising non désordonné  $T_c(p = 1)$ . Griffiths a observé que pour des température  $T < T_c(p = 1)$  l’énergie libre comme fonction du champ magnétique imaginaire n’est pas analytique autour de  $h = 0$  : pour  $T < T_c(p)$  elle n’est pas deux fois différentiable, mais ceci est simplement dû au fait que pour  $T < T_c(p)$  le système est ordonné ; par contre ce qui n’était pas attendu est que la fonction de partition est infiniment dérivable mais quand même pas analytique autour de  $h = 0$  pour des températures entre  $T_c(p)$  et  $T_c(p = 1)$ . Ce comportement peut être compris en terme de zéros de Lee et Yang [40, 41]. La non analyticité de l’énergie libre pour un modèle d’Ising non désordonné est relié au fait que pour des températures plus faibles que la température de transition la densité de zéros de Lee et Yang est finie à  $h = 0$ . Pour le modèle ferromagnétique dilué considéré par Griffiths il y a toujours une probabilité (par site) faible, mais finie, qu’il existe un amas de  $L$  sites où chaque site est occupé. Ce type d’amas devient “critique” ou “ordonné” pour  $T < T_c(p = 1)$  et donc il donne lieu pour  $T_c(p) < T < T_c(p = 1)$  à des

zéros de Lee et Yang de plus en plus près de l'axe réel plus  $L$  est grand, par conséquent la densité de zéros de Lee et Yang est nulle en  $h = 0$  et non nulle dans n'importe quel voisinage de  $h = 0$ . Griffiths a montré que la conséquence de ceci est que l'énergie libre a une singularité essentielle comme fonction du champ magnétique pour  $T_c(p) < T < T_c(p = 1)$ . La phase de Griffiths est donc reliée à la possibilité (très faible) qu'un système, qui n'a pas encore eu une transition de phase contient des sous-systèmes "critiques" ou "ordonnés" (très grands). Pour cette raison on s'attend que la phase de Griffiths soit présente pour la majorité des systèmes désordonnés. Cette phase n'est pas seulement un très joli résultat mathématique, mais a des conséquences physiques importantes sur la dynamique. En effet, comme il a été montré initialement par Bray [7] et Randeira et al. [8], un modèle d'Ising désordonné a une relaxation qui n'est pas exponentielle mais anormalement lente dans la phase de Griffiths. Ceci est dû au fait que la fonction de auto-corrélation  $C(t)$  entre la configuration du système au temps 0 et au temps  $t$  reçoit une contribution de la part des amas "ferromagnétiquement ordonnés" de taille  $L$  qui est de l'ordre  $e^{-t/\tau}$ , où  $\tau$  est le temps caractéristique pour renverser un amas ordonné de taille  $L$ , avec une probabilité qui décroît exponentiellement avec  $L$ ; dit autrement : dans le système on peut trouver avec une probabilité très faible des amas qui ont une relaxation très lente. Par exemple pour le modèle ferromagnétique dilué considéré par Griffiths : le temps  $\tau$  nécessaire pour renverser un amas de taille  $L$  est de l'ordre  $e^{cL^{d-1}}$  et la probabilité correspondante est de l'ordre  $e^{-c'L^d}$ , en sommant les différents contributions sur  $L$  on obtient le résultat [7, 8] :

$$|C(t)| > C_0 \exp\left(-A(\ln t)^{\frac{d}{d-1}}\right) \quad (2.34)$$

Pour les modèles complètement connectés il n'y a pas de phase de Griffiths. La raison principale est que on ne peut pas avoir des hétérogénéités dans ce type de modèles. Par contre les modèles désordonnés sur un graphe aléatoire peuvent manifester ce type de comportement. En fait, Barrat et Zecchina [42] ont montré que les hétérogénéités dynamiques, qui sont une caractéristique importante de la dynamique des systèmes vitreux comme les verres et les matériaux granulaires [43, 44], jouent un rôle essentiel dans la dynamique de basse température des systèmes de spins à connectivité finie. Dans la suite nous nous étudierons le rôle des hétérogénéités dans la thermodynamique et plus précisément la phase de Griffiths pour le modèle de Viana et Bray <sup>5</sup>.

Une façon simple de capturer l'existence de la phase de Griffiths est de calculer les suscep-

---

<sup>5</sup>Bray et Huifang ont aussi étudié les singularités de Griffiths pour les modèles à connectivité finie [21]. Leur approche est très différente par rapport au notre parce que ils ont considéré des singularités de Griffiths beaucoup plus faibles. En particulier ils ont étudiés le modèle de Viana et Bray ferromagnétique et ils ont analysé les singularités de Griffiths induites par la possibilités d'avoir des amas complètement connectés. La probabilité de cet événement tend à zéro avec  $N$ . Par contre nous nous sommes intéressés à l'effet des événement rares qui ont une probabilité faible, mais finie quand  $N \rightarrow \infty$ .

tibilités généralisées  $\Delta_m$  :

$$\begin{aligned}\Delta_m &= \sum_d \mathcal{N}(d) \left( \frac{1}{N} \sum_{i,j/d(i,j)=d} \langle S_i S_j \rangle_d^m / \mathcal{N}(d) \right)^{\frac{1}{m}} \\ &= \sum_d \mathcal{N}(d) e^{-dm/\xi}^{1/m}\end{aligned}\quad (2.35)$$

où  $\mathcal{N}(d)$  est le nombre moyen de voisins à distance  $d$  et  $\xi$  est la longueur de corrélation entre deux sites à distance  $d$ . Ces quantités vont donner un renseignement sur l'existence de la phase de Griffiths, et peuvent diverger même avant la transition thermodynamique. En effet en prenant  $m$  très grand on favorise les événements rares dans lesquels on a une longueur de corrélation très grande avec une probabilité faible :

$$\Delta_m \simeq C \sum_d \mathcal{N}(d) e^{-d/\xi_{max}}, \quad m \gg 1, \quad (2.36)$$

où  $\xi_{max}$  est la plus grande longueur de corrélation qu'on peut trouver dans une fraction finie du système. Par contre en prenant  $m$  très faible on obtient les résultats typiques [45]. On s'attend donc que  $\Delta_\infty$  devient divergente quand le système entre dans la phase de Griffiths parce que avec une probabilité très faible on peut trouver des longueurs de corrélations arbitrairement grandes. Dans la phase paramagnétique du modèle de Viana et Bray on peut calculer facilement la longueur de corrélation entre deux sites à distance  $d$  (pour une configurations du désordre typique) :

$$\langle S_i S_j \rangle_d = (\tan \beta J_{i,i_1}) \cdots (\tan \beta J_{i_{d-1},j}) \quad (2.37)$$

où  $i, i_1, \dots, i_{d-1}, j$  sont les sites qui forment le chemin pour aller de  $i$  à  $j$  en  $d$  pas. Avec probabilité un, ce chemin est unique si  $d$  est d'ordre un. A partir de la formule (2.37) on peut calculer facilement les susceptibilité généralisées  $\Delta_m$  :

$$\Delta_m = \sum_{d=1}^{\infty} \alpha^d \left( \int dJ p(J) (\tanh \beta J)^m \right)^{\frac{d}{m}} \quad (2.38)$$

Pour une distribution symétrique  $p(J)$  qui a un support  $[-J_{max}, J_{max}]$  le système a une transition de phase à une température  $T_c$  pour laquelle la susceptibilité verre de spins devient divergente, tandis que  $\Delta_\infty$  devient divergente à une température plus grande  $T_G > T_c$  pour laquelle :

$$1 = \alpha \tanh(J_{max}/T_G) \quad (2.39)$$

Ce qui est remarquable est que (2.39) est la condition satisfaite par la température critique du modèle de Viana et Bray ferromagnétique avec des couplages  $J_{max}$ . Comme on s'attendait  $\Delta_\infty$  devient divergent de que le système a une probabilité non nulle de contenir

des amas ordonnés (avec un ordre ferromagnétique). Par conséquent dans le régime de température  $T_c < T < T_G$  le modèle présente une phase de Griffiths, ceci est un très bon exemple d'effet qu'on peut obtenir pour des systèmes à connectivité finie mais qu'on ne peut pas trouver dans un modèle complètement connecté. La plus grande difficulté technique des systèmes à connectivité finie est donc reliée aussi à une plus grande richesse d'un point de vue physique.

### 2.3.3 Méthode variationnelle et fluctuations de la connectivité

En général les systèmes à connectivité finie ne sont pas exactement solubles et il faut souvent utiliser des approximations. Dans cette section on se propose d'étudier le modèle de Viana et Bray ferromagnétique à température nulle. L'étude de ce modèle nous permettra en même temps de montrer le type de difficultés qu'on rencontre dans l'analyse des systèmes à connectivité finie, les approximations qu'on utilise et de comparer les résultats des approximations à la solution exacte, qui est connue dans ce cas [46].

Le modèle de Viana et Bray ferromagnétique est caractérisé par une distribution des couplages  $p(J') = \delta(J' - J)$ . Le modèle étant ferromagnétique, on s'attend que la symétrie de répliques ne soit pas brisée même à température nulle. Par conséquent on peut restreindre le problème variationnel (2.9) aux paramètres d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  invariants par permutation des répliques. Dans ce cas, comme on avait remarqué dans la section 2.1.3,  $c(\vec{\sigma})$  a une paramétrisation naturelle en terme de la distribution des champs effectifs  $P(h)$ . L'équation (2.27) se traduit alors en une équation sur  $P(h)$ , qui d'ailleurs peut être obtenue comme une équation auto-cohérente sur la distribution des champs effectifs sans passer par la méthode des répliques [2, 47] (et annexe I du chapitre suivant). En général à température nulle on sait résoudre ce type d'équation au prix des longs calculs. Plutôt que suivre cette démarche nous montrerons une méthode approchée, qui est très utile quand on est confronté au même type de problème en présence de brisure de symétrie des répliques. Dans ce cas obtenir analytiquement une solution exacte semble sans espoir, par contre on peut obtenir des bons résultats en utilisant des méthodes approchées. Puisque la méthode des répliques donne lieu au problème variationnel (2.9), le principe de l'approximation est de résoudre le problème variationnel dans un espace restreint. Par exemple pour le modèle ferromagnétique un bon choix variationnel est :

$$P(h) = (1 - A)\delta(h) + A\delta(h - H) \tag{2.40}$$

qui correspond à diviser les champs effectifs en deux groupes : une fraction  $1 - A$  de champs qui correspondent aux sites non contenus dans l'amas géant, et qui sont donc nuls parce que les amas finis ne peuvent pas être ordonnés, et une fraction  $A$  de champs qui correspondent aux sites contenus dans l'amas géant et ont une valeur  $H$ . Il est clair que le choix du sous-espace variationnel est fondamental pour obtenir des bons résultats, par conséquent il faut mettre tous les ingrédients physiquement pertinents dans la fonction  $P(h)$  variationnelle. Ce qui est remarquable est que, en tâtonnant, la méthode variationnelle peut donner des informations sur les ingrédients physiquement pertinents en montrant une

nette amélioration quand certains aspects de la physique du problème sont inclus dans le choix du sous-espace variationnel.

Quand on injecte le  $c(\vec{\sigma})$  obtenu par (2.40) dans l'énergie libre il faut calculer les deux termes du membre de droite de (2.9) qu'on appellera respectivement entropie effective et énergie effective. L'énergie effective prolongée à  $n = 0$  se calcule facilement :

$$\begin{aligned} -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \beta \mathcal{H}_{VB} &= \frac{\alpha}{2} (\ln \cosh \beta J + A^2 \ln(1 + (\tanh \beta H)^2 \tanh \beta J)) \\ &= \frac{\alpha}{2} (\beta J + (1 - A)^2 \ln 2) + O(e^{-\beta H}, e^{-\beta J}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

Le calcul de l'entropie effective est par contre un peu plus compliqué à cause du logarithme. Ce qu'il faut faire est développer le logarithme, sommer sur  $\{\vec{\sigma}\}$ , prolonger sur  $n$  et ensuite prendre la limite de basse température. Le résultat final est :

$$-\lim_{n \rightarrow 0} \sum_{\vec{\sigma}} c(\vec{\sigma}) \log c(\vec{\sigma}) = \ln 2 [1 - A - (1 - A) \ln(1 - A)] + O(e^{-\beta H}, e^{-\beta J}) \quad (2.42)$$

Maintenant que l'on a obtenu l'énergie libre variationnelle au premier ordre en  $e^{-\beta H}, e^{-\beta J}$  on peut obtenir la condition d'extremisation en dérivant par rapport à  $A$  et ceci redonne bien l'équation (2.25) sur la probabilité  $A$  qu'un site quelconque appartienne à l'amas infini. Le développement jusqu'à l'ordre deux en  $e^{-\beta H}, e^{-\beta J}$  permet d'obtenir l'identité  $H = \pm J$ . On trouve donc une bonne description physique de la phase de basse température, qui a quand même un point faible : en fait la distribution des champs effectifs ne prend pas en compte les fluctuations de la connectivité qui peuvent produire plusieurs pics de Dirac dans la fonction  $P(h)$ . Pour améliorer le résultat variationnel une procédure qui peut être utilisée, et qui a été baptisée "approximation à un défaut" dans la publication 2, consiste à considérer l'équation sur le paramètre d'ordre comme une équation itérative auto-cohérente et donc à faire un pas d'itération en prenant comme condition initiale la solution variationnelle et à obtenir ainsi un nouveau  $c(\vec{\sigma})$ . Cette procédure a été appelée à un défaut parce que la solution variationnelle décrit le système comme deux milieux effectifs, l'amas géant et les amas finis, par contre l'itération permet de tenir compte des fluctuations de la connectivité ou, si l'on veut, des défauts de la structure géométrique locale du réseau. Dans le cas que nous sommes en train de considérer le résultat de cette procédure est assez spectaculaire, en effet après une itération on trouve une distribution de champ effectifs :

$$P_{\pm}(h) = e^{-\alpha A} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha A)^k}{k!} \delta(h \pm kJ) \quad (2.43)$$

qui coïncide avec la solution exacte obtenue en [46]. On peut remarquer que l'existence d'une distribution des champs effectifs avec plusieurs pics de Dirac est liée à la présence d'hétérogénéités, dues au fait que la connectivité d'un site change beaucoup de site à site.

### 2.3.4 Etats fondamentaux et minima de l'énergie

Les systèmes désordonnés sont en général caractérisés par une surface d'énergie très irrégulière avec beaucoup de minima et de cols ; à basse température ceci *peut donner lieu*

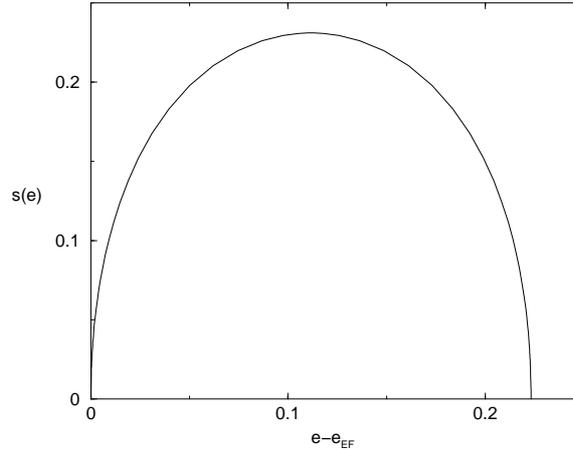


FIG. 2.3 – Logarithme du nombre moyen des minima de l'énergie à densité d'énergie  $e$  fixée, pour le modèle d'Edwards et Anderson à une dimension, tracé en fonction de  $e - e_{EF}$ , où  $e_{EF}$  est la densité d'énergie de l'état fondamental.

à l'existence de plusieurs phases, appelées aussi états purs. Il est important de remarquer que pour les systèmes en dimension finie un paysage d'énergie avec beaucoup de minima locaux n'implique pas forcément l'existence de plusieurs états purs à basse température. On peut considérer comme exemple le modèle d'Edwards et Anderson à une dimension. Dans ce cas on peut facilement calculer le nombre moyen des minima locaux de l'énergie à densité d'énergie  $e$  fixée [48] (voir aussi le chapitre 5). En fig. 2.3 nous avons tracé le logarithme de ce nombre divisé par  $N$  (la taille du système), en fonction de  $e - e_{EF}$ , où  $e_{EF}$  est la densité d'énergie de l'état fondamental. On trouve que le nombre moyen de minima est exponentiel dans la taille du système et dépend de  $e$  de façon non triviale. Pourtant la thermodynamique du modèle d'Edwards et Anderson à une dimension ne présente aucune transition de phase, i.e. le système reste toujours dans la phase paramagnétique. En effet on peut se convaincre que la limite d'un état pur à température zéro est une configuration, appelée état fondamental, qui est stable par rapport à  $k$  retournements de spins, avec  $k$  quelconque mais beaucoup plus petit que le volume du système [49, 50, 51]. Ce qui veut dire qu'on ne peut pas diminuer l'énergie d'un état fondamental en tournant en nombre fini de spins. Par conséquent pour que plusieurs états purs existent à basse température, il faut que le paysage d'énergie contienne plusieurs configurations stables par rapport à  $k$  retournements de spins, avec  $k$  quelconque (mais beaucoup plus petit que le volume du système). L'existence de beaucoup de minima, i.e. configurations stables sous le renversement d'un seul spin, n'est pas une condition suffisante pour que cela survienne.

Cette remarque sur la différence entre minima d'énergie et limite de basse température des états purs est importante pour comprendre une autre différence entre systèmes complètement connectés et systèmes à connectivité finie. En fait pour les systèmes complètement connectés il n'y a pas de différence entre un minimum de l'énergie et un état fondamental. Pour comprendre cela on peut considérer le modèle SK. Si une configuration est stable par

rapport à un retournement d'un spin alors toutes les quantités :

$$\Delta E_i = 2 \sum_j J_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (2.44)$$

sont positives pour tous les sites  $i$ . Ceci signifie que chaque spin doit être pointé dans la même direction que son champ instantané. Par ailleurs une configuration stable par rapport à deux retournements de spins est stable par rapport au retournement d'un spin quelconque et en plus est telle que toutes les quantités :

$$\Delta E_{i,j} = \Delta E_i + \Delta E_j - 4J_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (2.45)$$

sont positives pour toutes les couples  $(i, j)$ . Mais puisque le modèle SK est caractérisé par une connectivité infinie, les couplages doivent aller à zéro comme  $1/\sqrt{N}$  pour redonner une énergie extensive, par conséquent le dernier terme du membre de droite de (2.45) est négligeable par rapport aux deux autres, qui sont d'ordre un. Donc une configuration stable par rapport à un retournement de spin est stable aussi par rapport à deux retournements de spins. On peut généraliser facilement cet argument pour un nombre quelconque (mais d'ordre un par rapport à  $N$ ) de retournements. Le résultat final est que pour le modèle SK, et plus généralement pour tous les modèles à connectivité infinie, les minima d'énergie coïncident avec les états fondamentaux, qui sont la limite de température zéro des états purs. Ceci ne se produit pas pour les systèmes à connectivité finie, qui à nouveau démontrent des caractéristiques proches aux systèmes en dimension finie. En effet dès que la connectivité est finie, les couplages entre spins sont d'ordre un et toutes les configurations stables à un retournement de spin ne le sont pas forcément à deux.

## 2.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons introduit les techniques qui se sont révélées être les plus adaptées pour analyser les systèmes désordonnés à connectivité finie. Nous avons montré que les systèmes désordonnés à connectivité finie sont techniquement plus difficiles que leur correspondants complètement connectés. Les difficultés qui interviennent sont en général reliées à une plus grande richesse physique. Nous l'avons montré sur des exemples simples dans ce chapitre : des éléments caractéristiques des systèmes en dimension finie comme les hétérogénéités et la phase de Griffiths, qui interviennent pour les systèmes à connectivité finie, sont absents pour les modèles complètement connectés. D'autre part des points faibles des modèles à connectivité infinie, comme par exemple la coïncidence entre les minima d'énergie et les états fondamentaux, disparaissent pour les systèmes à connectivité finie. Nous montrerons des autres exemples dans les chapitres suivants comme par exemple la transition localisation-délocalisation qui est présente pour un modèle d'Anderson sur un graphe aléatoire mais absente sur un réseau complètement connecté.

# Chapitre 3

## Transitions de phase en informatique

### 3.1 Introduction

Depuis les années quatre-vingt plusieurs études [22, 23, 52] ont dévoilé un lien très intéressant et fécond entre les problèmes d'optimisation, et la mécanique statistique des systèmes désordonnés. Deux exemples de problèmes d'optimisation sont le voyageur de commerce et la partition d'un graphe. Dans le premier cas, étant donné  $N$  villes et les distances entre elles, un voyageur de commerce doit trouver la tournée la plus courte possible qui lui permet de visiter toutes les villes et revenir au point initial. Dans le deuxième problème, étant donné un graphe, c'est à dire  $N$  points et les arêtes entre eux, on veut connaître la partition optimale du graphe en deux sous-ensembles  $U$  et  $V$ , qui contiennent le même nombre de points et tels que le nombre d'arêtes qui relient  $U$  et  $V$  soit le plus petit possible. Les problèmes d'optimisation sont étudiés par les informaticiens et les mathématiciens. Dans ce domaine de recherche on s'intéresse à des questions fondamentales qui ont en même temps un intérêt énorme pour les applications. Par exemple le problème de la partition d'un graphe intervient dans le dessin des puces électroniques. En fait puisque la propagation d'un signal se fait plus lentement à travers le bord d'une puce qu'à l'intérieur, il est intéressant de savoir, étant donné  $N$  circuits qui doivent être partitionnés entre deux puces, quelle est la partition optimale des circuits entre les deux puces de façon à minimiser les interconnexions. D'une façon très approchée on peut dire que la question typique qu'on se pose est : (étant donné un problème d'optimisation et un ordinateur à disposition pour chercher de le résoudre) quels sont les critères théoriques selon lesquels on peut dire qu'un problème est difficile, comment identifier les problèmes difficiles et quels sont les algorithmes plus adaptés pour résoudre un certain type de problèmes? Pour montrer comment on peut relier un problème d'optimisation à un modèle de mécanique statistique nous considérons la partition d'un graphe [22]. Pour ce problème on définit une fonction de coût qui est le nombre de liens entre  $U$  et  $V$ . Pour une instance donnée, i.e. pour un certain graphe, on veut connaître la configuration optimale, i.e. la partition optimale, qui minimise la fonction de coût. Si, à chaque point  $i$  du graphe on associe un spin d'Ising  $\sigma_i$ , et on définit  $\sigma_i = +1$  si  $i$  appartient à  $U$ , et  $\sigma_i = -1$  si  $i$  appartient à  $V$ , alors trouver

la partition optimale est équivalent à trouver un état fondamental du hamiltonien :

$$H = \sum_{i < j} J_{i,j}(1 - \sigma_i \sigma_j)/2 \quad \text{avec la contrainte} \quad \sum_i \sigma_i = 0 \quad (3.1)$$

où  $J_{i,j} = 1$  si  $i$  et  $j$  sont reliés et zéro autrement. La contrainte en (3.1) impose que  $U$  et  $V$  contiennent le même nombre de points. L'énergie d'un état fondamental est donc égale au nombre minimum de liens qu'on ait obligé de mettre entre  $U$  et  $V$ . Le modèle de mécanique statistique associé à (3.1) est un verre de spin [22, 53, 54] : même si le hamiltonien (3.1) est ferromagnétique, la contrainte en (3.1) introduit suffisamment de frustration pour rendre le modèle vitreux.

De façon générale on peut établir un lien entre les problèmes d'optimisation et la mécanique statistique des systèmes désordonnés à l'aide du dictionnaire suivant :

Optimisation	Mécanique Statistique
instance	échantillon
fonction de coût	énergie
configuration optimale	état fondamental
coût minimum	énergie de l'état fondamental
variable booléenne	spin d'Ising

Par conséquent les problèmes d'optimisation peuvent être analysés en utilisant les techniques développées dans le contexte des systèmes désordonnés. Les trois apports majeurs sont : la méthode de recuit simulé comme algorithme pour trouver des configurations optimales et quasi-optimales [22], l'utilisation de la méthode des répliques pour calculer le coût minimal et les caractéristiques des configurations optimales [30, 29] et l'introduction et l'exploitation du concept de transition de phase en informatique [52]. En retour, le savoir faire et les techniques développées pour résoudre les problèmes d'optimisation ont été appliqués à l'analyse des états fondamentaux des systèmes désordonnés [55]. Par exemple l'état fondamental du modèle d'Edwards et Anderson à deux dimensions sur un réseau carré [56] et du modèle d'Ising en champ aléatoire en dimension quelconque [57] peuvent être trouvés exactement avec des algorithmes très rapides. De plus, les problèmes d'optimisation se révèlent être une source féconde de problèmes théoriques qui obligent à mieux comprendre la physique des systèmes désordonnés.

Dans ce chapitre, après une introduction à la théorie de l'optimisation, nous exposerons les liens, trouvés récemment, entre les transitions de phases et les problèmes d'optimisation. En fait plusieurs problèmes d'optimisation montrent un comportement à seuil lorsqu'on varie un certain paramètre. Par exemple le problème de la satisfiabilité, qui consiste à se demander si un ensemble de  $M$  équations tirées au hasard portant sur  $N$  variables booléennes admet des solutions ou non, change brutalement de comportement lorsque le rapport  $\alpha = M/N$  (pour  $M, N$  allant à l'infini) dépasse un certain seuil critique  $\alpha_c$ . Pour

$M/N < \alpha_c$  il existe au moins une solution avec probabilité un, par contre pour  $M/N > \alpha_c$  le problème n'est pas soluble avec probabilité un. De plus, le temps de résolution  $t(N)$ , nécessaire aux algorithmes pour trouver une solution ou pour prouver qu'il n'y en a pas, augmente avec  $M/N$  au dessous du seuil, atteint son maximum à  $\alpha_c$  pour ensuite décroître. L'analogie avec les phénomènes accompagnant une transition de phase n'est pas fortuite et sera le thème principale de ce chapitre. En particulier après une brève introduction à l'étude des problèmes d'optimisation menée par les mathématiciens et les informaticiens, nous nous concentrerons sur le problème de la satisfiabilité. Nous rappellerons les résultats numériques et analytiques obtenus jusqu'à maintenant, avec une attention particulière au phénomène de la transition de phase. Ensuite nous exposerons nos résultats et nous concluons.

Ce travail a donné lieu à la publication 1.

## 3.2 Un panorama des différentes approches aux problèmes d'optimisation

Dans cette section nous présenterons un bref panorama des différentes approches aux problèmes d'optimisation. Comme on a souligné dans l'introduction quand on est confronté à un problème d'optimisation, il est très intéressant de savoir :

1. quels sont les critères théoriques selon lesquels on peut dire qu'un certain problème est difficile.
2. comment identifier les problèmes difficiles.
3. quels sont les algorithmes plus adaptés pour résoudre un certain type de problèmes.

Dans la suite, d'abord nous exposerons d'une façon non formelle la théorie de la complexité computationnelle, qui donne une réponse aux deux premières questions. Ensuite nous discuterons de la pertinence de cette notion de complexité et nous exposerons une notion différente et complémentaire de complexité basée sur la notion de "difficulté" typique. Enfin, concernant la troisième question, nous rappellerons les études effectuées sur les algorithmes.

### 3.2.1 Une introduction informelle à la théorie de la complexité computationnelle

Dans cette introduction nous exposerons d'une façon non formelle la théorie mathématique de la complexité computationnelle [58]. Le but de cette théorie est de donner une définition mathématique de complexité ou difficulté computationnelle, d'identifier la classe des problèmes difficiles et donner des critères pour pouvoir établir si un problème est compliqué ou non. La première étape consiste à définir le type de problèmes qu'on étudie. La classe considérée est celle des problèmes de décision, dont la solution consiste à savoir s'il y a au moins une configuration qui vérifie une certaine propriété, qu'on appellera  $A$ . Les

problèmes de décision consistent donc à répondre à une question (est-ce-qu'il y a au moins une configuration qui vérifie la propriété  $A$  ?) qui a comme réponse seulement oui ou non. Par exemple le voyageur de commerce, comme il a été défini dans l'introduction, n'est pas un problème de décision, pour le rendre tel, il ne faut pas se demander quel est la tournée optimale, mais si, pour une constante  $B$  fixée, il existe une tournée avec longueur inférieure à  $B$ .

Le concept de complexité computationnelle est relié à la comparaison entre le temps maximal qu'une machine met, en utilisant un certain algorithme, pour résoudre le problème et le nombre  $N$  de degrés de liberté qui interviennent, c'est à dire la taille du problème. Il faut donc d'abord définir le langage avec lequel "on pose le problème" et donner une définition abstraite de machine. Ceci a été effectué et la machine abstraite à la quelle on abouti s'appelle machine de Turing. Ensuite, dans ce cadre, on peut définir la classe  $P$  des problèmes polynômiaux : un problème de décision appartient à la classe  $P$  s'il existe un algorithme qui *pour chaque instance* le résout en un temps polynômial en la taille du problème. En général on s'intéresse à la classe  $NP$  des problèmes qui satisfont la condition de vérifiabilité polynômiale, c'est à dire tels qu'on peut vérifier si une configuration résout le problème en un temps polynômial en la taille du problème. Par exemple le voyageur de commerce appartient à la classe  $NP$  parce que étant donné un tour, on peut vérifier si sa longueur est inférieure à  $B$  en un temps qui est du même ordre que le nombre de sites. La classe  $P$  identifie alors les problèmes de décision "faciles" qui sont dans la classe  $NP$ , les problèmes "difficiles" étant ceux qui ne peuvent pas être *toujours* résolus dans un temps polynômial. La difficulté d'introduire la notion de complexité est lié au fait que même si personne ne connaît jusqu'à maintenant un algorithme pour résoudre dans un temps polynômial un certain problème, comment peut-on exclure la possibilité qu'un tel algorithme existe ? On voit bien que ceci est le point crucial de la théorie de la complexité, parce qu'arriver à pouvoir définir quand un problème est compliqué, et comment on fait pour le reconnaître comme tel, permet d'être sur qu'un problème est *intrinsèquement* difficile et savoir donc a priori qu'aucun algorithme pourra toujours le résoudre en un temps polynômial.

Les fondements de la théorie de la complexité, ou plus exactement, de la  $NP$ -complétude, sont contenus dans les travaux de Cook [59] des années soixante, dans lesquels il définit d'abord la relation de "réductibilité polynômiale" entre deux problèmes d'optimisation  $A$  et  $B$  :  $A$  est réductible de façon polynômiale à  $B$  si on peut réduire le problème  $A$  dans le problème  $B$  en un temps polynômial, donc si  $B$  appartient à  $P$  alors  $A$  aussi. Ensuite il introduisit la relation "d'équivalence polynômiale" :  $A$  et  $B$  sont équivalents de façon polynômiale si  $A$  peut être réduit de façon polynômiale à  $B$  et viceversa. Enfin il donna la définition de  $NP$ -complétude : un problème  $A$  est  $NP$ -complet si chaque problème appartenant à la classe  $NP$  peut être réduit en un temps polynômial en  $A$ . Ceci implique que si un problème  $NP$ -complet était polynômial alors tous les problèmes  $NP$  seraient polynômiaux. Bien sûr, on pense que ce n'est pas le cas, c'est-à-dire que la classe  $P$  est seulement un sous-ensemble de la classe  $NP$  et que dans la classe  $NP$  il y a aussi des problèmes extrêmement difficiles qui appartiennent à la classe  $NP$ -complète, mais jusqu'à maintenant personne n'a

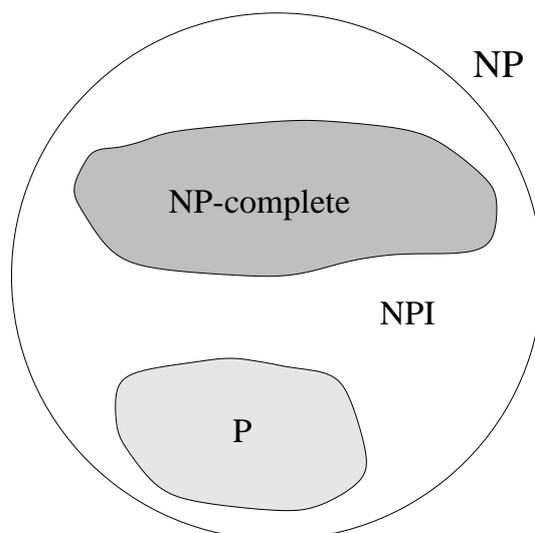


FIG. 3.1 – Nous avons dessiné l'ensemble des problèmes NP. Il y a trois sous-classes : les problèmes P (faciles) qui peuvent être résolus en un temps polynômiaux, les problèmes NP-complets qui sont les plus difficiles dans la classe NP et les problèmes NPI qui sont de difficulté intermédiaire.

été capable de le démontrer <sup>1</sup>.

L'autre résultat remarquable de Cook a été de montrer qu'un problème particulier dans la classe NP, le problème de la satisfiabilité, est NP-complet. À partir de ce résultat il est relativement facile de montrer qu'un problème est NP-complet, en effet il est suffisant de montrer qu'il est équivalent de façon polynômiale au problème de la satisfiabilité. Suivant cette procédure il a été montré qu'une centaine de problèmes différents de logique, de théorie des nombres, de théorie des graphes et d'algèbre sont NP-complets [58]. Le voyageur de commerce et la partition d'un graphe, que nous avons introduit précédemment, sont deux exemples. Un autre, provenant de la physique statistique, est la recherche de l'état fondamental du modèle d'Edwards et Anderson en dimension plus grande que deux [60, 61].

Enfin, il est intéressant de souligner que les classes P et NP-complète n'épuisent pas l'ensemble des problèmes NP. En effet il a été démontré, sous l'hypothèse  $NP \neq P$ , qu'il existe des problèmes, appelés NPI, qui ne sont pas polynômiaux et tels que chaque problème NP ne peut pas être réduit à eux en un temps polynômial. Les problèmes pour lesquels l'appartenance à la classe NPI a été prouvé sont en général construits ad hoc et ne sont pas très "naturels". Il y a par contre des problèmes pour lesquels aucune démonstration a été faite, mais qui, à cause de leur propriétés, sont considérés être des bons candidats [58] pour appartenir à la classe NPI. Un exemple est le problème des nombres composés : étant donné un entier positif  $K$  on veut savoir s'il existe deux nombres entiers  $m$  et  $n$ , plus

---

<sup>1</sup>Démontrer l'impossibilité de résoudre en un temps polynomial tous les problèmes NP-complets fait partie des sept questions fondamentales ouvertes en mathématiques énoncées au congrès Clay de Paris en mai 2000.

grands que un, tels que  $K = mn$ .

Avant de terminer cette section il est important de remarquer que la division de la classe NP en problèmes P (faciles), problèmes NPI (intermédiaires) et problèmes NP - complets (difficiles) est basée entièrement sur le fait qu'on prend la limite ("thermodynamique") de  $N$  infini. Ceci est clairement nécessaire pour pouvoir obtenir une théorie générale, mais au même temps il ne faut pas oublier que pour des problèmes avec  $N$  fini, comme c'est toujours le cas, cette dichotomie n'est pas toujours correcte. Par exemple pour  $N < 20$  un temps de résolution exponentiel  $t_{exp} = 2^N$  est sans doute à préférer à un temps polynômial  $t_p = N^5$ .

### 3.2.2 Deux approches différentes : le pessimiste et le pragmatique

Dans la théorie de la complexité computationnelle pour décider si un problème est compliqué, il faut considérer le temps de résolution pour chacune des instances possibles. S'il y en a au moins une pour laquelle le temps n'est pas polynômial, alors le problème sera considéré comme "difficile", quelque soit le temps associé aux autres instances. Cette notion de difficulté est liée à une vision "pessimiste" : un problème avec  $\mathcal{N}$  instances possibles, qui n'est pas soluble dans un temps polynômial seulement pour une instance, sera quand même considéré comme un problème difficile. Puisque en général on s'intéresse à la limite des tailles du problème et des nombres d'instances infinis, l'approche qui consiste à se concentrer sur l'instance la plus difficile pourrait se révéler trompeuse, parce que les instances difficiles pourraient être des événements très rares, qui n'ont rien à voir avec le cas typique. Et ceci en fait arrive dans plusieurs cas [22]. Il faudrait, bien sûr, connaître la loi de distribution des instances pour savoir si la notion de complexité computationnelle exposée précédemment est pertinente ou non pour un problème particulier.

En général la loi de distribution des instances n'est pas connue ou dépend du cas considéré. Une approche "pragmatique" alors est de considérer une certaine distribution dans l'espace des instances et d'étudier le comportement typique du problème. C'est dans ce contexte que les problèmes d'optimisation peuvent être décrits comme des systèmes désordonnés. L'utilisation des outils de la mécanique statistique des systèmes désordonnés permet donc de répondre aux questions sur les "caractéristiques typiques" des problèmes d'optimisation. Ce type d'approche "pragmatique" a les mêmes avantages et les mêmes faiblesses que l'approche "pessimiste" ; en effet on peut obtenir des résultats généraux, ce qui est sans doute très intéressant, mais à condition de considérer une distribution des instances, qui pourrait n'avoir rien à voir avec celle qui intervient dans un problème particulier .

Les deux types de démarches sont donc tous les deux très intéressants et complémentaires. Dans les cas réels, les renseignements donnés par ces deux approches peuvent être très utiles, même si la notion correspondante de complexité ne s'applique pas exactement.

### 3.2.3 Les algorithmes

La recherche effectuée sur les algorithmes est principalement divisée en deux domaines : un plus mathématique et l'autre plus phénoménologique. Le premier est la suite naturelle de la théorie de la NP-complétude décrite précédemment. Une fois qu'on sait qu'un problème est intrinsèquement difficile on peut abandonner l'espoir de trouver un algorithme qui nous donne la solution toujours en un temps polynômial. Si l'on veut être sûr d'obtenir un résultat dans un temps polynômial il faut donc accepter d'avoir comme résultat une solution approchée. En général on juge la qualité d'un algorithme selon la valeur de la fonction de coût pour les solutions approchées. Pour une instance  $I$  donnée on considère le rapport  $R(I)$  entre la fonction de coût évaluée dans la solution approchée et évaluée dans la solution optimale. La qualité d'un algorithme est alors déterminée en terme de la valeur maximale atteinte par  $R(I)$ , quand  $I$  varie dans l'espace des instances possibles, le maximum de  $R(I)$  étant relié à la pire performance de l'algorithme. En général on appelle performance absolue le maximum de  $R(I)$ . Par conséquent beaucoup d'intérêt est focalisé sur la construction d'algorithmes qui trouvent une solution approchée en un temps polynômial et ont une bonne performance. Donc d'une part les chercheurs inventent des algorithmes de plus en plus performants et d'autre part ils calculent ou bornent le maximum de  $R(I)$ . Comme la théorie de la NP-complétude, cette approche nous donne des informations sur le pire comportement qu'un certain algorithme peut avoir. Comment on l'a déjà souligné le pire des cas pourrait avoir une probabilité extrêmement faible et donc pourrait n'être pas représentatif de la situation typique. Pour cette raison récemment il y a de plus en plus d'études sur la performance des algorithmes quand les instances sont prises au hasard avec une certaine distribution. Ces études sont consacrés à l'analyse de  $R(I)$  en tant que variable aléatoire, par exemple on cherche à établir des bornes sur sa valeur moyenne et sa déviation standard.

Parallèlement à cette démarche assez mathématique et formelle, il existe une autre approche plutôt phénoménologique qui consiste à rechercher des algorithmes qui trouvent des "bonnes" solutions dans un temps acceptable. Ces algorithmes sont appelés heuristiques parce que en général ne sont pas analysables mathématiquement, étant trop compliqués. Alors on juge leur performance de façon heuristique en analysant leur comportement vis à vis de certains problèmes d'optimisation, comme par exemple le problème de la satisfiabilité, qui sont utilisés comme un test d'essai. En général les algorithmes heuristiques [62] sont utilisés pour obtenir des solutions optimales quand la taille  $N$  du problème n'est pas trop grande ou pour obtenir des solutions approchées pour des grandes valeurs de  $N$ . Dans le premier cas ils sont appelés complets parce que ils résolvent exactement le problème. Ces algorithmes peuvent arriver à explorer tout l'espace des configurations, mais une bonne heuristique permet, dans la majorité de cas, de résoudre le problème sans explorer tout l'espace. Dans le deuxième cas les algorithmes sont censés donner une "bonne" solution, qui même pour des petites valeurs de  $N$  pourrait ne pas coïncider avec la solution optimale.

### 3.3 Introduction au problème de la satisfiabilité

Dans les sections précédentes nous avons souligné que le problème de la satisfiabilité est au coeur de l'analyse des problèmes d'optimisation : d'une part c'est un des exemples principaux de problème NP-complet et d'autre part le comportement des algorithmes heuristiques vis-à-vis du problème de la satisfiabilité est un critère de jugement de leur performance. Dans la suite nous exposerons les études numériques et analytiques qui ont été effectuées sur le problème de la satisfiabilité, plus précisément sur une version particulière appelée K-SAT aléatoire. Ce problème montre un comportement à seuil, qui correspond à une transition de phase dans le modèle de mécanique statistique correspondant. Après avoir défini le modèle, nous rappellerons les principaux résultats analytiques et numériques obtenus. Nous présenterons ensuite notre travail.

#### 3.3.1 Définition du problème

Dans la suite on s'intéressera au problème de la satisfiabilité (SAT) [58], ou plus précisément à une version particulière qui s'appelle K-SAT et qui est définie de la façon suivante. On considère  $N$  variables booléennes  $\{x_i = \text{vraie, fausse}\}$ . On prend  $K$  variables, et pour chacune on définit  $v_i$  égale à  $x_i$  ou à sa négation  $\bar{x}_i$ . La formule obtenue en prenant le OU logique entre les  $v_i$  s'appelle clause. Un exemple de clause pour  $K=3$  est :

$$C = (x_{i_1})OU(\bar{x}_{i_2})OU(x_{i_3})$$

Une instance  $I$  du problème de la K-SAT correspond à prendre le ET logique entre  $M$  clauses :

$$I = C_1 ET C_2 ET \cdots C_M$$

Une solution du problème de la K-SAT, associé à une instance  $I$ , correspond à une configuration  $\{x_i\}$  pour laquelle  $I$  est vraie. Comme on a souligné dans la section précédente dans l'approche de mécanique statistique on veut étudier le comportement typique. Pour le faire on prend les instances au hasard : c'est-à-dire que pour une clause donnée, on prend  $v_i$  égale à  $x_i$  ou à sa négation  $\bar{x}_i$  avec la même probabilité et une instance est formée par  $M$  clauses tirées au hasard et de façon indépendante. Par conséquent on s'intéresse au problème de la K-SAT en termes probabilistes : par exemple on veut savoir, pour une instance  $I$  prise au hasard, la probabilité qu'il existe une solution.

Le modèle de mécanique statistique correspondant à la K-SAT [63] est défini de la façon suivante. A chaque variable booléenne  $x_i$  on associe un spin d'Ising  $\sigma_i$  égal à  $+1$  ( $-1$ ) si la variable  $x_i$  est vraie (fausse). A l'ensemble des clauses  $\{C_l\}$  on associe une matrice  $\Delta$ , telle que l'élément  $\Delta_{l,i}$  est égale à  $-1$  ( $= +1$ ) si la clause  $C_l$  contient  $\bar{x}_i$  ( $x_i$ ) et zéro autrement. L'énergie du modèle de spin est alors :

$$E = \sum_{l=1}^M \delta \left( \sum_{i=1}^N \Delta_{l,i} \sigma_i - K \right) \quad (3.2)$$

où  $\delta(x; y)$  indique la delta de Kronecker. Pour montrer un lien plus strict avec un verre de spin dilué, cette énergie peut se réécrire de la façon suivante :

$$E = \frac{M}{2^K} + \sum_{r=1}^K (-1)^r \sum_{i_1 < \dots < i_r} J_{i_1, \dots, i_r} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_r} \quad (3.3)$$

où les couplages sont définis comme :

$$J_{i_1, \dots, i_r} = \frac{1}{2^K} \sum_{l=1}^M \Delta_{l, i_1} \dots \Delta_{l, i_r} \quad (3.4)$$

De plus, la structure formée en joignant ensemble les sites associés aux variables qui apparaissent dans les mêmes clauses est un hypergraphe aléatoire avec un nombre moyen  $\alpha K$  de clauses par site. La probabilité qu'une variable appartienne à  $l$  clauses est donc  $p(l) = e^{-K\alpha} (\alpha K)^l / l!$ . Si la densité d'énergie libre obtenue à partir de  $E$  est auto-moyennante, ce qu'on va supposer dans la suite <sup>2</sup>, alors le calcul des quantités thermodynamique à très basse température donne un renseignement sur le comportement typique. Par exemple grâce à la densité d'énergie et à la densité d'entropie à température nulle, on peut connaître le nombre de clauses violées par les configurations optimales, et le logarithme du nombre de ces dernières divisé par  $N$ . Enfin, une autre observable qui s'est révélée être très pertinente pour l'analyse de la K-SAT et qui a été appelé squelette en [52] est la fraction  $B$  des variables qui ont toujours la même valeur booléenne dans tous les états fondamentaux (à  $\alpha$  fixé).

### 3.3.2 Simulations numériques et résultats mathématiques

Les simulations numériques [65, 66] ont montrés que la K-SAT aléatoire est caractérisée par un comportement à seuil lorsque le nombre de clauses et de variables divergent avec un rapport  $\alpha = M/N$  fixe. Si  $\alpha < \alpha_c(K)$  la probabilité qu'il existe une solution tend vers un avec  $N$ . Par contre si  $\alpha > \alpha_c(K)$  la probabilité qu'il existe une solution tend vers zéro avec  $N$ . En fig. 3.2 on trace la fraction des instances non-satisfiables en fonction de  $\alpha$  pour  $K = 3$  et différentes valeurs de  $N$ . La valeur du seuil prédit par les simulations numériques est  $\alpha_c(3) \simeq 4.27$ . Ces résultats ont été obtenus en [65, 66] en utilisant l'algorithme complet de Davis et Putnam [67]. De plus, le temps nécessaire à l'algorithme pour trouver qu'une certaine instance est satisfiable ou non satisfiable augmente avec  $\alpha$  au dessous du seuil, atteint son maximum à  $\alpha_c$  pour ensuite décroître. La corrélation entre le seuil et l'augmentation du temps de résolution a été observée dans des autres problèmes d'optimisation [68, 69]. En fig. 3.3 le temps de résolution pour l'algorithme de Davis et Putnam [67], est tracée en fonction de  $\alpha$  pour  $K = 3$  et différentes valeurs de  $N$  [65, 66]. L'allure de la courbe en fig.

<sup>2</sup>En fait le seul résultat rigoureux [64] concernant l'auto-moyennage est que à température nulle (pour les configuration optimales) le rapport entre la variance de l'énergie et sa valeur moyenne tend vers zéro dans la limite thermodynamique. Pourtant il n'a pas été démontré que la limite de la valeur moyenne existe.

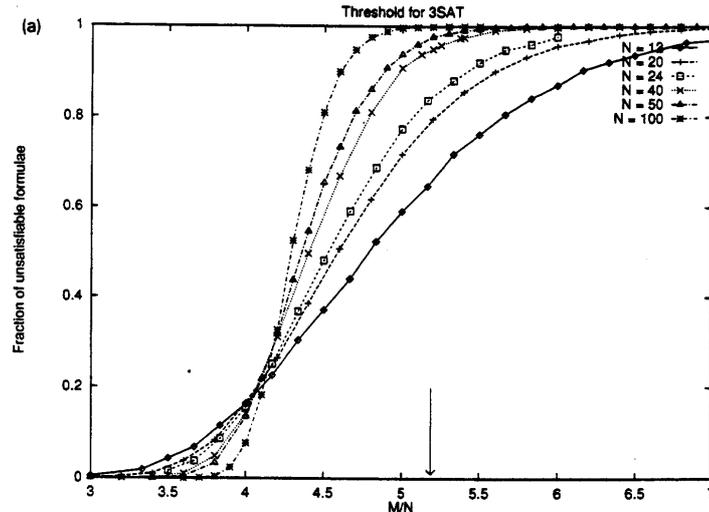


FIG. 3.2 – La fraction des instances non-satisfiables est tracée en fonction de  $\alpha = M/N$  pour  $K = 3$  et  $N = 12, 20, 24, 40, 50, 100$ . On trouve un comportement à seuil pour  $N$  infini : pour  $\alpha < \alpha_c$  ( $\alpha > \alpha_c$ ) la probabilité qu’une instance soit satisfiable est un (zéro) avec probabilité un.

3.3 peut être comprise facilement en remarquant que pour de petites valeurs de  $\alpha$  il y a très peu de contraintes et beaucoup de solutions, donc l’algorithme peut montrer facilement qu’une certaine instance est satisfiable. De la même façon pour  $\alpha$  très grand il y a beaucoup de contraintes et par conséquent l’algorithme trouve facilement une contradiction logique et qu’il n’existe pas de configurations satisfaisantes. Par contre quand  $\alpha$  est près du seuil un algorithme met beaucoup de temps avant de trouver une configuration satisfaisante ou une contradiction logique. Les cas plus compliqués, pour lesquels le temps de résolution est plus long, se trouvent alors quand la probabilité qu’une instance soit satisfiable est à peu près égale à  $1/2$ , dans ce cas les instances satisfiables sont “très proches d’être non satisfiables” et vice-versa. Même si l’allure de la courbe en fig. 3.3 est la même pour  $K = 2$  et  $K \geq 3$  on remarque une différence entre les deux cas en regardant comment le maximum varie avec  $N$ . Pour  $K = 2$  la variation est polynômiale en  $N$ , par contre pour  $K \geq 3$ , la variation est exponentielle. Une autre différence entre ces deux cas peut se retrouver dans le comportement du squelette  $B$ . Pour  $\alpha < \alpha_c$   $B$  est nul, tandis que pour  $\alpha > \alpha_c$  on trouve respectivement un changement de  $B$  continu et discontinu au seuil pour  $K = 2$  et  $K = 3$ . En particulier  $B \sim 0.4$  au seuil pour la 3-SAT.

Suivant l’analogie avec les transitions de phase et pour comprendre mieux la différence entre  $K = 2$  et  $K \geq 3$ , une analyse des effets de taille finie a été effectuée pour  $K = 2, 3, 4, 5, 6$  [65, 66] et pour un problème, appelé  $2+p$ -SAT [70, 52], qui est intermédiaire entre la 2-SAT et la 3-SAT. La  $2+p$ -SAT correspond à des instances qui contiennent une fraction  $p$  de clauses de longueur 3 et une fraction  $1-p$  de clause de longueur 2. L’analyse des effets de taille finie avait comme but de déterminer la taille de la région critique en fig. 3.2, c’est à dire la valeur de l’exposant  $\nu$  tel que toutes les courbes en fig. 3.2 se superposent si tracées

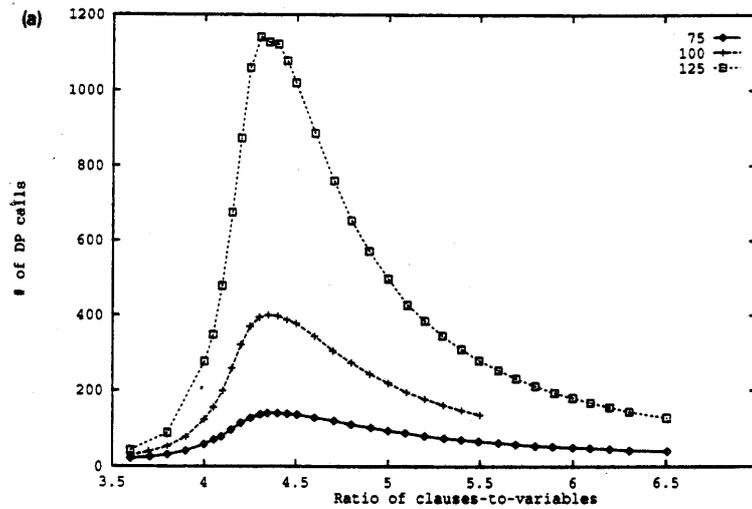


FIG. 3.3 – Temps de résolution pour l’algorithme de Davis et Putnam, tracé en fonction de  $\alpha$  pour  $K = 3$  et  $N = 75, 100, 125$ . On peut remarquer que le temps de résolution est maximum pour  $\alpha$  près du seuil  $\alpha_c \simeq 4.27$ .

par rapport à la variable  $(\alpha - \alpha_c)N^{1/\nu}$ . En fig. 3.4 les valeurs numériques de  $\nu$  obtenues en [70, 52] sont tracées pour différentes valeurs de  $p$  pour la 2+p-SAT. Pour la 2-SAT la valeur numérique de  $\nu$  est compatible avec 3 et décroît jusqu’à 1.5 pour la 3-SAT. De plus, le comportement de la 2+p-SAT semble changer vers  $p_0 \simeq 0.4$ . Pour  $p < p_0$  on trouve le comportement caractéristique de la 2-SAT : à la transition la squelette commence à croître continûment et le temps maximum de résolution est polynômial, tandis que pour  $p > p_0$  on trouve les caractéristiques de la 3-SAT : à la transition la squelette croît discontinûment et le temps maximum de résolution est exponentiel.

Lorsque  $\alpha > \alpha_c$  la K-SAT aléatoire devient non satisfiable avec probabilité un ; il est donc intéressant dans ce régime de se demander quelles sont les configurations optimales dans lesquelles la fonction de coût atteint sa valeur minimale. Ce type de problème, ou plutôt sa version comme problème de décision s’appelle MAX-K-SAT [58]. Dans la suite on rappellera très rapidement les résultats mathématiques, qui ont été obtenus pour la K-SAT et MAX-K-SAT pour différentes valeurs de  $K$ . On ne considérera pas le cas trivial correspondant à  $K = 1$ .

- Pour  $K=2$  il a été prouvé grâce à une correspondance avec un problème de théorie de graphes dirigés que la valeur du seuil  $\alpha_c$  est égale à un [71]. De plus, la 2-SAT est un problème P [58] et un algorithme qui permet de la résoudre en un temps polynômial pour  $\alpha < \alpha_c$  a été construit en [72]. Pour  $\alpha > \alpha_c$  la MAX-2-SAT est par contre un problème NP-complet [58]. Il a été récemment démontré que la valeur de l’exposant  $\nu$  est trois [73].
- Pour  $K \geq 3$  la K-SAT et la MAX-K-SAT sont des problèmes NP-complets pour

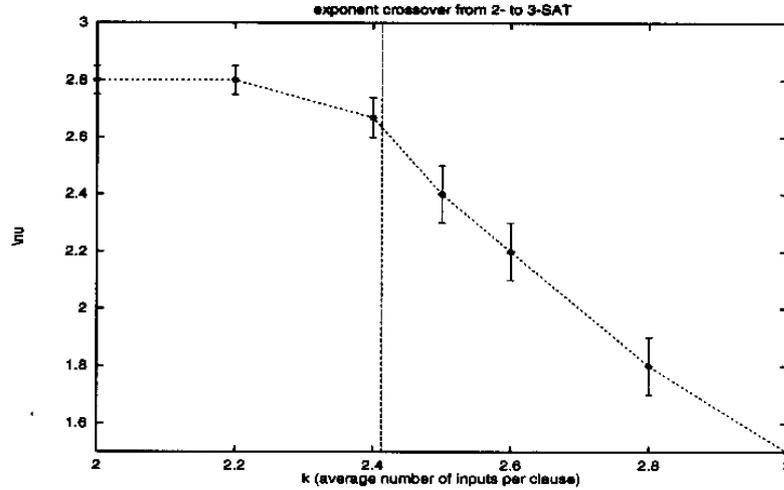


FIG. 3.4 – L'exposant  $\nu$ , qui correspond à la largeur de la région critique, est tracé pour la 2+p-SAT pour différentes valeurs de  $p$ . Pour  $p=0$  et  $p=1$  les valeurs numériques sont compatibles respectivement avec  $\nu = 3$  et  $\nu = 1.5$ .

toutes les valeurs de  $\alpha$ . Une valeur approchée de  $\alpha_c$  est connue grâce à des simulations numériques pour  $K = 3, 4, 5, 6$  [65, 66]. D'un point de vue mathématique on connaît seulement des bornes sur la valeur exacte [74, 75, 76], qui, bien sûr, sont compatibles avec les résultats numériques. Les meilleures bornes supérieure et inférieure sont respectivement  $\alpha_{inf} \simeq 3.003$  et  $\alpha_{sup} \simeq 4.504$ . Concernant  $\nu$ , on connaît seulement sa valeur numérique obtenue grâce à des simulations.

- La 2+p-SAT est un problème NP-complet pour  $p \neq 0$ . Concernant la valeur du seuil, il a été prouvé<sup>3</sup> que  $\alpha_c(2+p) = 1/(1-p)$  pour  $p < 0.4$  [77].

### 3.3.3 La théorie RS

Dans plusieurs articles [63, 78, 79] Monasson et Zecchina ont analysé le problème de la K-SAT aléatoire d'un point de vue de la mécanique statistique des systèmes désordonnés. Utilisant la méthode des répliques ils se sont ramenés au problème variationnel suivant sur

<sup>3</sup>En fait, il est très facile de prouver que  $\alpha_c(2+p) \leq 1/(1-p)$ . L'argument est le suivant : puisque il y a une fraction  $1-p$  de clauses du type 2-SAT et on sait que le seuil de la 2-SAT est égale à un, la 2+p-SAT deviendra sûrement non-satisfiable quand  $\alpha > 1/(1-p)$  et donc  $\alpha_c(2+p) \leq 1/(1-p)$ .

le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  (cf. équation 2.9) :

$$f(K, \alpha, \beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\beta n} \sum_{\vec{\sigma}} c(\vec{\sigma}) \ln c(\vec{\sigma}) - \frac{\alpha}{\beta n} \ln \left[ \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_K} c(\vec{\sigma}_1) \cdots c(\vec{\sigma}_K) \prod_{a=1}^n \left( 1 + (e^{-\beta} - 1) \prod_{a=1}^n \delta_{\sigma_i^a, 1} \right) \right] \right\} \quad (3.5)$$

Ensuite ils ont cherché un  $c(\vec{\sigma})$ , qui soit un extremum de (3.5) dans la limite de température nulle et invariant par rapport aux permutations des répliques. Comme on a souligné dans le chapitre précédent, la paramétrisation naturelle pour un  $c(\vec{\sigma})$  ayant cette symétrie est obtenue à travers une distribution des champs effectifs  $P(h)$  (2.17). L'extremisation dans le sous-espace des  $c(\vec{\sigma})$  invariants par permutations des répliques se traduit, dans la limite de température nulle, en l'équation suivante sur la distribution des champs effectifs [78] :

$$P(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \cos(uh) \exp \left( -\frac{\alpha K}{2^{K-1}} + \alpha K \int_0^{+\infty} \prod_{l=1}^{K-1} dh_l P(h_l) \cos(u \min(1/2, h_1, \dots, h_{K-1})) \right) \quad (3.6)$$

Comme on avait remarqué dans le chapitre précédent l'équation sur  $P(h)$  peut être obtenue sans répliques comme une équation auto-cohérente sur la distribution des champs effectifs. Cette dérivation, qui utilise la méthode de cavité [2] et que nous présentons dans l'annexe I pour  $K=2$ , est très utile pour comprendre la signification physique de la fonction  $P(h)$ , et surtout pour montrer quelles sont les hypothèses physiques associées à l'invariance par permutations des répliques. La caractéristique de (3.6) d'être une équation auto-cohérente se manifeste en développant l'exponentielle et effectuant l'intégrale sur la variable  $u$ . Par exemple pour  $K = 2$  on obtient :

$$P(h) = \sum_{l=0}^{\infty} e^{-2\alpha} \frac{(2\alpha)^l}{l!} \int_0^{+\infty} \prod_{j=2}^{l+1} dh_j P(h_j) \times \sum_{m=0}^l \sum_{a_1 < \dots < a_m} \frac{1}{2^m} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_m = \pm 1} \delta \left( h - \sum_{j=1}^m \sigma_j \min(1/2, h_{a_j}) \right) \quad (3.7)$$

Comme on a déjà remarqué la 2-SAT correspond donc à un système de spins sur un réseau aléatoire avec une interaction du type défini en (3.2). L'interprétation de (3.7) est alors la suivante : chaque terme  $l$  correspond au cas où un spin donné (i.e. la variable correspondante) associé au champ  $h$  se retrouve dans  $l$  clauses. Cet événement a une probabilité  $e^{-2\alpha} (2\alpha)^l / l!$ . Les champs effectifs des voisins sont des variables aléatoires distribuées selon la fonction  $P(h_i)$ , voir fig. 3.5. Les  $l$  spins voisins interagissent avec le spin associé au champ  $h$  et induisent une distribution des champs effectif  $P(h)$ . Puisque il n'y a aucune différence

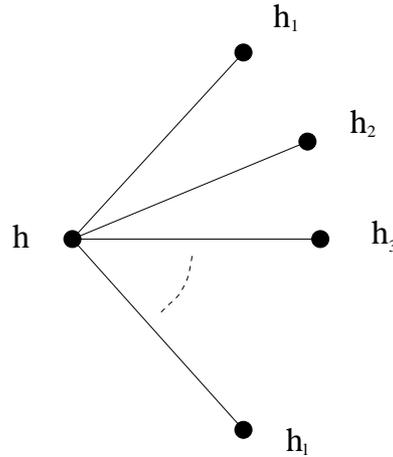


FIG. 3.5 – Représentation graphique du 1<sup>ème</sup> terme de l'équation auto-cohérente (3.7) sur la distribution des champs effectifs.

entre les sites, la distribution  $P(h)$  est la même pour les champs des voisins et pour  $h$ , on obtient donc une équation auto-cohérente sur  $P(h)$ . S'il y avait plusieurs états purs  $\gamma$ , chacun avec un poids  $w_\gamma$ , on aurait que les champs  $h_1^\gamma, \dots, h_l^\gamma$  seraient des variables corrélées par le fait d'appartenir au même état pur, donc la loi de probabilité jointe de  $h_1^\gamma, \dots, h_l^\gamma$  ne pourrait plus se décomposer en un produit.

### Résultats et image physique donnés par la solution RS

L'équation (3.6) admet des solutions du type :

$$P(h) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} r_l \delta(h - l/2w) \quad (3.8)$$

où  $w$  est un nombre entier positif. Il est important de remarquer que en (3.8) la fonction delta concentrée en zéro a une interprétation complètement différente par rapport aux autres fonctions delta. En effet la distribution des champs effectifs à basse température a un support sur les champs d'ordre un, mais aussi sur des champs d'ordre  $1/\beta$ . La différence physique entre ces deux comportements d'échelle est manifeste si l'on considère les aimantations locales. Si un champ effectif reste d'ordre un quand la température s'annule alors l'aimantation correspondante est égale au signe du champ et le spin (la variable) correspondant est gelé (complètement contrainte). Par contre si un champ effectif tend vers zéro comme la température alors l'aimantation correspondante peut avoir un module plus petit que un, ce qui veut dire que le spin (la variable) n'est pas gelé (complètement contrainte). Quand la température tend vers zéro le support sur les champs d'ordre  $1/\beta$  se concentre en zéro et donne lieu à une fonction delta concentré en zéro. Donc en (3.6)  $r_0$  est égale à la probabilité qu'un champ effectif soit d'ordre  $1/\beta$  ou plus petit et  $1 - r_0$  est égale à la probabilité qu'un champ effectif soit d'ordre un. En injectant l'expression (3.8) dans

l'équation (3.6) on trouve que l'équation se "ferme" et on se ramène à des équations sur  $r_l$  <sup>4</sup>. Monasson et Zecchina ont analysé la transition de la K-SAT en résolvant numériquement pour  $w$  fini les équations sur  $r_l$  et en extrapolant les résultats à  $w = \infty$ . De plus, ils ont calculé une expansion de l'entropie en fonction de  $\alpha$  autour de  $\alpha = 0$ . L'image physique et les résultats qui en découlent sont les suivants :

- Il y a une phase satisfiable pour  $\alpha < \alpha_c(K)$  dans laquelle l'énergie est égale à zéro et la solution de l'équation (3.6) est simplement une fonction delta concentrée en zéro, ce qui veut dire qu'aucun spin n'est gelé ( $r_0 = 1$ ). Dans cette phase l'entropie, qui correspond au nombre de configurations satisfaisantes, décroît avec  $\alpha$  mais reste finie à  $\alpha_c$ . De plus, il y a un bon accord entre l'entropie calculée analytiquement et le résultat des simulations numériques.
- Pour  $\alpha > \alpha_c(K)$ , l'énergie est positive et croît continûment. Tandis que la fraction de spins gelés ( $r_0$ ) croît continûment ou discontinûment à partir de zéro respectivement selon que  $K = 2$  ou  $K \geq 3$ . Dans cette phase il n'y pas de configurations satisfaisantes et l'analyse de température zéro donne un renseignement sur les configurations optimales, qui minimisent la fonction de coût. En particulier l'entropie est reliée à leur nombre. Le fait que l'entropie soit continue et positive à la transition implique que, à  $\alpha_c$ , un nombre exponentiel de solutions disparaissent brutalement (à  $\alpha_c$  d'un coup, un grand nombre de boucle de contradiction logique apparaît). La valeur de  $\alpha_c(K)$  obtenue par le calcul RS est égale pour  $K = 2$  à la valeur exacte  $\alpha_c(2) = 1$ , tandis que pour  $K \geq 3$  la valeur analytique est toujours plus grande que la valeur numérique, en particulier pour la 3-SAT la valeur numérique est  $\alpha_c^{num} \simeq 4.27$  et la valeur analytique  $\alpha_c^{anal} \simeq 4.6$ . Cette différence est reliée au fait que l'hypothèse de la symétrie par rapport aux permutations des répliques n'est pas correcte dans la phase non-satisfiable (publication I).
- Concernant la  $2 + p - SAT$ , en fig. 3.6 les valeurs analytiques de  $\alpha_c(2 + p)$  sont comparées aux valeurs numériques [79, 52, 70]. Pour  $p \lesssim 0.4$  l'accorde est parfait. Il faut remarquer que la valeur analytique coïncide avec le résultat rigoureux mathématique  $\alpha_c = 1/(1 - p)$  pour  $p \leq 0.4$  (et la transition est de même type que celle de la 2-SAT).

---

<sup>4</sup>Il pourrait sembler qu'une solution physique doit correspondre seulement à  $w = 1$  puisque le champ instantané [2] sur un spin est toujours un multiple de  $1/2$ . D'autre part ce type de problème se présente aussi pour le modèle de Viana et Bray avec des interactions  $\pm J$ . Dans ce cas De Dominicis et Mottishaw [80] ont montré que la solution, correspondante à celle avec  $w = 1$  pour la K-SAT, est instable dans l'espace RS et donc que déjà dans cet espace il faudrait considérer des solutions plus générales. Une explication possible, qui a été suggérée en [32, 33] est que la limite  $\beta \rightarrow \infty$  et  $m \rightarrow 1$  ( $m$  est le paramètre de la solution à un pas de brisure) ne commutent pas. Par conséquent la limite de l'espace des solutions à un pas de brisure pour  $m \rightarrow 1$  est plus grande que la limite pour  $\beta \rightarrow +\infty$  de l'espace des solutions RS et contient les solutions avec  $w > 1$ . En tout cas, puisque l'on peut considérer l'approche des répliques comme un problème variationnel s'il existe des solutions avec une énergie libre meilleure il faut les considérer. On peut remarquer que la solution avec  $w = 1$  est un cas particulier de celles avec  $w > 1$ , donc l'énergie libre pour  $w > 1$  sera nécessairement meilleure ou aussi bonne que pour  $w = 1$ .

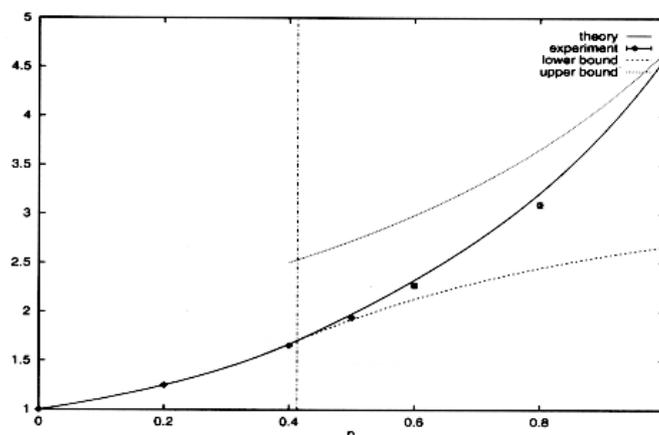


FIG. 3.6 – Valeurs théoriques et numériques de  $\alpha_c$  en fonction de  $p$  pour la  $2+p$ -SAT. La ligne verticale sépare la transition continue de celle discontinue. La ligne pleine correspond au calcul RS, les points sont les résultats des simulations numériques et les deux autres lignes correspondent aux bornes supérieures et inférieures obtenues en [77].

Pour  $p \gtrsim 0.4$  la valeur analytique est plus grande que celle numérique (et la transition est de même type que celle de la 3-SAT). A nouveau on remarque que cette différence est liée au fait qu'il faut chercher une solution pour laquelle la symétrie des répliques soit spontanément brisée (publication I).

En comparant l'image et les prédictions analytiques du calcul RS avec les résultats numériques, on trouve un assez bon accord. Cependant, à plusieurs reprises nous avons remarqué qu'il faudrait chercher une solution dans laquelle la symétrie des répliques soit spontanément brisée, en particulier pour obtenir des meilleurs résultats quantitatifs et des résultats qualitatifs plus fins concernant la structure de l'espace des solutions et le squelette. Par exemple dans la solution RS on voit une différence nette entre la 2-SAT et la 3-SAT en regardant le comportement à la transition de la fraction des variables complètement contraintes, c'est à dire des spins avec un champ effectif d'ordre un. On aurait tendance à identifier ceci au saut continu et discontinu du squelette observé dans les simulations respectivement pour la 2-SAT et la 3-SAT. Pourtant, dans l'analyse RS on ne peut pas faire la différence entre les spins qui ont un champ d'ordre un, qui change de signe d'une solution à l'autre, et les spins qui ont un champ d'ordre un mais toujours pointé dans la même direction. Pour ces raisons il est nécessaire d'effectuer une analyse de la K-SAT qui puisse tenir compte de la brisure de la symétrie des répliques. Ceci a été effectué dans la publication I et sera exposé dans la section suivante.

## 3.4 Approche variationnelle et brisure de la symétrie des répliques

Nous avons vu dans la section précédente que pour différentes raisons il est très intéressant d'effectuer une analyse de la K-SAT dans laquelle la brisure de la symétrie des répliques puisse être prise en compte. Jusqu'à maintenant on ne connaît pas, sauf dans de cas particulièrement simples [31, 32, 33] des solutions exactes des équations des champ moyen pour les systèmes à connectivité finie, qui brisent la symétrie des répliques. La difficulté technique, qui ne permet pas d'effectuer ce type de calcul, est reliée au fait que si l'on veut calculer la solution 1RSB il faut résoudre une équation fonctionnelle à la place d'une équation sur un nombre fini de paramètres. Pour cette raison l'utilisation d'une méthode variationnelle [81] peut être particulièrement avantageuse. Si les "bons" ingrédients physiques sont insérés dans l'Ansatz variationnel, on peut non seulement retrouver dans les cas exactement solubles, comme celui de l'analyse RS de la K-SAT, les résultats corrects mais d'une façon beaucoup moins lourde, mais surtout on peut obtenir des résultats dans des cas, comme celui de l'analyse RSB de la K-SAT, où trouver une solution exacte semble sans espoir. Dans la publication I nous avons appliqué cette procédure au problème de la satisfiabilité. Dans la suite on présentera d'abord l'analyse RS dans laquelle on montre comment les résultats de Monasson et Zecchina peuvent être obtenus d'une façon beaucoup moins lourde grâce à la méthode variationnelle et on présentera aussi quelques résultats nouveaux. Ensuite on exposera les résultats et l'image physique qui découlent d'un Ansatz variationnel correspondant à une brisure à un pas de la symétrie des répliques (nous avons choisi ce schéma de brisure parce que c'était la façon la plus simple d'introduire la brisure de la symétrie des répliques).

### 3.4.1 L'analyse RS

Nous avons d'abord effectué une analyse RS de la phase satisfiable. Dans ce régime il n'y a pas des spins gelés, donc les champs effectifs sont au plus d'ordre  $1/\beta$ . Nous avons alors pris comme distribution variationnelle des champs effectifs une gaussienne avec une variance  $\Delta/\beta^2$ , où  $\Delta$  est le paramètre variationnel. En injectant le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  correspondant à cette distribution des champs en (3.5), nous avons obtenu une densité d'énergie libre variationnelle d'ordre  $1/\beta$  qui dépend du paramètre  $\Delta$ . Puisque dans la phase satisfiable l'énergie est nulle, la densité d'énergie libre (multipliée par  $-\beta$ ) coïncide avec la densité d'entropie. L'optimisation par rapport à  $\Delta$  nous a permis de calculer l'entropie, qui correspond au logarithme du nombre de solutions. En fig. 3.7 nous avons tracé l'entropie pour  $K = 2$  et  $K = 3$  en fonction de  $\alpha$ . Les deux courbes sont indiscernables de celles calculées en [63, 78]. Dans le cadre de l'hypothèse RS la structure de l'espace des solutions est très simple : deux configurations optimales prises au hasard  $\{\sigma_i\}, \{\tau_i\}$  sont typiquement

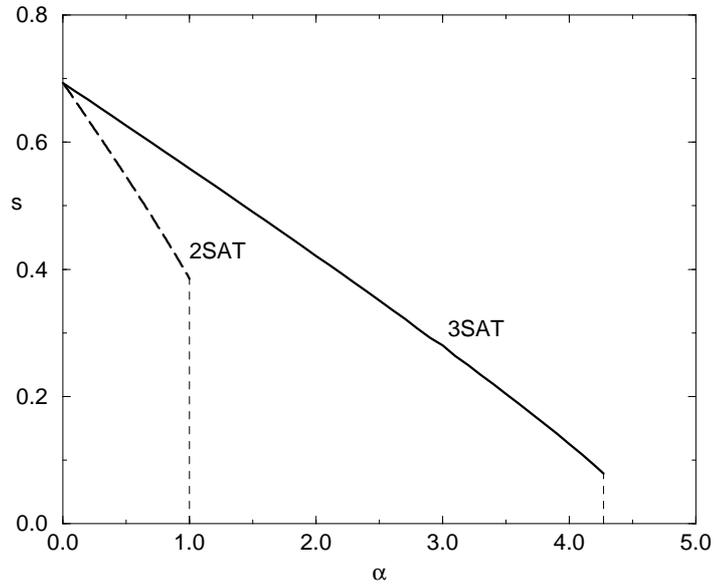


FIG. 3.7 – Entropie calculé par la méthode variationnelle pour la 2-SAT (ligne avec des traits) et la 3-SAT (ligne pleine) en fonction de  $\alpha$ . Ces deux courbes sont indiscernables de celles obtenue en [63, 78, 79]. Les lignes verticales pointillés indiquent les seuils  $\alpha_c(2) = 1$  et  $\alpha_c(3) \simeq 4.27$  [4].

à une distance de Hamming

$$d = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\sigma_i; -\tau_i) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} P(h) (\tanh \beta h)^2 dh \quad (3.9)$$

Nous avons tracé en fig. 3.8 la distance typique entre solutions obtenue à partir du calcul variationnel pour la 3-SAT en fonction de  $\alpha$ . La distance entre solution est égale à 0.5 pour  $\alpha = 0$ , ce qui est naturel parce que, en absence de contrainte, chacune des  $2^N$  configurations est une solution et donc la distance typique est  $1/2$ . Ensuite quand  $\alpha$  augmente la distance diminue, ce qui signale que les solutions se concentrent dans l'espace des configurations. Nous avons vérifié que ces résultats dépendent peu de le choix de la fonction variationnelle. Par exemple l'entropie change seulement d'un pour cent si on prend une exponentielle au lieu d'une gaussienne.

Le paramètre  $\Delta$  diverge à  $\alpha = 4.76$  en signalant que pour  $\alpha > 4.76$  l'hypothèse de n'avoir que des champs d'ordre  $1/\beta$  n'est sûrement plus valable, donc 4.76 est une borne supérieure sur  $\alpha_c$ . Pour obtenir une meilleure valeur de  $\alpha_c$  nous avons considéré la distribution des champs d'ordre un et nous avons pris comme distribution variationnelle des champs (d'ordre

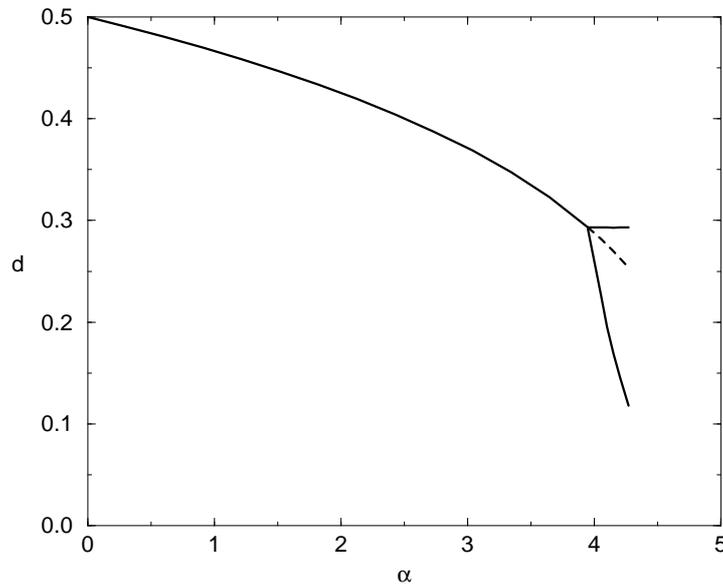


FIG. 3.8 – Distance de Hamming typique entre deux solutions pour la 3-SAT. Dans la phase RS ( $0 \leq \alpha < \alpha_s \simeq 3.96$ ) il y a une seule distance  $d$  entre solutions, qui décroît de façon monotone avec  $\alpha$ . Dans la phase RSB  $\alpha \geq \alpha_s$  il y a deux distances caractéristiques :  $d_1$  qui est la distance entre solutions dans le même amas et  $d_0$  qui est la distance entre solutions dans des amas différents. La courbe plus haute correspond à  $d_0$ , la plus basse à  $d_1$  et la courbe en pointillé est le prolongement de la distance RS.

un) :

$$P(h) = (1 - B)\delta(h) + \frac{B}{\sqrt{\Delta}}\phi\left(\frac{h}{\sqrt{\Delta}}\right) \quad (3.10)$$

où  $\phi(x)$  est une fonction normalisée à un, qui a un poids nul en zéro. En prenant une gaussienne comme fonction  $\phi$  et en injectant le paramètre d'ordre  $c(\vec{\sigma})$  correspondant à cette distribution des champs en (3.5), nous avons obtenu une énergie libre variationnelle d'ordre  $\beta$  qui dépend des paramètres  $\Delta, B$ . En optimisant par rapport à  $\Delta, B$  nous avons trouvé :

- pour la 2+p-SAT,  $\alpha_c = 1/(1 - p)$  si  $0 \leq p < p_0 = 0.437$ . Pour  $p < 0.4$  la valeur calculée de  $\alpha_c$  coïncide donc avec la solution exacte [77]. La variance  $\Delta$  du champ et la fraction  $B$  des champs d'ordre un croissent de façon continue à partir de zéro pour  $\alpha > \alpha_c$ .
- pour la 2+p-SAT pour  $p \geq p_0$ , la transition est continue en  $\Delta$  et discontinue en  $B$ . Par exemple pour  $K = 3$  nous trouvons  $\alpha_c \simeq 4.62$  et  $B \simeq 0.94$ .

Ces résultats changent peu avec le choix de la fonction  $\phi$ . Par contre ce qui se révèle être très important est la division de  $P(h)$  en deux parties : une, qui correspond à  $\phi$  et tient compte des champs d'ordre un et l'autre qui correspond à la fonction delta et tient compte des champs d'ordre  $1/\beta$ . Si l'on avait négligé l'existence des champs d'ordre  $1/\beta$  dans la phase non satisfiable on n'aurait pas trouvé le résultat exact  $\alpha_c = 1$  pour la 2-SAT. Enfin en utilisant certaines hypothèses nous avons montré que la valeur de  $p_0$  est 0.4.

Les résultats de l'analyse RS sont très encourageants ; en effets nous retrouvons la même image qualitative que en [63, 78, 79] et des prédictions quantitatives qui sont différentes de moins d'un pour cent avec une procédure beaucoup moins lourde.

### 3.4.2 L'analyse RSB

Les résultats RS comparés aux simulations numériques suggèrent que dans la phase non satisfiable la symétrie de répliques est spontanément brisée.

Avant d'analyser le régime non satisfiable nous avons d'abord cherché une solution qui brise "à un pas" la symétrie des répliques dans la phase satisfiable. Pour simplicité, nous avons pris comme  $\mathcal{P}[\rho]$  variationnel le même que celui des modèles complètement connectés, eq. (2.20), avec des variances  $q_0 = \Delta_0/\beta^2$  et  $q_1 = \Delta_1/\beta^2$ , qui imposent que la taille typique des champs effectifs est d'ordre  $1/\beta$  dans la phase satisfiable. En injectant cet Ansatz variationnel en (3.5), nous avons obtenu une densité d'énergie libre variationnelle d'ordre  $1/\beta$  qui dépend des  $\Delta_0, \Delta_1$  et  $m$ . En optimisant par rapport à ces trois paramètres nous avons trouvé que jusqu'à  $\alpha_s \simeq 3.96$  il y a seulement la solution RS. A  $\alpha_s \simeq 3.96$  la transition 1RSB survient.  $\Delta_0$  et  $\Delta_1$  sont continus à la transition, le premier étant égal à  $\Delta_{rs}$  et le deuxième à zéro, tandis que  $m$  a un saut discontinu (vers le bas) à partir de 1. Ce type de transition est similaire à celle du modèle à p-spins sphériques en champ magnétique h externe [82], lorsqu'on varie le champ. Les résultats principaux dus à l'existence d'une phase satisfiable avec brisure de la symétrie des répliques concernent la structure de l'espace des solutions (l'entropie change très peu par rapport au cas RS). L'existence d'une solution 1RSB du type (2.20) implique qu'il y a plusieurs états purs et les recouvrements entre configurations sont différents selon que les configurations considérées sont dans le même état ou dans états différents [2]. En terme de solutions optimales du problème de la satisfiabilité, ceci est équivalent à dire que les configurations optimales sont regroupées en amas. La distance typique entre deux solutions appartenant au même amas est égale à :

$$d_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int Dh \frac{\int D\tilde{h} \cosh^m(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h}) \tanh^2(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h})}{\int D\tilde{h} \cosh^m(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h})} \quad (3.11)$$

où nous avons utilisé la notation  $Dh$  pour indiquer l'intégrale sur une gaussienne normalisée avec variance égale à un. Tandis que la distance typique entre deux solutions appartenantes à deux amas différents est égale à :

$$d_0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int Dh \left[ \frac{\int D\tilde{h} \cosh^m(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h}) \tanh(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h})}{\int D\tilde{h} \cosh^m(\sqrt{\Delta_0}h + \sqrt{\Delta_1}\tilde{h})} \right]^2 \quad (3.12)$$

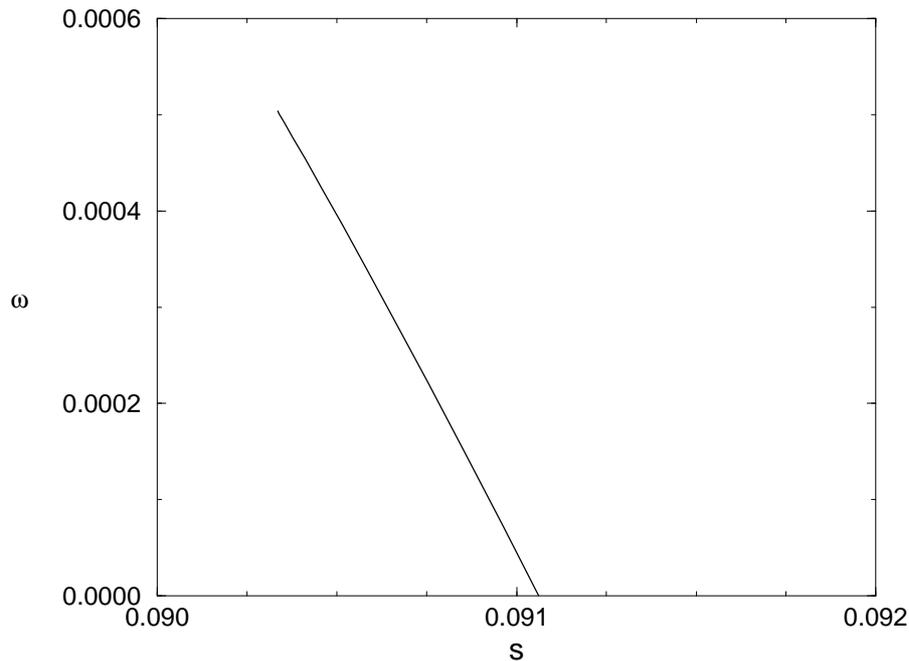


FIG. 3.9 – Multiplicité  $\omega(s)$  des amas avec entropie  $s$  à  $\alpha = 4.2$ . Les résultats pour des valeurs des  $\alpha_s < \alpha < \alpha_c$  sont qualitativement similaires .

Nous avons tracé  $d_0$  et  $d_1$  en fonction de  $\alpha$  en fig. 3.8. La première distance reste au peu près constante au dessus de  $\alpha_s$ , tandis que la deuxième décroît. Par conséquent la décroissance de l'entropie est principalement due à une diminution de la taille des amas.

Les amas peuvent avoir une densité d'entropie  $s$  différente, c'est à dire qu'ils peuvent contenir un nombre (exponentiellement) différent de solutions. Dans ce cas il est intéressant de calculer le nombre d'amas avec une certaine densité d'entropie, ou plutôt le logarithme de ce nombre divisé par  $N$ , qu'on appellera multiplicité  $\omega(s)$ . Une procédure pour calculer cette quantité a été développée dans le cadre des verres de spins discontinus, comme le p-spins sphérique [82], qui sont censés donner une description phénoménologique et de champ moyen des verres structuraux [83, 84, 85]. Dans ce contexte la multiplicité est appelé complexité et est une fonction de la densité d'énergie libre. La multiplicité des amas (complexité des états) peut être obtenue à partir des solutions 1RSB non optimisé par rapport à  $m$ . Plus précisément en [86] il a été montré que en optimisant l'énergie libre seulement par rapport à  $\Delta_0$  et  $\Delta_1$  on trouve une fonction de  $m$ , qui correspond à la transformé de Legendre (divisée par  $m$ ) de la multiplicité des amas. Nous avons calculé la multiplicité dans le cadre de la solution 1RSB variationnelle pour la 3-SAT. Cette quantité est tracée en fig. 3.9 pour différents valeurs de  $s$ . Le résultat du calcul est que les amas qui ont la densité d'entropie globale  $\omega(s) + s$  la plus grande et qui donc dominant le comportement typique sont toujours ceux avec la plus grande valeur de  $s$ . Même si la valeur variationnelle de  $\omega$  est très petite l'existence d'une multiplicité d'amas dans la phase SAT suggère qu'il pourrait y avoir une structure non triviale de l'espace des solutions déjà

dans la phase satisfiable. Il est important de remarquer que les solutions obtenues à  $m$  fixé, en optimisant seulement par rapport à  $\Delta_0$  et  $\Delta_1$ , correspondent à sommer seulement sur les configurations appartenant aux amas caractérisés par une densité d'entropie  $s(m)$ . Par conséquent si l'on veut connaître les distances  $d_1$  et  $d_0$  pour ces amas (rares), il faut juste remplacer en (3.11,3.12) les valeurs correspondantes de  $m(s)$ ,  $\Delta_1(m(s))$ ,  $\Delta_1(m(s))$  à la place de ceux qui correspondent au  $m$  optimal.

Pour analyser la phase non satisfiable nous avons considéré l'Ansatz variationnel le plus simple possible, qui contient les éléments physiques qui semblent être pertinents :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}[\rho(h)] = & (1 - B_1 - B_0) \delta \left[ \rho(h) - \delta(h) \right] + B_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{h} \phi_0(\tilde{h}) \delta \left[ \rho(h) - \psi_0(h, \tilde{h}) \right] \\ & + B_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{h} \phi_1(\tilde{h}) \delta \left[ \rho(h) - \psi_1(h, \tilde{h}) \right] . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dans cette expression  $\delta[\cdot]$  indique un delta fonctionnel. Le premier terme du membre de droite dans (3.13) correspond aux champs ( $O(1/\beta)$ ) correspondants aux variables qui ne sont pas complètement contraintes. Les autres termes sont reliés aux champs correspondants aux variables complètement contraintes. Le deuxième terme correspond aux champs effectifs appartenant au squelette, qui ont donc le même signe dans tous les amas; pour cette raison la fonction de  $h$ ,  $\psi_0(h, \tilde{h})$ , qui est reliée aux fluctuations d'un état à l'autre du champ effectif d'un site a toujours le support sur la partie de l'axe réel qui a le même signe que  $\tilde{h}$ .  $B_0$  est donc la fraction des variables qui appartiennent au squelette. Le dernier terme correspond aux champs effectifs des variables complètement contraintes qui n'appartiennent pas au squelette et qui donc sont fixées dans des valeurs booléennes différentes d'une configuration à l'autre. Pour obtenir des expressions exploitables mathématiquement nous avons choisi de prendre comme fonctions variationnelles :

$$\begin{aligned} \phi_0(\tilde{h}) &= G_{\Delta_0}(h) \\ \psi_0(h, \tilde{h}) &= \delta(h - \tilde{h}) \\ \phi_1(\tilde{h}) &= \delta(\tilde{h}) \\ \psi_1(h, \tilde{h}) &= G_{\Delta_1}(h - \tilde{h}) \quad , \end{aligned} \quad (3.14)$$

où  $G_{\Delta}(x)$  indique une fonction gaussienne normalisée avec variance égale à  $\Delta$ . En injectant cet Ansatz dans l'énergie libre (3.5) et en optimisant par rapport aux différents paramètres nous avons trouvé une valeur du seuil  $\alpha_c \simeq 4.48$  qui est nettement meilleure par rapport au calcul RS, même si elle ne coïncide encore pas avec le résultat  $\alpha_c \simeq 4.27$  des simulations numériques [65, 66]. De plus, nous avons obtenu que la fraction de variables contraintes (spins gelés) est  $B_0 + B_1 \simeq 0.92$ . Ce résultat change très peu par rapport à celui obtenu dans le calcul RS, donc nous nous attendons qu'il soit quantitativement correct. Enfin la valeur de la fraction de spins appartenant au squelette est  $B_0 \simeq 0.13$ . Cette valeur est assez faible par rapport à celle des simulations numériques  $B_0 \simeq 0.4$  (Cependant les simulations numériques sont sur des petites tailles  $N = 26$  [52], donc on peut s'attendre des importants effets de taille finie).

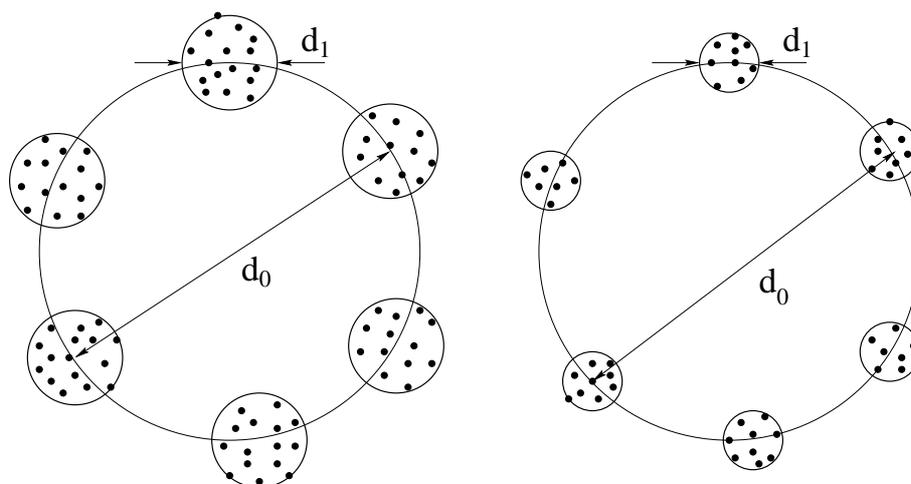


FIG. 3.10 – Représentation schématique de la structure de l'espace des solutions de la 3-SAT pour deux valeurs de  $\alpha > \alpha_s$ . Le dessin à droite correspond à une valeur de  $\alpha$  plus grande : la distance  $d_0$  entre amas est restée à peu près la même, tandis que la taille  $d_1$  d'un amas diminué.

La différence entre les valeurs numériques de  $\alpha_c$  et  $B_0$  et celles prédites par le calcul variationnel est probablement due au choix fait en (3.14)  $\psi_0(h, \tilde{h}) = \delta(h - \tilde{h})$ . Ceci implique que, dans l'Ansatz variationnel, on considère une brisure de la symétrie des répliques seulement pour les spins n'appartenant pas au squelette. Ces derniers sont donc thermodynamiquement favorisés. D'autres choix auraient cependant considérablement compliqué le calcul.

### 3.4.3 Image de la K-SAT donnée par le calcul variationnel

Le calcul variationnel exposé dans les sections précédentes fournit l'image suivante du problème de la 3-SAT. Pour des faibles valeurs de  $\alpha$  chaque instance prise au hasard est satisfiable avec probabilité un et les variables  $x_i$  sont très peu contraintes : pour chaque instance il y a toujours une solution dans laquelle  $x_i$  est vraie et une dans laquelle  $x_i$  est fausse. Lorsque l'on augmente le nombre de contraintes par variable l'espace des solutions diminue en taille : l'entropie et la distance typique entre solutions décroissent. Quand  $\alpha$  rejoint la valeur  $\alpha_s \simeq 3.96$ , il y a une première transition de phase : le problème reste satisfiable mais l'espace des solutions se décompose en un nombre exponentiel d'amas disjoints. Augmentant encore  $\alpha$  la taille typique des amas diminue et la distance entre amas reste à peu près constante. Une représentation schématique de ce comportement est dessinée en fig. 3.10. Quand  $\alpha$  rejoint la valeur  $\alpha_c \simeq 4.48$  il y a une deuxième transition de phase : il n'y a plus des solutions satisfaisantes et dans les configurations optimales une grande fraction  $\sim 0.9$  de variables deviennent complètement contraintes (les spins associés se gèlent dans certaines directions). Cette transition de phase a un comportement mixte :

du premier ordre sur la fraction des variables gelées et du deuxième ordre sur la variance des champs effectifs d'ordre un, qui croît continûment à partir de zéro. Cette comportement mixte du premier et du deuxième ordre pourrait être la cause de la valeur de  $\nu \simeq 1.5$ , qui est assez inattendue pour un modèle de champ moyen. De plus les variables complètement contraintes se divisent en variables appartenant au squelette, qui sont fixé à la même valeur booléenne dans toutes les configurations optimales, et variables qui fluctuent selon les configurations optimales.

L'image pour la 2+p-SAT est la même pour  $p > p_0 \simeq 0.4$ , par contre pour  $p < p_0$  la description est plus simple. Il y a une seule transition  $\alpha_s = \alpha_c = 1/(1-p)$  et la transition est du deuxième ordre sur la fraction des variables complètement contraintes et sur la variance du champs effectifs d'ordre un.

Enfin, concernant la différence du comportement (polynômial versus exponentiel) du temps de résolution au seuil entre la 2-SAT et la 3-SAT obtenu en utilisant l'algorithme de Davis et Putnam, il a été suggéré dans [52] que cela est probablement dû au fait que, quand le système devient non satisfiable, pour la 3-SAT il y a une fraction finie de variables qui ont la même valeur dans toutes les solutions, tandis que pour la 2-SAT la fraction de variables appartenant au squelette est nulle. Une compréhension plus profonde de la variation du temps de résolution en fonction de  $\alpha$  a été obtenue dans un travail récent [87] où l'algorithme de Davis et Putnam a été analysé en terme d'une évolution dans le diagramme de phase du modèle  $2 + p$ -SAT.

### 3.5 Discussion et conclusion

Grâce à la méthode variationnelle développée dans la publication I nous sommes allés au-delà de l'analyse RS du problème de la satisfiabilité effectuée en [63, 78, 79]. En particulier nous avons prédit que déjà dans la phase satisfiable il peut y avoir une transition de phase reliée à une decomposition de l'espace des solutions en une nombre exponentiel (en  $N$ ) d'amas disjoints ayant une distribution de tailles multifractale que l'on a estimée quantitativement. Des simulations numériques récentes semblent confirmer ce scénario [88, 89]. Il est intéressant de remarquer que cette transition pourrait avoir des répercussion sur la dynamique des algorithmes. En effet la valeur  $\alpha_s \simeq 3.96$  est en un accord très surprenant avec une ralentissement de la dynamique de MonteCarlo à température zéro [90] et avec un changement du temps de résolution du algorithme "WALK SAT" [88] (qui, même en restant polynômial, change comportement) à  $\alpha \sim 4$ . De plus, en introduisant la brisure de la symétrie des répliques dans l'analyse de la K-SAT, nous avons pu améliorer sensiblement les résultats analytiques concernant la valeur du seuil, en obtenant  $\alpha_c \simeq 4.48$ , et on a pu obtenir une prédiction pour la valeur de la fraction des variables appartenant au squelette  $B_0 \simeq 0.13$ . Il serait très intéressant de vérifier dans les détails, à travers une analyse numérique, l'image qualitative donnée par l'approche variationnelle, surtout la prédiction concernant la structure non triviale de l'espace des solutions. D'un point de vue analytique il serait intéressant de trouver une façon d'améliorer ce calcul variationnel, qui puisse permettre de trouver de résultats quantitatifs encore plus proches de ceux des simulations

numériques.

Enfin nous voudrions terminer ce chapitre sur les transitions de phase en informatiques avec une remarque sur un domaine nouveau qui pourrait s'ouvrir dans le futur et qui concernerait toujours la mécanique statistique d'une part et les problèmes d'optimisation de l'autre. Jusqu'à maintenant l'analyse des caractéristiques des solutions optimales des problèmes d'optimisation a été reliée à la mécanique statistique classique des systèmes désordonnés. D'autre part l'analyse des algorithmes pourrait être reliée à des problème de mécanique statistique quantique. Deux exemples dans cette direction sont d'une part le recuit simulé quantique [91], dans lequel le franchissement de barrières énergétiques par effet tunnel pourrait aider à trouver les solutions optimales d'un problème d'optimisation, et d'autre part la réécriture de la dynamique d'un algorithme en terme d'un opérateur d'évolution. Cette opérateur pour certain algorithmes (i.e. algorithmes stochastiques de recherche locale) ressemble à un hamiltonien d'un système désordonné quantique. L'analyse des temps caractéristiques et du comportement de l'algorithme pourrait alors être grâce à l'analyse d'un système désordonné quantique.

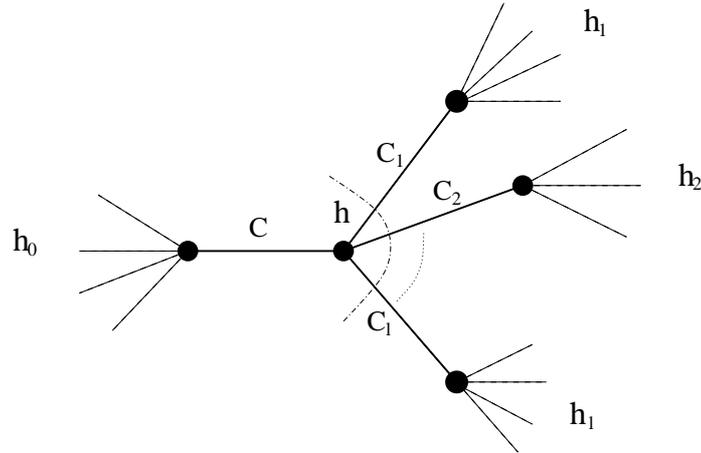


FIG. 3.11 – Représentation graphique de la partie du réseau aléatoire associé à la 2-SAT concernant les variables  $x_0, x, x_1, \dots, x_l$ .

### 3.6 Annexe I : dérivation de l'équation RS avec la cavité

Pour comprendre la signification physique de la fonction  $P(h)$  et surtout pour montrer quelles sont les hypothèses physiques associées à l'invariance par permutations des répliques je dériverai l'équation (3.6) avec la méthode de cavité [2, 78] pour  $K = 2$ . D'abord, on remarque que la probabilité qu'une variable  $x_i$  soit seulement dans  $l$  clauses est égale à  $p(l) = e^{-2\alpha}(2\alpha)^l/l!$ . De plus la probabilité qu'une variable  $x_i$  soit seulement dans  $l + 1$  clause, en sachant que elle est déjà présente dans au moins une clause, est toujours égale à  $e^{-2\alpha}(2\alpha)^l/l!$ . On va écrire une équation sur la loi de probabilité  $\tilde{P}(h)$  du champ effectif d'une variable  $x$  (spin  $\sigma$ ) qui est au moins dans une clause  $C$ , où  $h$  est le champ effectif dû à toutes les autres clauses  $C_1, \dots, C_l$  dans lesquelles la variable apparaît. Pour aider le lecteur nous avons tracé en fig. 3.11 une représentation de la partie du réseau associé à la 2-SAT concernant les variables  $x_0, x, x_1, \dots, x_l$ . J'introduis un peu de notation : j'appelle  $x_0$  la variable reliée à  $x$  à travers  $C$  et  $h_0$  le champ effectif de  $\sigma_0$  dû à toutes les clauses, sauf  $C$ , auxquelles la variable  $x_0$  appartient. La clause  $C_i$  relie  $x$  à  $x_i$  et j'appelle  $h_i$  le champ effectif de la variable  $x_i$  dû à toutes les clauses, sauf  $C_i$ , auxquelles la variable  $x_i$  appartient. On considérera le réseau formé en joignant les variables qui sont dans une même clause. Le réseau ainsi obtenu est un graphe aléatoire avec  $2\alpha$  liens par site en moyenne. Puisque  $x$  et  $x_0$  sont reliés, un chemin qui ne passe pas par  $x$  et qui relie  $x_0$  à  $x_1, \dots, x_l$  a une longueur d'ordre  $\ln N$  au minimum. Donc  $h_0, h_1, \dots, h_l$  devrait être des variables indépendantes. Dans la suite j'écris une relation qui permet de calculer  $h$  à partir de  $h_1, \dots, h_l$ . D'abord, il est intéressant de remarquer que la fonction de partition obtenue en effectuant la somme

sur tous les spins sauf  $\sigma_0, \sigma, \sigma_1, \dots, \sigma_l$  est égale à :

$$\begin{aligned} Z_r(\sigma_0, \sigma, \sigma_1, \dots, \sigma_l) &= C \exp(\beta(h_0\sigma_0 - e_0(\sigma_0, \sigma) + h_1\sigma_1 \cdots + h_l\sigma_l - e_r(\sigma, \sigma_1, \dots, \sigma_l))) \\ e_r(\sigma, \sigma_1, \dots, \sigma_l) &= e_1(\sigma, \sigma_1) + \cdots + e_l(\sigma, \sigma_l) \\ e_k(\sigma, \sigma_k) &= \delta \left( \Delta_k^{(1)}\sigma_k + \Delta_k^{(2)}\sigma; -2 \right) \end{aligned}$$

où  $\Delta_k^{(1)}$  et  $\Delta_k^{(2)}$  sont égaux à  $-1$  ( $+1$ ) si la clause  $C_k$  contient respectivement  $\bar{x}_k$  ( $x_k$ ) et  $\bar{x}$  ( $x$ ). Le fait qu'il n'y a pas de boucles de longueur finie est essentiel pour que le hamiltonien effectif résultant de la somme sur tous les spins sauf  $\sigma_0, \sigma, \sigma_1, \dots, \sigma_l$  n'ait pas des termes du type  $\sigma_i\sigma_j$ ,  $\sigma_0\sigma_i$  (ou plus générales). En effet, deux voisins de  $\sigma$  sont reliés par le chemin de longueur deux qui passe par  $\sigma$ , et donc il ne peuvent pas être reliés par un autre chemin de longueur finie. Par conséquent la corrélation induite en faisant la somme sur tous les spins, sauf  $\sigma$  et ses voisins, devrait être nulle (le chemin qui relie les voisins et qui ne passe pas par  $\sigma$  a une longueur infinie). De plus, puisque :

$$e^{2\beta h} = \frac{\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} \exp(\beta(\sigma_1 h_1 + \cdots + \sigma_l h_l) - e_r(+1, \sigma_1, \dots, \sigma_l))}{\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} \exp(\beta(\sigma_1 h_1 + \cdots + \sigma_l h_l) - e_r(-1, \sigma_1, \dots, \sigma_l))}$$

dans la limite de température nulle on trouve que le champ effectif d'ordre un est égale à :

$$2h = \min_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} h_1\sigma_1 + \cdots + h_l\sigma_l - e_r(1, \sigma_1, \dots, \sigma_l) \quad (3.15)$$

$$- \min_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} h_1\sigma_1 + \cdots + h_l\sigma_l - e_r(-1, \sigma_1, \dots, \sigma_l) \quad (3.16)$$

l'interprétation physique de  $h$  est donc relié à la première excitation qu'on peut obtenir en tournant le spin  $\sigma$ .

Avec probabilité  $e^{-2\alpha}$  le spin  $\sigma_i$  n'appartient à aucune clause autre que  $C$ , donc dans ce cas le champ effectif est zéro. Ceci donne une contribution à  $\tilde{P}(h)$  :

$$\tilde{P}_0(h) = e^{-2\alpha}\delta(h)$$

Avec probabilité  $e^{-2\alpha}2\alpha$  le spin  $\sigma_i$  appartient à une clause  $C_1$  autre que  $C$ . On a donc trois cas différents suivant la valeur de  $h_1$  :

- $h_1$  a un signe qui favorise la valeur booléenne de  $x_1$  qui apparaît dans la clause  $C_1$ , par exemple  $h_1 > 0$  si  $C_1 = x_1 O U x$ . Les niveaux d'énergie correspondants à ce cas sont tracés en fig. 3.12. Le niveau fondamental est deux fois dégénère et correspond à prendre la valeur de  $x_1$  qui satisfait la clause et l'interaction avec le champ effectif. Son énergie est donc égale à  $-|h_1|$  indépendamment de la valeur de  $x$ . En utilisant la formule (3.15) on obtient donc un champ effectif  $h = 0$ .
- $h_1$  a une signe qui ne favorise pas la valeur booléenne de  $x_1$  qui apparaît dans la clause  $C_1$ , dans ce cas on peut avoir un schéma des niveaux d'énergie différent, voire fig. 3.13 :

1. Si  $|h_1| < 1/2$  l'état fondamental, d'énergie  $-|h_1|$  correspond à choisir  $x_1$  qui favorise l'interaction avec  $h_1$  et  $x$  qui satisfait la clause. Le premier niveau excité,

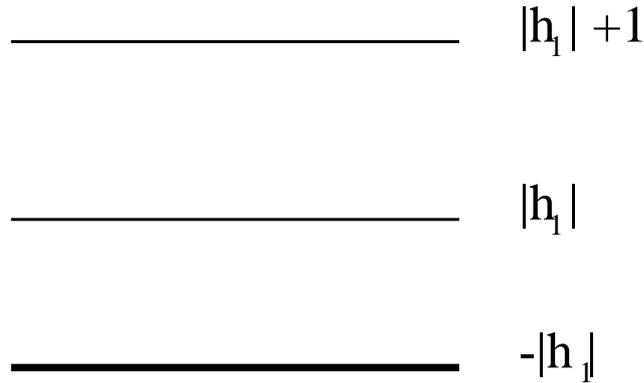


FIG. 3.12 – Représentation graphique de schéma des niveaux d'énergie quand la variable  $x$  appartient à une autre clause  $C_1$  autre que  $C$  et le champ  $h_1$  favorise la valeur booléenne de  $x_1$  qui apparaît dans la clause  $C_1$  (l'épaisseur d'un niveau correspond à sa dégénérescence). Il y a deux états fondamentaux correspondant à  $\sigma = \pm 1$  avec énergie  $-|h_1|$ , par conséquent  $h = 0$ .

d'énergie  $|h_1|$  est deux fois dégénéré et correspond à prendre  $x_1$  qui ne vérifie pas l'interaction avec  $h_1$ , mais qui donc satisfait la clause et  $x$  comment on veut. Enfin, le niveau plus excité correspond à prendre  $x_1$  qui favorise l'interaction avec  $h_1$  et  $x$  qui ne satisfait pas la clause. L'énergie correspondante est égale à  $-|h_1| + 1$ . En utilisant la formule (3.15) on trouve donc que la valeur absolue du champ effectif est égale à  $|h_1|$ , son signe dépendant du fait que la variable  $x$  apparaît comme  $x$  ou  $\bar{x}$  dans la clause  $C_1$ .

2. Si  $|h_1| > 1/2$  l'état fondamental est le même que dans le cas précédente ( $x_1$  favorise l'interaction avec  $h_1$  et  $x$  satisfait la clause). Par contre puisque  $|h_1| > 1/2$  l'ordre des états excités est inversé. Le premier niveau excité correspond à prendre  $x_1$  qui satisfait l'interaction avec  $h_1$ , et  $x$  qui viole la clause. Par conséquent en utilisant la formule (3.15) on trouve que la valeur absolue du champ effectif est égale à  $1/2$ , son signe dépendant du fait que la variable  $x$  apparaît comme  $x$  ou  $\bar{x}$  dans la clause  $C_1$ .

En tenant compte de ces deux cas on obtient que la contribution à  $\tilde{P}(h)$  est égale à :

$$\tilde{P}_1(h) = e^{-2\alpha} 2\alpha \int_0^{+\infty} dh_1 \tilde{P}(h_1) \left( \frac{1}{2} \delta(h - \min(1/2, h_1)) + \frac{1}{2} \delta(h + \min(1/2, h_1)) + \delta(h) \right)$$

où j'ai utilisé que la fonction  $\tilde{P}(h)$  est une fonction paire et le facteur  $1/2$  correspond à la probabilité que la variable  $x$  apparaît comme  $x$  ou  $\bar{x}$  dans la clause  $C_1$ . On peut généraliser la procédure précédente au cas où  $x$  est dans  $l$  clauses autre que  $C$ . La probabilité de cet événement est  $e^{-2\alpha} (2\alpha)^l / l!$ . Les champs effectifs qui favorisent les valeurs booléennes qui apparaissent dans la clause ne donnent pas de contributions. Les autres  $h_i$  donnent une contribution qui est égale en module à  $\min(1/2, |h_i|)$ ; le signe de la contribution dépendant du fait si la variable  $x$  apparaît comme  $x$  ou  $\bar{x}$  dans la clause  $C_i$ . En tenant compte de

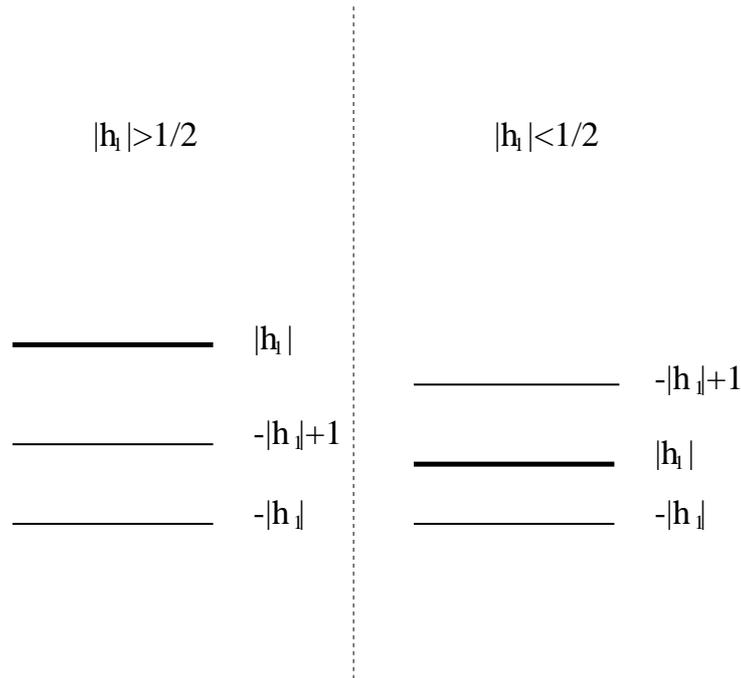


FIG. 3.13 – Représentation graphique de schéma des niveaux d'énergie quand la variable  $x$  appartient à une autre clause  $C_1$  autre que  $C$  et le champ  $h_1$  ne favorise pas la valeur booléenne de  $x_1$  qui apparaît dans la clause  $C_1$  (l'épaisseur d'un niveau correspond à sa dégénérescence). L'état fondamental correspond à donner à  $x_1$  le contraire de la valeur que satisferait  $C_1$  et à  $x$  la valeur qui satisfait  $C_1$ . Si  $|h_1| > 1/2$  (gauche) le premier état excité obtenu en changeant la valeur de  $x$  correspond à laisser invariant  $x_1$  et à changer  $x$ , tandis que si  $|h_1| < 1/2$  (droite) le premier état excité obtenu en changeant la valeur de  $x$  correspond à changer les valeurs de  $x$  et  $x_1$ .

différentes contributions je trouve :

$$\begin{aligned} \tilde{P}_l(h) = & e^{-2\alpha} \frac{(2\alpha)^l}{l!} \int_0^{+\infty} \prod_{j=2}^{l+1} dh_j \tilde{P}(h_j) \times \\ & \times \sum_{m=0}^l \sum_{a_1 < \dots < a_m} \frac{1}{2^m} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l = \pm 1} \delta(h - \sum_{j=1}^m \sigma_j \min(1/2, h_{a_j})) \end{aligned} \quad (3.17)$$

En resommant toutes les contributions  $\tilde{P}_l(h)$  on obtient l'équation (3.6) sur  $\tilde{P}(h)$  pour  $K=2$ . Si l'on répète la même calcul pour un site donné (sans savoir s'il a déjà ou non un voisin) on trouve :

$$P(h) = \sum_{l=0}^{\infty} \tilde{P}_l(h)$$

Cette identité implique que  $\tilde{P}(h) = P(h)$  et donc que  $P(h)$  satisfait l'équation (3.6) pour  $K=2$ .



# Chapitre 4

## Désordre géométrique et localisation

### 4.1 Introduction

Dans son travail fondamental [92] de 1958, Anderson étudia un modèle de liaisons fortes avec des énergies de site aléatoires. Il montra que, s'il y a suffisamment de désordre, la diffusion peut cesser et une fraction finie d'états propres sont *localisés* dans des régions finies de l'espace. De façon générale un problème de propagation d'une onde classique ou d'une particule quantique se réduit à l'étude des vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur, qui dans le cas d'une particule quantique est le hamiltonien. Les systèmes non désordonnés sont en général invariants par translation, par conséquent on peut trouver un ensemble d'états propres ayant le même module d'ordre  $1/\sqrt{V}$  dans tous les points de l'espace, où  $V$  est le volume total. A cause du désordre, on perd l'invariance par translation et il peut y avoir des états *localisés*, qui ont un module de la fonction d'onde d'ordre un et non négligeable seulement dans une région finie de l'espace. Ces états ne peuvent pas donner lieu à un transport macroscopique [93, 94, 95] et donc ne contribuent pas à des quantités comme le coefficient de diffusion et la conductivité DC. A une et deux dimensions, un désordre infinitésimal, mais extensif, est suffisant parce que presque tous les états soient localisés. En dimension trois par contre il faut avoir un désordre assez fort pour que tous les états soient localisés [93, 94, 95]. Le phénomène de localisation a été étudié dans différents contextes avec des techniques très variées. La littérature sur ce sujet est très vaste. D'un point de vue théorique on peut citer : les travaux sur les solutions exactes à une dimension [45], la théorie du comportement d'échelle [93, 95], l'analyse avec la théorie des champs répliquée ou supersymétrique [94], l'étude du modèle sur l'arbre de Cayley [93, 19, 20], les développements récents sur les systèmes mésoscopiques [96] et les liens avec les matrices aléatoires [97]. Dans ce chapitre nous étudierons comment le désordre *géométrique* induit la localisation. En effet, la plupart des études sur la localisation ont été effectuées soit sur des réseaux ordonnés avec des énergies de site aléatoires, soit sur des modèles continus avec un désordre ponctuel. Les effets dus à un désordre topologique ou géométrique ont été beaucoup moins étudiés. Néanmoins, il y a des problèmes physiques dans lesquels des structures topologiquement désordonnées jouent un rôle fondamental,

comme par exemple la propagation d'ondes dans les matériaux amorphes [98, 99], les modes instantanés de vibration des liquides [100] et des verres [101], et certaines modélisations de la dynamique vitreuse [102].

Pour étudier le lien entre le désordre géométrique et la localisation nous étudierons un phénomène de propagation sur un graphe aléatoire, ceci étant l'exemple le plus simple dans lequel un véritable désordre topologique intervient. Le problème mathématique consiste à analyser les propriétés spectrales du laplacien, l'opérateur de la diffusion, sur un graphe aléatoire. Le but est d'étudier la transition localisation-delocalisation, connaître les propriétés du spectre et analyser le phénomène physique qui induit la localisation.

Ce travail a donné lieu à la publication II.

### 4.1.1 Définition du modèle

On considère une matrice symétrique  $W_{i,j}$  de taille  $N$  par  $N$  telle que :

$$W_{i,i} = - \sum_{j(\neq i)} W_{i,j} \quad (4.1)$$

et les éléments non diagonaux sont des variables aléatoires indépendantes tirées au hasard avec une loi :

$$P(W_{i,j}) = \left(1 - \frac{\alpha}{N}\right) \delta(W_{i,j}) + \frac{\alpha}{N} p(W_{i,j}) \quad (4.2)$$

Comme on a montré dans le chapitre (2), la structure définie en joignant tous les couples de points avec  $W_{i,j} \neq 0$  est un graphe aléatoire avec une connectivité moyenne égale à  $\alpha$ . La propriété (4.1) a été choisie de façon à ce que la matrice  $W_{i,j}$  puisse être vue comme une représentation très schématique de :

- une matrice de petites vibrations. En effet, pour un ensemble de particules qui oscillent autour des positions  $\{\mathbf{r}_i^0\}$ , le hamiltonien se réécrit comme :

$$\begin{aligned} H &\simeq \sum_{i,j,\alpha,\beta} W_{i,j}^{\alpha,\beta} \delta r_i^\alpha \delta r_j^\beta, & \delta \mathbf{r}_i &= \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0 & (4.3) \\ W_{i,j}^{\alpha,\beta} &= - \frac{\partial^2 V}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} (\mathbf{r}_i^0 - \mathbf{r}_j^0) & \text{si } i &\neq j \\ W_{i,i}^{\alpha,\beta} &= - \sum_{j(\neq i)} W_{i,j}^{\alpha,\beta} \end{aligned}$$

où  $V(\mathbf{x})$  est le potentiel d'interaction entre deux particules à distance  $\mathbf{x}$ . Dans le cas des petites vibrations d'un matériaux amorphe, les positions  $\{\mathbf{r}_i^0\}$  sont distribués de manière plus ou moins irrégulière dans l'espace. Par conséquent  $W_{i,j}^{\alpha,\beta}$  sont des variables aléatoires. Le modèle défini en (4.2,4.1) consiste à négliger les corrélations

entre les  $W_{i,j}^{\alpha,\beta}$  et à considérer un problème scalaire à la place d'un problème vectoriel. La deuxième hypothèse a été faite seulement par simplicité, ce qui suit se généralisant facilement au cas vectoriel, tandis que la première peut être vue, dans l'esprit du développement (2.21), comme une première approximation dans le cadre d'une expansion qui tient compte progressivement des corrélations entre  $W_{i,j}$ . On reviendra dans la suite sur ce point. Notons que la condition (4.1) est simplement due à l'invariance par translation, qui impose qu'une même translation de toutes les particules doit laisser invariante l'énergie. De plus, les valeurs propres et les vecteurs propres de  $\mathbf{W}$  correspondent respectivement aux fréquences caractéristiques et aux modes de vibration du matériau amorphe, et le phénomène de localisation est relié à une décroissance exponentielle du coefficient de transmission d'une onde sur une distance  $L$ .

- un opérateur de diffusion pour un ensemble de particules qui sautent d'un site à l'autre d'un réseau. Si le taux de particules qui sautent du point  $i$  au point  $j$  par unité de temps est égale à  $W_{i,j}$ , la densité de particules  $\rho_i(t)$  satisfait l'équation suivante :

$$\frac{d\rho_i}{dt}(t) = \sum_{j(\neq i)} (W_{j,i}\rho_j - W_{i,j}\rho_i) = \mathbf{W} \cdot \rho \quad (4.4)$$

Dans ce cas la condition (4.1) est simplement due au fait que le taux de particules qui sautent de  $i$  à  $j$  est la même que celui de  $j$  à  $i$  et par conséquent  $(1, \dots, 1)$  doit être un vecteur propre avec valeur propre zéro. Les valeurs propres de  $\mathbf{W}$  correspondent à l'inverse des temps caractéristiques de relaxation et le phénomène de localisation est relié au fait qu'une particule peut être piégée dans une région finie de l'espace.

Quelque soit l'interprétation qu'on donne à  $\mathbf{W}$ , il est intéressant de connaître les propriétés du spectre et des vecteurs propres en tant que variables aléatoires. On peut obtenir des renseignements sur les valeurs propres grâce à la densité d'états :

$$q(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{\gamma=1}^N \delta(\lambda - \lambda_\gamma) \quad (4.5)$$

où  $\{\lambda_\gamma\}$  sont les valeurs propres de  $\mathbf{W}$ .  $q(\lambda)$  est une fonction aléatoire, par conséquent d'un point de vue numérique et analytique on s'intéresse à ces moments, comme par exemple la densité d'états moyenne :  $p(\lambda) = \langle q(\lambda) \rangle$ , où  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne sur le désordre. De plus, pour caractériser les vecteurs propres on étudiera le taux de participation inverse pour un vecteur propre  $\gamma$  :

$$w_\gamma^4 = \sum_i |\psi_i^\gamma|^4 \quad (4.6)$$

où  $\psi_i^\gamma$  est la fonction d'onde normalisée du vecteur propre  $\gamma$ . Si  $\gamma$  est localisé à l'intérieur d'une région finie de l'espace alors (4.6) est fini, par contre si  $\gamma$  est étendue sa fonction

d'onde est d'ordre  $1/\sqrt{N}$  et (4.6) s'annule dans la limite de  $N$  infini. A partir de (4.6) on définit  $w^4(\lambda)d\lambda$  comme la somme de  $w_\gamma^4$  sur tous les vecteur propres  $\gamma$  avec une valeur propre entre  $\lambda$  et  $\lambda + d\lambda$ , divisée par le nombre d'états propres  $Nq(\lambda)d\lambda$  compris dans l'intervalle  $\lambda, \lambda + d\lambda$ . Par conséquent  $w^4(\lambda)$  peut être utilisé pour identifier la transition localisation-delocalisation puisque il est non nul seulement dans la partie du spectre qui correspondent à des vecteurs propres localisés.

## 4.1.2 Motivations

Le but de notre travail est d'étudier dans un cas simple le lien entre désordre topologique et localisation et de développer et tester des techniques qui pourront être utiles dans des cas plus compliqués.

Un exemple de phénomène physique où le désordre topologique joue un rôle fondamental et qui fait intervenir, d'un point de vue mathématique, un problème de matrice aléatoire du type décrit dans la section précédente, est la propagation d'onde acoustiques dans un matériau granulaire. Récemment plusieurs études expérimentales [98, 99] ont montré que si l'on envoie un paquet d'ondes acoustiques dans un matériau granulaire le signal transmis est composé de deux parties concentrées sur des fréquences différentes : une partie correspond à une propagation dans un milieu effectif, tandis que l'autre dépend très fortement de la structure microscopique et semble s'atténuer exponentiellement avec la distance parcourue. Cet effet a été interprété en terme de localisation des ondes acoustiques [98, 99, 103]. Un matériau granulaire est un très bon exemple de structure topologiquement désordonnée. En fait, la configuration typique d'un matériau granulaire à trois dimensions ou à deux dimensions (si polydisperse) est une structure amorphe dans laquelle les grains interagissent à travers un réseau de forces aléatoire [104]. En fig. 4.1 nous montrons le réseau des forces d'un matériau granulaire à deux dimensions [105] (un ensemble de disques de taille différente) soumis à une pression extérieure. Les lignes représentent les forces entre les disques et la largeur d'une ligne est reliée à l'intensité de la force correspondante. Si l'on voulait analyser la propagation d'onde acoustiques dans un matériau granulaire une approche simple serait de remplacer chaque disque par un point  $\mathbf{r}_i$ , l'interaction entre les disques par un ressort linéaire et analyser ce système de ressorts topologiquement désordonnés. On se ramènerait alors à un problème de matrice aléatoire du type décrit dans la section précédente, où le désordre est dû au fait que les positions  $\mathbf{r}_i$  sont des variables aléatoires.

Un autre exemple, qui fait intervenir le même problème mathématique, est l'étude des modes instantanés de vibration d'un liquide (INM) [100], qui sont les vecteurs propres du hessien de l'énergie évalué dans une configuration du liquide tirée au hasard avec la distribution de Boltzmann. Plusieurs études ont été effectuées pour interpréter qualitativement et quantitativement la dynamique d'équilibre des liquides surfondus en termes de INM [100]. Dans ce cas le désordre est du au fait que le hessien de l'énergie est évalué autour d'une configuration aléatoire tirée au hasard avec la distribution de Boltzmann.

Une autre motivation, un peu plus abstraite, est que le mouvement d'un point dans un espace géométriquement désordonné, cf. (4.4), peut être vu comme une description très schématique de la dynamique vitreuse [102, 106] : dans ce scénario les  $N$  points corres-



FIG. 4.1 – Réseau de forces d'un ensemble polydispense de disques soumis à une pression extérieure. Les lignes représentent les forces entre les disques et la largeur d'une ligne est reliée à l'intensité de la force correspondante.

pondent aux configurations d'un système dans l'espace de phase et on modélise la dynamique comme une succession de sauts qui ont une certaine probabilité dépendante de la température et de la différence des niveaux d'énergie entre les points reliés par les sauts. En baissant la température certains sauts deviennent très improbables et à une certaine température (la température de transition vitreuse) l'espace des configurations se divise en différentes régions qui sont mutuellement inaccessibles.

Enfin, le problème de matrices aléatoire (4.1,4.2) est intéressant d'un point de vue mathématique en tant que généralisation de l'ensemble gaussien symétrique, qui consiste à considérer l'ensemble des matrices aléatoires pour lesquelles chaque élément est une variable aléatoire gaussienne indépendante d'ordre  $1/\sqrt{N}$ . Cet ensemble est invariant sous des transformations orthogonales et pour cette raison s'appelle ensemble gaussien orthogonal (GOE). Il y a deux généralisations possibles de l'ensemble *GOE* : ou bien relaxer la condition que les éléments de matrices sont des variables indépendantes et maintenir l'invariance sous des transformations orthogonales, ou sinon faire l'inverse, c'est-à-dire considérer encore les éléments comme des variables indépendantes mais avec une loi qui n'est pas gaussienne. Dans ce deuxième cas on peut montrer que si les éléments sur chaque ligne sont d'ordre  $1/\sqrt{N}$  on retrouve les résultats de l'ensemble GOE. La seule généralisation possible qui ne redonnent pas les mêmes résultats que GOE consiste à considérer pour les éléments de matrices la loi de distribution (4.2) [107]. De cette façon il y a seulement un nombre fini d'éléments d'ordre un par ligne. La première généralisation a été très étudiée [108, 97] surtout à cause de ses relations avec la gravité quantique à deux dimensions. La deuxième généralisation coïncide exactement avec le modèle de matrices défini dans la section précédente. Concernant ce problème il y a très peu de résultats connus. Bray et Rodgers [106] avec des arguments heuristiques ont montré que le logarithme de la densité

d'états devrait être proportionnelle à  $e^{-1/\sqrt{\lambda}}$  pour des petites valeurs de  $\lambda$ . De plus, Mirlin et Fyodorov [107] ont montré que la fonction de corrélation entre les valeurs propres dans la phase étendue a la forme universelle trouvée dans GOE et ses généralisations.

## 4.2 Analyse du modèle

Dans la suite, pour montrer le lien entre désordre topologique et localisation, nous considérerons une lois de distribution des éléments de matrice (4.2) concentrée autour d'une valeur  $J = -1/\alpha$  :

$$p(W_{i,j}) = \delta(W_{i,j} + 1/\alpha) \quad (4.7)$$

Le choix de  $J = -1/\alpha$  a été fait pour avoir un support positif et borné pour  $\alpha \rightarrow +\infty$ . Un autre choix de  $J$  correspondrait seulement à un changement d'échelle global des valeurs propres. Avec cette forme de  $p(W_{i,j})$ , le seul type de désordre présent dans le système est topologique. Nous reviendrons à la fin sur les généralisations qui correspondent à considérer une loi de distribution quelconque à la place de (4.7) et un problème vectoriel à la place d'un problème scalaire.

### 4.2.1 Simulations numériques

Nous avons étudié les propriétés spectrales de la matrice  $\mathbf{W}$  à travers une diagonalisation numérique exacte jusqu'à des tailles d'ordre  $N = 3200$  et en moyennant sur 2000 échantillons. Nous avons considéré des valeurs de  $\alpha$  assez grandes par rapport à un. En effet, dans un graphe aléatoire il existe toujours des amas finis disjoints du reste, par conséquent les vecteurs propres, qui sont nuls partout sauf sur ces amas, sont localisés. Puisque la fraction des sites appartenant aux amas finis est de l'ordre  $e^{-\alpha}$  (voir fig. 2.1), le choix d'une valeur de  $\alpha$  assez grande assure que presque tous les sites appartiennent à l'amas géant et permet d'éviter une localisation "triviale", due simplement au fait que le système est divisé en parties disjointes.

En fig. 4.2 nous avons tracé la densité d'états moyenne  $p(\lambda)$  et le taux de participation inverse  $w^4(\lambda)$  en fonction de la valeur propre  $\lambda$  pour  $\alpha = 20$ . La densité d'états moyenne est caractérisée par une partie centrale ( $0.47 \pm 0.01 \simeq \lambda_- < \lambda < \lambda_+ \simeq 1.67 \pm 0.03$ ) lisse, en forme de cloche, qui correspond à des vecteurs propres étendus ( $w^4(\lambda)$  décroît comme  $3/N$  dans cette région ; les valeurs de  $\lambda_-$  et  $\lambda_+$  correspondent aux bords de l'intervalle de validité de ce régime d'échelle). Pour des grandes ( $\lambda > \lambda_+$ ) et des petites ( $\lambda < \lambda_-$ ) valeurs propres,  $w^4$  devient différent de zéro et croît en s'éloignant du centre du spectre. Par conséquent les vecteurs propres correspondant à ces valeurs de  $\lambda$  sont de plus en plus localisés quand on se déplace vers le bord du spectre. Les deux queues de  $p(\lambda)$ , qui correspondent à des vecteurs propres localisés, sont constituées d'une succession de pics. Pour étudier plus en détail la corrélation entre le désordre et la localisation, nous avons mesuré pour chaque vecteur propre, la connectivité de son centre, c'est à dire du site où le vecteur propre atteint son module maximum. Nous avons tracé en fig. 4.2  $c(\lambda)$ , qui est la connectivité moyenne

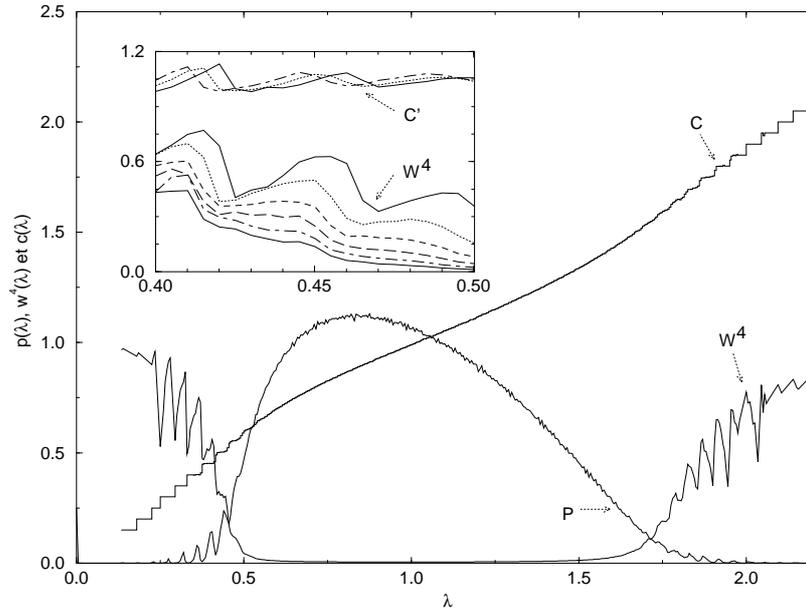


FIG. 4.2 – Densité d'états  $p(\lambda)$ , taux de participation inverse  $w^4(\lambda)$  et connectivité des sites centraux  $c(\lambda)$  (divisée par  $\alpha$ ) moyennées sur 2000 échantillon pour  $\alpha = 20$ ,  $N = 800$ . Encadré : oscillations de  $w^4(\lambda)$  pour  $N = 100, 200, 400, 800, 1600$  et  $3200$  (de bas vers le haut) et fluctuations de  $c'(\lambda)$  (divisée par  $\alpha$ ) pour  $N = 100, 200, 1600$  et  $0.38 \leq \lambda \leq 0.5$ .

du centre des vecteurs propres ayant une valeur propre  $\lambda$ , normalisée par rapport à la densité d'états en  $\lambda$ .  $c(\lambda)$  est une fonction croissante, qui est lisse dans la partie étendue et a des variations en escalier dans les deux parties localisées. Ce qui est remarquable est que la valeur de  $c(\lambda)$  est constante et égale à un entier quand  $\lambda$  appartient à un pic et après saute brutalement à l'entier successif quand  $\lambda$  passe au pic suivant. Ce résultat indique que les vecteurs propres sont localisés autour des sites qui ont une connectivité anormalement large ou petite. De plus, nous avons étudié les effets de taille finie sur  $p(\lambda)$  et  $w^4$ . La densité d'états moyenne a convergé à sa valeur asymptotique pour  $N = 3200$ . Par contre les oscillations de  $w^4$  qu'on voit en fig. 4.2 sont dues à des effets de taille finie et leur ampleur diminue quand  $N$  augmente ( $w^4$  tend donc vers une courbe lisse). Pour chercher d'interpréter ces oscillations nous avons mesuré la connectivité moyenne  $c'(\lambda)$  des voisins du site central d'un vecteur propre. Nous avons trouvé que les minima (les maxima) des oscillations du  $w^4$  correspondent à quand les voisins ont une fluctuation de la connectivité du même type (du type opposé) que le site central. Par exemple, concernant le bord de droite, qui correspondent à des connectivité du site centrale plus faibles que la moyenne, les maxima (les minima) correspondent à quand les voisins du site central ont une connectivité plus grande (petite) que la moyenne. Donc une fluctuation de la connectivité des voisins du même type que celle du site central fait diminuer et non augmenter  $w^4$  comment l'on pourrait penser naïvement. Nous interprétons alors cet effet comme si à  $N$  fini il y avait dans la partie localisée des vecteurs propres étendus, qui disparaissent dans la limite thermodynamique et qui donnent une contribution à  $w_4$  tendant vers zéro avec  $N$ . Dans ce

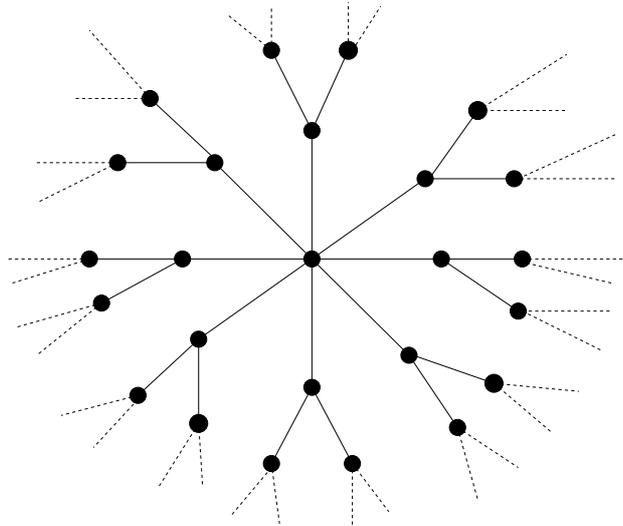


FIG. 4.3 – Arbre de Cayley caractérisé par un site centrale qui a une connectivité  $c = 8$  et tel que tous les autres sites ont une connectivité  $\alpha + 1 = 3$ .

cas une fluctuation de la connectivité des voisins opposée à la fluctuation de la connectivité du site central aide à *écranter le défaut géométrique* du à la connectivité anormalement large ou petite du site centrale et donc favorise les états étendus.

#### 4.2.2 Lien entre localisation et défauts géométriques : un argument simple

L'analyse numérique présentée dans la section précédente a suggéré l'existence d'un lien entre la localisation et les défauts géométriques ; plus précisément nous avons trouvé que les vecteur propres localisés sont centrés autour des sites qui ont une connectivité anormalement large ou petite.

Ce lien entre fluctuations de la connectivité et localisation peut être compris qualitativement grâce à un argument simple. Le graphe aléatoire est localement équivalent à un arbre, par conséquent afin d'étudier le rôle joué par les fluctuations de la connectivité locale nous considérons un arbre tel que le site central a  $c$  voisins et tous les autres sites ont  $\alpha + 1$  voisins. En fig. 4.3 nous avons dessiné le cas correspondant à  $\alpha = 2$  et  $c = 8$ . Dans la suite nous chercherons quelle est la condition sur  $c$  pour qu'un état localisé avec une symétrie sphérique existe. On notera la fonction d'onde de cet état  $\phi_n$ , où  $n$  est l'indice de la profondeur dans l'arbre. Les équations aux valeurs propres sont :

$$c(\phi_0 - \phi_1) = \lambda\alpha\phi_0 \quad (4.8)$$

$$\alpha(\phi_n - \phi_{n+1}) + (\phi_n - \phi_{n-1}) = \lambda\alpha\phi_n \quad \text{pour } n \geq 1 \quad (4.9)$$

De plus, la condition que l'état considéré soit localisé impose que  $|\phi_n| < 1/\alpha^{n/2}$  pour  $n \gg 1$  (puisque le nombre des voisins croît comme  $\alpha^n$ ). (4.9) est une équation homogène

linéaire aux différences finies; par conséquent sa solution générale est de la forme :

$$\phi_n = Ax_+^{-n} + Bx_-^{-n} \quad (4.10)$$

où  $x_{\pm}$  sont les deux solutions de l'équation :

$$\alpha\left(1 - \frac{1}{x}\right) + (1 - x) = \lambda\alpha \quad (4.11)$$

On peut montrer facilement que, suivant la valeur de  $\lambda$ , les deux solutions de (4.11) ou sont complexes avec un module égale à  $\sqrt{\alpha}$  ou sont réelles l'une plus grande et l'autre plus petite (en module) que  $\sqrt{\alpha}$ . Par conséquent, s'il y a une solution localisée, elle est de la forme  $\phi_n = Cx^{-n}$ , où  $x$  est la solution réelle de (4.11) qui est plus grande de  $\sqrt{\alpha}$ . En imposant que  $\phi_n = Cx^{-n}$  doit être aussi solution de l'équation (4.8) on trouve que :

$$x = \frac{c}{c - \alpha\lambda}$$

Remplaçant cette expression en (4.11) on obtient une équation sur  $\lambda$  qui est vérifiée seulement si  $\lambda = 0$  ou si

$$\alpha\lambda = c \left(1 - \frac{1}{\alpha - c}\right) \quad (4.12)$$

La solution  $\lambda = 0$  correspond à une solution non normalisable ( $x = 1$ ), tandis que la solution de (4.12) correspond à une solution normalisable et localisée seulement si  $|\alpha - c| > \sqrt{\alpha}$ , c'est à dire seulement si fluctuation de la connectivité du site central est assez grande.

Dans un réseau aléatoire il y a une fraction finie de sites qui ont une connectivité assez grande ou assez petite, par conséquent, suivant le raisonnement précédent, il y a un vecteur propre localisé autour de chacun des défauts et ceci donne lieu à des pics de Dirac dans la densité d'états moyenne. Qualitativement on retrouve donc les résultats des simulations numériques, même si l'image qu'on a obtenue est assez simpliste. En fait pour obtenir une image plus complète et des bons résultats quantitatives (par exemple, les valeurs de  $\lambda_- = 0.6$  et  $\lambda_+ = 1.5$  obtenues avec cette approximation sont assez différentes des valeurs numériques), il faudrait considérer non seulement la fluctuation de la connectivité du site central, mais aussi des voisins et des voisins des voisins, etc. . Cette procédure se complique beaucoup en augmentant le nombre de sites qui peuvent avoir une fluctuation et en plus n'est pas facilement généralisable à des cas plus compliqués. L'approche que nous introduirons dans la section suivante se révélera être beaucoup plus performante. Par conséquent nous avons juste généralisé la procédure précédente au cas où le site central a une connectivité  $c$ , ses voisins une connectivité  $c'$  et tous les autres sites une connectivité  $\alpha + 1$ . Nous avons trouvé que les états localisés dûs à une connectivité du site central petite (grande) peuvent disparaître si la connectivité des voisins est grande (petite). Comme dans les simulations numériques nous avons donc obtenu qu'un défaut géométrique sur un site peut être *écranté* par une fluctuation opposée de la connectivité des voisins.

### 4.2.3 Théorie du milieu effectif et approximation à un défauts

Dans la section précédente nous avons obtenu grâce à un argument heuristique une explication du lien, trouvé dans les simulations numériques, entre les défauts géométriques et la localisation. Néanmoins, pour obtenir des bons résultats quantitatives et surtout pour développer une méthode qui soit applicable à des cas plus compliqués il faut utiliser une approche différente, qui consiste à écrire la résolvante  $G(\lambda + i\epsilon)$  de  $\mathbf{W}$  :

$$G(\lambda + i\epsilon) = \text{Tr} \left( \frac{1}{(\lambda + i\epsilon)\mathbf{1} - \mathbf{W}} \right)$$

comme la trace multiplié par  $(-i)$  du propagateur d'une théorie des champs gaussiens discrets, qui est caractérisée par une action :

$$S = \sum_{i=1}^N \frac{i}{2} (\lambda + i\epsilon) \phi_i^2 - \frac{i}{2} \sum_{i,j=1}^N W_{i,j} \phi_i \phi_j \quad (4.13)$$

Cette théorie des champs est bien définie tant que  $\epsilon$  est positif. Puisque la densité d'états peut être obtenue à partir du résolvant :

$$q(\lambda) = -\frac{1}{N\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} G(\lambda + i\epsilon) \quad (4.14)$$

Toutes les propriétés spectrales comme la densité d'états moyenne ou les fonctions de corrélation entre valeurs propres  $\overline{q(\lambda_1)q(\lambda_2) \cdots q(\lambda_m)}$  (où  $\overline{\cdot}$  indique la moyenne sur le désordre, c'est à dire sur les éléments de matrice  $W_{i,j}$ ) peuvent être obtenues comme la moyenne sur le désordre du produit d'un certain nombre de résolventes évaluées en  $\lambda$  différents, donc comme des fonctions des corrélations entre différents champs  $\phi_i$  moyennées sur le désordre. Par exemple la densité d'états moyenne est égale à :

$$p(\lambda) = \overline{q(\lambda)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Re} \overline{\langle \phi_i^2 \rangle} \quad (4.15)$$

où maintenant  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne par rapport à la théorie gaussienne.

Pour calculer les fonctions de corrélations moyennées par rapport au désordre nous utiliserons la méthode des répliques <sup>1</sup>. Dans la suite on s'intéressera surtout au calcul de la densité d'états moyenne. Suivant la même procédure utilisée dans le chapitre 2 pour les systèmes de spins à connectivité finie, mais maintenant appliquée à des champs continus, on trouve que le paramètre d'ordre de la théorie répliquée est :

$$\rho(\vec{\phi}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \overline{\delta(\vec{\phi} - \vec{\phi}_i)} \quad (4.16)$$

---

<sup>1</sup>Une autre méthode, qui dans ce cas est équivalente à l'approche des répliques, est celle supersymétrique [109, 110].

où  $\vec{\phi}_i$  sont les champs à  $n$  composantes qui interviennent quand on réplique la théorie définie en (4.13). Le paramètre d'ordre rend stationnaire la fonctionnelle densité “d'énergie libre” :

$$\begin{aligned} \ln \Xi[\rho] &= \int d\vec{\phi} \rho(\vec{\phi}) \left[ \frac{i}{2}(\lambda + i\epsilon)\vec{\phi}^2 - \ln \rho(\vec{\phi}) + 1 \right] \\ &+ \frac{\alpha}{2} \int d\vec{\phi} d\vec{\psi} \left( e^{-i(\vec{\phi}-\vec{\psi})^2/2\alpha} - 1 \right) \rho(\vec{\phi})\rho(\vec{\psi}), \end{aligned} \quad (4.17)$$

sous la condition de normalisation  $\int d\vec{\phi} \rho(\vec{\phi}) = 1$ . En fait, puisque l'on sait que la symétrie  $O(n)$  de la théorie répliquée, n'est pas brisée quand on calcule la densité d'états [111], on peut restreindre le problème variationnelle (4.17) aux fonctions invariantes par rotation dans l'espace des répliques, c'est à dire aux fonctions qui dépendent seulement du module de  $\vec{\phi}$ . On peut remarquer la similarité entre (4.17) et (2.9). Une fois qu'on connaît le paramètre d'ordre  $\rho(\vec{\phi})$ , la densité d'états moyenne se calcule facilement grâce à l'identité suivante :

$$p(\lambda) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Re} \int d\vec{\phi} \rho(\vec{\phi}) \vec{\phi}^2 \quad (4.18)$$

Malheureusement, l'équation [106] sur le paramètre d'ordre qu'on obtient en imposant que  $\rho(\vec{\phi})$  doit être un point de stationnarité de (4.17) n'est pas soluble analytiquement. Il y a donc deux approches envisageables : ou bien chercher de résoudre numériquement l'équation de stationnarité de (4.17) ou sinon développer un schéma d'approximation qui permet d'obtenir des solutions approchées. La première approche, qui a été suivie récemment en [112], est possible seulement pour des distributions des éléments de matrice particulièrement simples. En effet, déjà si l'on considère un problème vectoriel à la place d'un problème scalaire il faut résoudre une équation fonctionnelle non linéaire sur une fonction à plusieurs variables ; d'autre part si l'on veut trouver un résultat numérique exact il est suffisant, comme on l'a fait dans la section précédente, de calculer les propriétés spectrales en diagonalisant exactement, pour  $N$  assez grand, la matrice  $\mathbf{W}$ . La deuxième approche, que nous avons développée et qui sera exposée dans la suite, a comme inconvénient de ne pas donner accès à la solution exacte déjà dans un cas relativement simple comme celui que nous sommes en train de considérer. D'un autre coté, elle permet de trouver des bons résultats qualitatifs et quantitatifs et en plus est facilement généralisable et implémentable dans des cas plus compliqués.

Notre démarche consiste à introduire graduellement des fluctuations de plus en plus grandes de la connectivité locale. Puisque les champs  $\phi_i$  sont des variables aléatoires gaussiennes pour une configuration donnée du désordre, on peut montrer facilement que :

$$\rho(\vec{\phi}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i \exp \left( \frac{i \vec{\phi}^2}{2[(\lambda + i\epsilon)\mathbf{1} - \mathbf{W}]_{ii}^{-1}} \right), \quad (4.19)$$

où les constantes  $C_i$  deviennent égales à un dans la limite  $n \rightarrow 0$ . Dans la phase étendue on s'attend à ce que  $[(\lambda + i\epsilon)\mathbf{1} - \mathbf{W}]_{ii}^{-1}$  soit à peu près indépendant de  $i$ , tandis que dans la

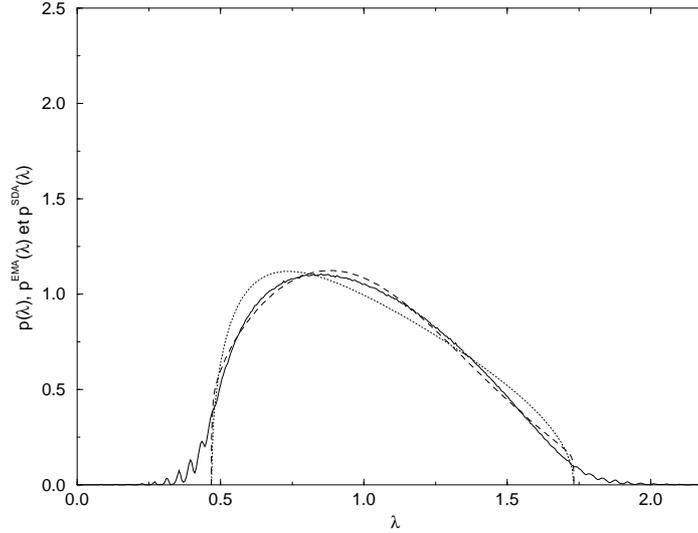


FIG. 4.4 – Densité d'états moyenne numérique (courbe pleine) en fonction de  $\lambda$  comparée aux résultats de l'approximation EMA (ligne en pointillé) et de l'approximation SDA (ligne avec des traits). Il faut remarquer que l'approximation SDA prédit aussi l'existence de pics de Dirac. Les centres, les poids, et les connectivités correspondantes aux pics prédits par la SDA sont comparés avec ceux des pics de la densité d'états numérique dans la table 4.1.

phase localisée cette quantité devrait fluctuer beaucoup de site à site. Par conséquent, pour étudier la phase étendue nous avons considéré (4.17) comme un problème variationnel et nous avons injecté dans (4.17) un Ansatz gaussien pour  $\rho(\phi)$ . Ceci nous a mené à une simple équation non linéaire sur la variance de la gaussienne, qui contient  $\lambda$  comme paramètre et qu'il faut résoudre pour chaque valeur de  $\lambda$ . Cette approximation a été appelée milieu effectif (EMA) parce que elle revient à négliger les fluctuations de  $[(\lambda + i\epsilon)\mathbf{1} - \mathbf{W}]_{ii}^{-1}$  de site à site. La densité d'états moyenne obtenue par EMA est tracée (ligne en pointillé) en fig. 4.4. On trouve un assez bon accord dans le régime étendu, par exemple les valeurs de  $\lambda_- \simeq 0.468$  et  $\lambda_+ \simeq 1.732$  sont assez proches des valeurs numériques. Par contre l'approximation EMA est très mauvaise dans le régime localisé : tout simplement l'EMA prédit une densité d'états nulle dans le régime localisé. Ce comportement peut être compris en remarquant que remplacer le réseau aléatoire par un milieu effectif peut être correct dans le régime étendu, mais certainement pas dans le régime localisé, étant donné qu'on a trouvé que la localisation est induite par des fluctuations de la géométrie locale.

Pour aller au-delà d'EMA, il est judicieux d'interpréter l'équation de stationnarité de (4.17) comme une équation auto-cohérente (en effet elle peut être obtenue par la méthode de cavité, comme l'équation (3.5) analysée au chapitre précédent) :

$$\rho(\vec{\phi}) = h e^{\frac{i}{2}\vec{\phi}^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-\alpha} \alpha^k}{k!} \left[ \int d\vec{\psi} \rho(\vec{\psi}) e^{-i(\vec{\phi}-\vec{\psi})^2/2\alpha} \right]^k \quad (4.20)$$

où  $h$  est une constante qui tend vers un quand le nombre de répliques tend vers zéro. Cette équation traduit le fait que un certain site  $i$  peut avoir  $k$  voisins avec une probabilité

$c$	3	4	5	6	7	8	9	10
$\lambda^{NUM}$	0.138	0.185	0.230	0.275	0.320	0.360	0.402	0.440
$\lambda^{SDA}$	0.140	0.186	0.231	0.276	0.319	0.361	0.400	0.435
$p^{NUM} \times 10^4$	0.025	0.096	0.566	1.607	4.70	10.75	25.14	< 50
$p^{SDA} \times 10^4$	0.027	0.134	0.532	1.747	4.88	11.76	24.54	42.85

TAB. 4.1 – Poids  $p$  des pics (i.e. fraction de valeurs propres appartenant à un pic) et centres des pics obtenus par les simulations numériques (NUM) et l’approximation SDA pour des petites valeurs de la connectivité  $c$ . Un accord similaire est obtenu pour des grandes valeurs de la connectivité.

déterminée par la loi de Poisson. Sur chacun des voisins il y a un champ  $\vec{\psi}$ , qui est une variable aléatoire distribuée avec la loi  $\rho(\vec{\psi})$ , et qui produit par l’intermédiaire de l’interaction  $\exp(-i(\vec{\phi} - \vec{\psi})^2/2\alpha)$  une distribution  $\rho_i(\vec{\phi})$  sur le site  $i$ . En exigeant que la distribution des voisins et du site  $i$  soit la même, on retrouve l’équation (4.20). Pour obtenir des meilleurs résultats et surtout pour capturer les effets dus à la localisation géométrique, nous avons itéré une fois l’équation (4.20) en prenant la distribution EMA comme condition initiale. Cette procédure est celle qu’on suivrait naturellement pour résoudre numériquement l’équation (4.20) et en plus permet d’introduire l’effet de la fluctuation de la connectivité. La distribution ainsi obtenue peut être interprétée comme la  $\rho(\vec{\phi})$  d’un site, dont la connectivité fluctue, et qui a des voisins appartenant au milieu effectif. Pour cette raison cette approximation a été appelée à un défaut (SDA). La densité d’états moyenne prédite par SDA est composée de deux parties. Dans la phase étendue on trouve une courbe lisse qui est tracée en fig. 4.4 (courbe avec des traits) et qui correspond à une approximation meilleure que celle obtenue par EMA, tandis que dans le régime localisé on obtient des pics de Dirac. Chaque pic correspond à un terme de la série (4.20). Ceci permet donc d’établir un lien entre les pics et les fluctuations de la connectivité associée. Par exemple on interprète le pic correspondant au terme  $k = 1$  comme dû aux vecteurs propres localisés, ayant un site central avec un seul voisin. Nous avons trouvé, comme dans les simulations numériques, qu’il n’y a pas de pic qui correspond à une connectivité comprise entre 10 et 32. Dans la table 4.1 les centres, les poids et les connectivités correspondants aux pics prédits par la SDA sont comparés à ceux obtenus numériquement. L’accord entre les simulations numériques et l’approximation SDA est bon dans le régime étendu et aussi dans celui localisé. Finalement, nous avons vérifié qu’on peut retrouver, dans le cadre de l’approximation SDA, que les pics de la densité d’états correspondent à des vecteurs propres localisés en calculant  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\epsilon G(\lambda + i\epsilon)G(\lambda - i\epsilon)]$  [113] : cette quantité est non nulle seulement dans la phase localisée <sup>2</sup>.

<sup>2</sup>Pour calculer cette quantité nous avons appliqué l’approximation SDA à une théorie avec deux groupes de champs répliqués : le premier groupe correspond au propagateur  $G(\lambda + i\epsilon)$  et le deuxième à  $G(\lambda - i\epsilon)$ . Il faut souligner que dans ce cas considérer que la symétrie des répliques ne soit pas brisée à l’intérieur d’un groupe est seulement une approximation [111].

#### 4.2.4 Un approche générale : théorie des liquides à $d + n$ dimensions

Nous avons introduit le modèle (4.1,4.2) comme une prise en compte simplifiée des situations physiques tels que les modes normaux de vibration d'un matériau amorphe ou la diffusion sur un réseau aléatoire.

Cependant, comme nous avons déjà souligné dans la section 2.1.4, on peut considérer la densité d'énergie libre (4.17) comme le premier terme d'un développement en cumulants, qui fait intervenir les corrélations entre éléments de matrice  $W_{k,l}$  de façon progressive. Le premier terme correspond à considérer les  $W_{k,l}$  comme des variables indépendantes et donne lieu à un terme quadratique en  $\rho(\vec{\phi})$ , cf. (4.17). Les termes suivants font intervenir la loi de probabilité jointe de  $W_{k,l}$  (le  $k$ -ème terme fait intervenir les corrélations entre  $k$  éléments des matrices) et donne lieu à des termes d'ordre supérieur en  $\rho(\vec{\phi})$ .

Dans la suite nous montrons que pour les modes normaux de vibrations d'un liquide, ce développement correspond à un développement du viriel pour un liquide à  $d + n$  dimensions, où  $d$  est la dimension de l'espace et  $n$  le nombre des répliques. Ce lien permet donc d'appliquer toutes les techniques et le savoir faire de la théorie des liquides à l'analyse des modes instantanés de vibrations des liquides.

Un liquide est formé de  $N$  particules qui sont dans des positions  $\mathbf{x}_k$  et qui interagissent avec une énergie potentielle  $V(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l)$ . Pour une configuration microscopique donnée les modes instantanés de vibrations sont les vecteurs propres du hessien  $W_{k,l} = \partial^2 V(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l) / \partial \mathbf{x}_k \partial \mathbf{x}_l$  ( $k \neq l$ ), qui vérifie la condition (4.1). Dans ce cas la moyenne sur le désordre consiste à sommer avec le poids de Boltzmann sur toutes les configurations possibles des particules. Par conséquent la moyenne de la fonction de partition répliquée, à partir de laquelle on peut obtenir les propriétés spectrales, s'écrit comme :

$$\overline{Z^n} = \int \left( \prod_k d\vec{\phi}_k d\mathbf{x}_k e^{\frac{i}{2}(\lambda+i\epsilon)\vec{\phi}_k^2} \right) \prod_{\langle l,m \rangle} \exp \left( -\beta V(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_m) + \frac{i}{2} W_{l,m} (\vec{\phi}_l - \vec{\phi}_m)^2 \right) \quad (4.21)$$

où par simplicité de notation nous n'avons pas explicité la somme sur les  $d^2$  indices internes de  $\mathbf{W}$ . Cette expression peut être interprétée comme la fonction de partition pour un liquide de  $N$  particules, qui ont une position généralisée  $\mathbf{r}_i = (\mathbf{x}_i, \vec{\phi}_i)$  et qui interagissent à travers "l'énergie potentielle" :  $V(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_m) - iW_{l,m}(\vec{\phi}_l - \vec{\phi}_m)^2/\beta$ . Appliquant à ce liquide à  $d + n$  dimensions le développement diagrammatique du viriel [114] (il faut donc se placer dans l'ensemble grand-canonique, on appellera  $y$  la fugacité du vrai liquide) on déduit que la densité généralisée  $\rho(\mathbf{x}, \vec{\phi})$  rend stationnaire :

$$\ln \Xi[\rho] = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) [\ln z^*(\mathbf{r}) - \ln \rho(\mathbf{r}) + 1] + \mathcal{S}, \quad (4.22)$$

où  $z^*(\mathbf{r}) = ye^{\frac{i}{2}\vec{\phi}^2}$  et  $\mathcal{S}$  est la somme de tous les diagrammes, qui ne peuvent pas être décomposés en effaçant un vertex [114], composés par des liens de Mayer

$$b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \exp \left( -\beta V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \frac{i}{2} W_{ij} (\vec{\phi}_i - \vec{\phi}_j)^2 \right) - 1$$

et des vertex  $\rho(\mathbf{x}, \vec{\phi})$ .

Si on retient parmi les diagrammes de  $\mathcal{S}$  seulement le premier, c'est-à-dire celui avec un seul lien, on retrouve le modèle sur le graphe aléatoire (4.1,4.2), qui correspond donc à un système physique pour lequel l'approximation de considérer seulement le premier coefficient du viriel est exacte.

### 4.3 Discussion et conclusion

En résumé, nous avons étudié le modèle de matrices aléatoires (4.1,4.2,4.7), qui procure l'exemple le plus simple pour analyser le lien entre le désordre géométrique et la localisation. En effet, en choisissant la loi de distribution (4.7) le désordre est seulement du au fait que la structure sous-jacente, le graphe aléatoire, est géométriquement désordonnée. Nous avons trouvé grâce à une analyse numérique et analytique, que la localisation est due à des fluctuations de la connectivité locale : le régime étendu est bien décrit en faisant une approximation de milieu effectif, tandis que la localisation est reliée à des défauts de la géométrie locale du réseau.

Dans ce chapitre, pour analyser les effets dûs seulement au désordre géométrique, nous nous sommes concentré sur la loi (4.7). Nous avons aussi étudié des cas plus généraux : nous avons considéré une loi (4.2) gaussienne ou lorentzienne pour les éléments de matrice et aussi un problème vectoriel à la place d'un problème scalaire. Le principal changement est que dans ces cas il y a deux types de désordre dans le système : un purement géométrique et l'autre dû à la fluctuation de la valeur des liens. A cause de ce dernier les centres des pics qu'on voit sur la densité d'états en figure 4.2 fluctuent ; ceci entraîne que la densité d'états devient une fonction lisse aussi dans le régime localisé.

De plus, nous avons montré que le modèle étudié dans ce chapitre peut être obtenu comme une approximation au premier ordre d'un système de dimension finie. En particulier, quand on s'intéresse aux modes instantanés de vibration d'un liquide, l'étude du problème de matrice aléatoire résultant correspond à l'analyse d'un liquide à  $d + n$  dimensions, où  $d$  est la dimension de l'espace et  $n$  est le nombre des répliques. Dans ce contexte, le modèle que nous avons étudié peut être vu comme un système pour lequel l'approximation consistant à garder seulement le premier coefficient du viriel est exacte.

Nous soulignons qu'il serait très intéressant d'arriver à établir un lien plus précis entre localisation et désordre géométrique, qui permettrait de remonter aux propriétés statistiques de la micro-structure d'un matériau à partir de l'analyse de la propagation des ondes dans le même matériau. En généralisant de cette façon aux matériaux désordonnés ce qu'on fait pour les cristaux en analysant les pics de Bragg.

Enfin, nous remarquons que les modèles à connectivité finie, même s'ils sont des systèmes de champ moyen, ne sont pas exactement solubles à cause de les grandes difficultés techniques qui interviennent dans leur analyse. Il est important de souligner que cette augmentation de difficulté technique (par rapport à leur correspondants complètement connectés) est en général accompagnée d'une majeure richesse physique. L'utilisation d'une approche variationnelle combinée avec l'approximation SDA, qui permet de tenir compte des fluctuations

de la géométrie locale, se révèle être très utile pour analyser ces systèmes, comme nous avons montré à plusieurs reprises : dans le chapitre 2, dans l'analyse de la K-SAT, et dans l'étude, que nous avons présenté dans ce chapitre, de la diffusion sur un graphe aléatoire.

# Chapitre 5

## La phase vitreuse et les verres de spins discontinus : analyse de la relation entre structures inhérentes et états purs

### 5.1 Introduction

#### 5.1.1 La transition vitreuse

Si l'on refroidit un liquide suffisamment vite, on peut éviter la cristallisation et obtenir un liquide surfondu qui est dans une phase métastable par rapport au cristal. En refroidissant ultérieurement, la viscosité et le temps de relaxation structurelle du liquide augmentent très rapidement jusqu'au point où le liquide n'arrive plus à équilibrer sur l'échelle de temps de l'expérience. Simultanément, la chaleur spécifique chute et le système devient un matériau rigide amorphe qu'on appelle verre. La température  $T_g$  correspondant à la transition vitreuse dépend de l'échelle de temps intervenant dans l'expérience, et en particulier du taux de refroidissement.

En fig. 5.1 nous montrons la variation, en échelle logarithmique, de la viscosité en fonction de  $1/T$  [115] (des courbes similaires peuvent être obtenues pour le temps de relaxation structurelle). On voit nettement deux comportements différents : d'une part il y a des liquides comme  $GeO_2$  qui sont caractérisés par une variation presque linéaire en  $1/T$ , ce qui indique un comportement d'Arrhenius en fonction de la température ( $\sim \exp(E/T)$ , où  $E$  s'appelle énergie d'activation). D'autre part, il y a des liquides, comme par exemple le glycerol, caractérisés par une variation plus rapide, appelée super-Arrhenius, qui est en général décrite phénoménologiquement par la loi de Volger-Fulcher-Tammann (VFT) :

$$\eta = \eta_0 \exp\left(D \frac{T}{T - T_0}\right) \quad (5.1)$$

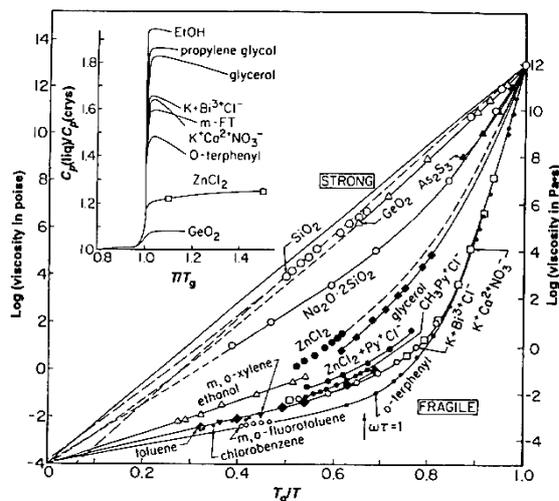


FIG. 5.1 – Viscosité en échelle logarithmique tracée en fonction de  $T_g/T$  pour différents liquides. Encadré : rapport entre la chaleur spécifique du liquide et celle du cristal en fonctions de  $T/T_g$ . Une chute nette de la chaleur spécifique à la transition correspond en général à un comportement super-Arrhenius de la viscosité. Les liquides qui comportent ces deux effets sont appelés fragiles et les autres forts.

où  $\eta_0$ ,  $D$  et  $T_0 < T_g$  sont des paramètres ajustables. Ces deux comportements différents ont été utilisés par Angell [115] pour classifier les liquides surfondus en forts et fragiles selon que l'allure de la viscosité est respectivement du type Arrhenius ou super-Arrhenius. De plus, la différence entre ces deux types de liquides peut être aussi remarquée dans la chute de la chaleur spécifique qui est beaucoup plus marquée pour les liquides fragiles. Le comportement Arrhenius des liquides surfondus forts est bien expliqué en termes d'énergie d'activation de processus élémentaires [116]; par contre, concernant les liquides surfondus fragiles, le comportement super-Arrhenius, caractérisé par une énergie d'activation qui croît avec la température, n'a pas encore reçu une explication théorique satisfaisante. Dans la suite nous nous intéresserons à ce dernier type de systèmes, dont les verres de spins généralisés ou discontinus semblent donner une image de champ moyen. De plus, nous nous concentrerons sur les aspects qui plus montrent une analogie avec les verres des spins discontinus. Par conséquent, il est important de souligner que différents aspects expérimentaux, phénoménologiques et théoriques ne seront pas mentionnés dans cette brève introduction à la phase vitreuse.

La transition vitreuse est sans doute un phénomène dynamique (la température  $T_g$  dépend de l'échelle de temps intervenant dans l'expérience et du taux de refroidissement). Cependant, certains aspects du comportement thermodynamique des liquides surfondus fragiles peuvent être interprétés comme des signes de l'existence d'une vraie transition thermodynamique qu'on pourrait atteindre si l'on était capable d'aller à des échelles de temps beaucoup plus grandes. En particulier les arguments utilisés en faveur d'une vraie transition thermodynamique sont : la divergence cachée dans la loi VFT et la décroissance rapide

de l'entropie du liquide par rapport à celle du cristal, due au fait que la chaleur spécifique du liquide est nettement plus grande que celle du cristal. En fait, en extrapolant la courbe de l'entropie du liquide, et en supposant que l'extrapolation correspond à la courbe qu'on pourrait obtenir si l'on était capable d'équilibrer le liquide au dessous de  $T_g$ , on trouve qu'à une certaine température  $T_K$  l'entropie du liquide devient plus petite que celle du cristal ("paradoxe" de Kauzmann) et ensuite, à une température plus faible, devient négative (en violant le troisième principe de la thermodynamique). Une façon de résoudre ce "paradoxe" consiste à penser qu'une transition thermodynamique vers un état vitreux idéal survient à une température  $\sim T_K$ . De plus, le fait que la température  $T_0$  dans la loi de VFT est souvent proche de  $T_K$  peut être vu comme un argument supplémentaire en faveur de la transition thermodynamique, qui, par ailleurs, serait inhabituelle étant du deuxième ordre d'un point de vue thermodynamique (avec une discontinuité de la chaleur spécifique et pas de chaleur latente), mais caractérisée par un saut discontinu du paramètre d'ordre (la modulation de la densité microscopique du verre n'apparaît pas graduellement à partir du profil plat caractéristique du liquide), comme les transition du premier ordre.

Cette transition est expliquée en général en terme d'une crise d'entropie [115] : on imagine l'espace des configurations accessibles comme un ensemble de "bassins" et on décrit la dynamique d'équilibre du liquide surfondu en terme de deux processus différents : le mouvement à l'intérieur d'un bassin et le saut entre bassins. Plus la température est faible plus le nombre de bassins accessibles diminue et la transition vitreuse survient quand il n'y a plus de bassins accessibles. Si l'on divise l'entropie du liquide en deux termes : l'entropie à l'intérieur d'un bassins et l'entropie due au nombre de bassins, appelée entropie configurationnelle, la transition thermodynamique correspond, dans ce scénario, au point où l'entropie configurationnelle s'annule (pour cette raison on dit que la transition est due à une crise d'entropie).

La transition vitreuse en tant que phénomène dynamique a été étudiée d'un point de vue théorique grâce à la théorie du couplage des modes (MCT) [117]. Dans ce cadre mathématique on écrit des équations auto-cohérentes approchées sur les fonctions de corrélations des fluctuations de la densité. L'analyse de ces équations prédit qu'une particule tend à rester piégée pour un certain temps dans une cage, formée à cause de l'interaction avec les particules voisines. De plus, en accord avec les expériences, les solutions des équations MCT sont caractérisées par deux échelles de temps séparées : une courte,  $\tau_\beta$ , qui correspond au mouvement à l'intérieur de la cage et l'autre plus longue,  $\tau_\alpha$ , qui correspond au temps nécessaire pour en sortir. En diminuant la température,  $\tau_\alpha$  augmente et quand la température atteint une certaine valeur  $T_{MCT}$ , la particule reste piégée dans sa cage pour toujours. Le point faible de la théorie du couplage des modes est que la température de transition  $T_{MCT}$  est beaucoup plus grande que  $T_g$  ou  $T_K$ . Ce résultat pourrait s'expliquer par le fait que les termes négligés pour écrire les équations MCT représentent physiquement des "processus activés" permettant de restaurer l'ergodicité et deviennent importants au dessous de  $T_{MCT}$ . La transition prédite par la théorie MCT correspondrait donc à un cross-over vers un régime de température dans lequel la relaxation structurelle advient seulement grâce aux "processus activés". Malheureusement, jusqu'à maintenant, aucun formalisme théorique capable de tenir compte de ces processus n'a pas été développé.

En outre, nous soulignons que les simulations numériques, notamment les simulations de dynamique moléculaire, [118] confirment le scénario précédent. A des températures plus grandes que  $T_{MCT}$ , le système est libre de diffuser dans l'espace des configurations; par contre pour  $T < T_{MCT}$  le comportement dynamique change : le système reste la majorité du temps dans un bassin, une structure inhérente (voire section suivante), et de temps en temps saute d'un bassin à un autre (processus activé). Cependant, puisque les simulations sont effectuées sur un nombre de particules et sur une échelle de temps de l'ordre respectivement de  $10^3 - 10^4$  et  $10^{-8}$  s, il n'est pas clair que les résultats obtenus restent pertinents sur les échelles de temps et de volume caractéristiques de la transition vitreuse [115, 119].

### 5.1.2 Analogie avec les verres de spins généralisés

Les systèmes désordonnés en champ moyen caractérisés par une brisure de la symétrie des répliques peuvent être divisés en deux grandes classes : ceux exhibant une brisure complète (verres de spins continus) qui sont censés donner une description de champ moyen des verres de spins réels [2], et ceux caractérisés par une brisure à un pas (verres de spins discontinus ou généralisés) qui montrent beaucoup d'analogies avec les verres structuraux [83, 84, 85]. L'exemple le plus simple appartenant à cette deuxième classe est le modèle à énergie aléatoire de Derrida [120], mais beaucoup d'autres systèmes de ce type, en général caractérisés par une interaction à plusieurs spins, ont été inventés [121, 82]. Un modèle, dont la simplicité permet des études analytiques approfondies, est le modèle à p-spins sphériques [82, 26, 27]. Le hamiltonien de ce système est égal à :

$$H = - \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1, \dots, i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} \quad i_1, \dots, i_p = 1, \dots, N \quad (5.2)$$

où les couplages  $J_{i_1, \dots, i_p}$  sont des variables indépendantes gaussiennes de variance  $p!/(2N^{p-1})$  et moyenne nulle, et les  $s_i$  sont des spins continus qui vérifient la contrainte sphérique globale  $\sum_i s_i^2 = N$ . Les analogies avec les verres fragiles se manifestent clairement en terme de paysage d'énergie libre. Ce paysage a une forme très irrégulière à basse température avec beaucoup de minima qui sont interprétés comme des états purs [2]. A haute température seule le minimum paramagnétique est pertinent. Dans un régime de température intermédiaire  $T_s < T < T_d$  ( $T_s$  et  $T_d$  sont respectivement les températures de transition statique et dynamique), le système semble être, d'un point de vue thermodynamique, encore dans l'état paramagnétique; mais en réalité une analyse dynamique [122] a montré que l'état paramagnétique n'existe plus ou plutôt est fracturé en un nombre exponentiel d'états vitreux. L'entropie globale du système est donc formée de deux parties : l'entropie à l'intérieur d'un état et l'entropie, appelée complexité, due à l'existence d'un nombre exponentiel d'états. En diminuant la température, la complexité décroît et la transition thermodynamique survient quand la complexité s'annule. A cause de la "crise entropique" la chaleur spécifique chute à  $T_s$ , comme dans le cas de la transition vitreuse. Le comportement thermodynamique de ces systèmes montre donc des analogies très fortes avec celui des verres fragiles;

en effet il est tentant de remplacer bassin par état pur et entropie configurationnelle avec complexité pour obtenir presque la même description de la transition thermodynamique. En particulier, dans cette analogie, l'état paramagnétique correspond au liquide, et le fait que l'état paramagnétique est fracturé en un nombre exponentiel d'états correspond à l'interprétation de la dynamique d'équilibre du liquide surfondu en termes de mouvements à l'intérieur des bassins et de sauts entre bassins. De plus la transition thermodynamique des verres de spins discontinus exhibe les caractéristiques "étranges" que devrait avoir la transition vitreuse : elle est du deuxième ordre d'un point de vue thermodynamique (avec une chute de la chaleur spécifique à  $T_s$ , sans chaleur latente), mais elle est accompagnée d'une discontinuité du paramètre d'Edwards et Anderson, comme les transitions du premier ordre.

Les analogies continuent à être présentes, et peut être sont encore plus frappantes, en ce qui concerne le comportement dynamique [11], qui est étudié en analysant la dynamique de relaxation de Langevin sur des échelles de temps  $t \ll N$ . Puisque le système est de champ moyen, on peut écrire deux équations fermées sur la fonction de corrélation  $C(t, t')$  et de réponse  $R(t, t')$  :

$$C(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i(t) s_i(t') \rangle \quad R(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\delta \langle s_i(t) \rangle}{\delta h_i(t')} \quad (5.3)$$

où  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne sur le bruit thermique et  $h_i(t)$  le champ magnétique couplé au spin  $i$ . L'analyse des équations en  $C(t, t')$  et  $R(t, t')$  a montré [11] qu'il existe deux régimes différents. A haute température ( $T > T_d$ ) le système est caractérisé, indépendamment des conditions initiales par une dynamique d'équilibre : à grands temps les fonctions de corrélation et de réponse deviennent invariant par rapport aux translations dans le temps et le théorème de fluctuation-dissipation (FDT) est vérifié. De plus, l'équation vérifiée par la fonction de corrélation, dans ce régime asymptotique, coïncide avec la version simple de l'équation de la théorie de couplage des modes [83, 123]. Par conséquent le comportement de la fonction de corrélation est le même que celui décrit dans le paragraphe précédent [124] : une relaxation rapide vers une valeur de la corrélation non nulle (effet de cage) suivie d'une décorrélation complète (sortie de la cage) sur un temps plus grand. En diminuant la température, l'échelle de temps la plus grande croît et diverge à  $T_d$ . Pour des températures plus petites que  $T_d$ , le système n'arrive plus à équilibrer. Si l'on fait une trempe à partir d'une température élevée vers une température  $T < T_d$  et l'on analyse la fonction de corrélation et de réponse pour  $t = t_w$  et  $t' = t_w + \tau$  comme fonction de  $\tau$  pour différentes valeurs de  $t_w$  ( $t_w \gg 1$ ), on trouve deux régimes [25]. Quand  $\tau \ll t_w$ , le système semble être équilibré à l'intérieur d'un état : la fonction de corrélation relaxe vers le paramètre d'Edwards et Anderson des états ayants la plus grande énergie libre, appelés états de seuil, et le théorème de fluctuation-dissipation est vérifié. Par contre, pour des intervalles de temps  $\tau \sim t_w$ <sup>1</sup> la corrélation évolue et relaxe vers zéro quand  $\tau \gg t_w$ , voir fig. 5.2 [11]. Par conséquent le système évolue plus lentement plus le temps augmente. On dit alors que

---

<sup>1</sup>Plus généralement on peut avoir aussi  $\tau \sim \mathcal{T}_w$ , où  $\mathcal{T}_w$  est une fonction croissante de  $t_w$ .

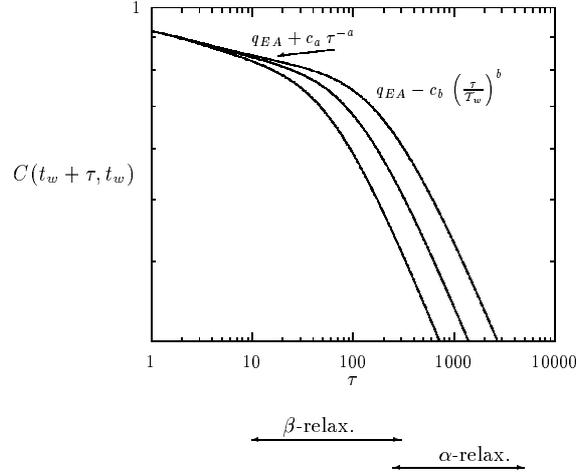


FIG. 5.2 – Allure typique de la fonction de corrélation, à basse température, pour des verres de spins discontinus, comme fonction de  $\tau$  (en échelle logarithmique) tracée pour différentes valeurs de  $t_w$ . Quand  $\tau \sim O(1)$  il y a une première relaxation vers un plateau, qui correspond à la valeur du paramètre d’Edwards et Anderson des états de seuil. Quand  $\tau \sim \mathcal{T}_w$  (où  $\mathcal{T}_w$  est une fonction croissante de  $t_w$ , qui dépend du modèle) il y a une deuxième relaxation vers zéro. Dans ce régime on dit que le système vieillit.

le système vieillit. Dans ce régime, l’invariance par rapport aux translations dans le temps et le théorème fluctuation-dissipation sont “violés”. C’est plutôt une généralisation de ce théorème qui est vérifiée par la dynamique [25] :

$$\frac{x}{T} \partial_{t'} C(t, t') = R(t, t') \quad t > t' \quad (5.4)$$

où  $x$  est le paramètre de violation de FDT ( $T/x$  peut être interprétée comme une température effective [125]). Récemment, des simulations de dynamique moléculaire [126, 127, 128] ont montré que la dynamique d’un liquide surfondu consécutive à une trempe au dessous de  $T_{MCT}$  montre le même comportement dynamique : du vieillissement et, résultat plus spectaculaire, une généralisation de FDT du type décrit en (5.4).

Par ailleurs, il est intéressant de remarquer que le comportement dynamique à basse température est déterminé par les états de seuil, qui sont les états avec l’énergie libre la plus grande, tandis que le comportement thermodynamique est dominé par des états ayant une énergie libre plus basse. En particulier la densité d’énergie dynamique asymptotique est toujours plus grande que celle d’équilibre pour  $T < T_d$ . Cet effet, qui n’est pas attendu pour un système réel, est probablement dû au fait que des barrières, qui sont finies en dimension finie, divergent avec  $N$  en champ moyen. On pense alors que pour un système réel cet effet ne sera pas présent à cause de “processus activés”, qui vont restaurer l’ergodicité (comme pour la théorie MCT).

Enfin, récemment, un verre de spins discontinu a été analysé par des simulations afin de

mieux comprendre les effets de taille finie [129]. Puisque le nombre de spins est fini on a accès au régime de temps dans lequel les processus activés deviennent pertinentes. Les résultats obtenus sont tout à fait similaires à ceux trouvés par les simulations de dynamique moléculaire sur des verres fragiles.

Pour aider le lecteur j'ai écrit ci-dessous une table de correspondance entre verres de spins discontinus et verres fragiles.

Table des analogies	
Verre fragile	Verre de spins discontinu
liquide	état paramagnétique
structure inhérente	état pur
états vitreux idéaux	états purs avec l'énergie libre la plus petite
entropie configurationnelle $s_c$	complexité $\sigma$
$T_c : s_c = 0$	$T_s : \sigma = 0$
$T_{MCT}$	$T_d$
processus activés (sauts entre bassins)	processus activés (sauts entre états)

## 5.2 La phase vitreuse et l'image à plusieurs bassins

Dans cette section on introduira le concept de structure inhérente (IS) et d'état TAP ou d'état pur (PS)<sup>2</sup>. Dans ce contexte nous montrerons plus en détails la description de la transition vitreuse en terme de crise d'entropie et la réalisation microscopique de cette idée par les verres de spins discontinus. Nous terminerons en rappelant brièvement les travaux récents qui ont été effectués pour aller au-delà de cette simple analogie.

### 5.2.1 Les structures inhérentes et l'entropie configurationnelle

Un concept, qui s'est révélé être utile pour interpréter les résultats des simulations numériques, est celui de structures inhérentes. Dans la suite nous rappellerons comment on définit l'entropie configurationnelle à partir de la notion de structure inhérente et quel

---

<sup>2</sup>En effet pour les systèmes de champ moyen les minima de l'énergie libre sont interprétés comme des états purs.

est le mécanisme mathématique qui induit la transition (thermodynamique) vitreuse. L'idée principale, introduite par Stillinger et Weber [130], est de considérer tous les minima de l'énergie potentielle et de décomposer l'espace des configurations en bassins obtenus par descente de gradient. A chaque minimum  $\alpha$  correspond donc un bassin  $\Omega_\alpha$ , appelé structure inhérente (en général on appelle énergie de la structure inhérente l'énergie du minimum correspondant). On peut ensuite décomposer la fonction de partition en une somme de fonctions de partitions restreintes aux bassins <sup>3</sup> :

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \int_{\Omega_{\alpha}} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N e^{-\beta(E-E_{\alpha})} \quad (5.5)$$

où  $E_{\alpha}$  est la valeur de l'énergie dans le minimum  $\alpha$ . Puisque le nombre de bassins est exponentiellement grand en  $N$ , on peut réécrire (5.5) comme :

$$\begin{aligned} Z &= \int de \mathcal{N}(e) \exp(-\beta N e - \beta N f(\beta, e)) \\ &= \int de \exp N (s_c(e) - \beta e - \beta f(\beta, e)) \end{aligned} \quad (5.6)$$

où  $\mathcal{N}(e)$  est le nombre de structures inhérentes avec densité d'énergie  $e$ ,  $s_c(e)$  est le logarithme de ce nombre divisé par  $N$  et  $e^{-\beta N f(\beta, e)}$  est la moyenne de l'intégrale en (5.5) sur les structures inhérentes avec densité d'énergie  $e$ .  $f(\beta, e)$  est interprétée comme l'énergie libre à l'intérieur d'une structure inhérente et  $s_c(e)$  est appelé entropie configurationnelle. L'entropie du système est donc la somme de  $s_c(e)$  et de l'entropie à l'intérieur des structure inhérentes.

L'intégrale (5.6) peut être calculée par la méthode du col. L'énergie  $e$  qui correspond à la contribution dominante correspond à l'énergie pour laquelle la pente de  $-\beta e - \beta f(\beta, e)$  est égale à celle de  $s_c(e)$  (qui est supposée être une fonction convexe de  $e$ ), voir fig. (5.3). En faisant l'hypothèse que  $f(\beta, e)$  dépend faiblement de  $e$  au moins près de la transition vitreuse, ce qui semble être confirmé par les simulations de dynamique moléculaire [131], on trouve que la pente de  $-\beta e - \beta f(\beta, e)$  croît lorsque  $T$  diminue. Par conséquent la densité d'énergie  $e^*$ , correspondante à la contribution dominante dans (5.6), et l'entropie configurationnelle  $s_c(e^*)$  diminuent avec la température. Dans ce scénario, la transition thermodynamique survient quand  $e^*$  atteint son valeur minimum et l'entropie configurationnelle s'annule (crise d'entropie). A ce moment la contribution donnée par  $s_c(e)$  à l'entropie totale disparaît et ceci provoque une chute de la chaleur spécifique.

Le formalisme des structures inhérentes est surtout utilisé pour interpréter les simulations numériques de dynamique moléculaire [118]. En particulier les simulations prédisent que pour  $T > T_{MCT}$  le système a une énergie suffisante pour se déplacer d'une structure inhérente à l'autre (l'énergie thermique étant bien plus grande que les barrières entre structures inhérentes). Par contre, pour  $T < T_{MCT}$  le système reste pour la majorité du temps

---

<sup>3</sup>Stillinger et Weber proposèrent, en réalité, d'écrire une fonction de partition restreinte seulement aux configurations, qui ne contiennent pas une fraction finie de germes cristallines. Nous négligerons ce détail technique qui n'affecte pas ce qui suit.

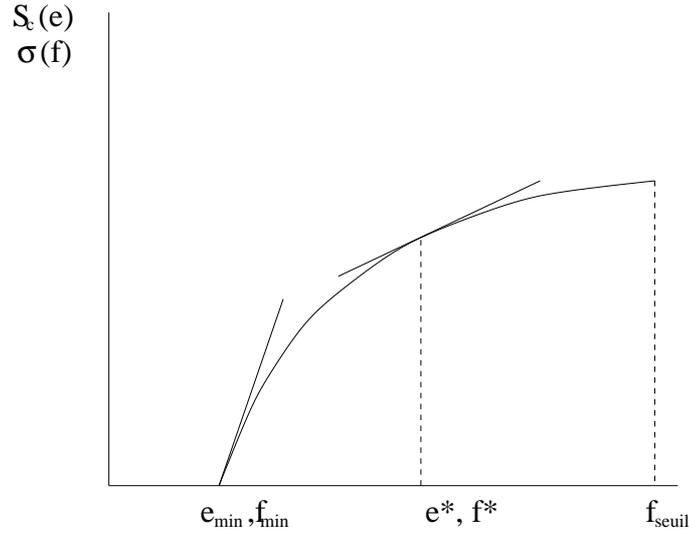


FIG. 5.3 – Allure qualitative de l’entropie et de la complexité en fonction respectivement de l’énergie des structures inhérentes et de l’énergie libre des états TAP. La transition, dans le scénario des structures inhérentes et dans les verres de spins discontinus, est due à l’annulation respectivement de l’entropie configurationnelle et de la complexité. La complexité devient  $-\infty$  pour  $f > f_{seuil}$  (il n’y a plus d’états). Par contre, pour l’entropie configurationnelle, on ne s’attend pas à un comportement à seuil de ce type.

dans une structure inhérente et de temps en temps saute dans une structure inhérente voisine. Dans ce contexte donc l’image physique qu’on avait exposée précédemment devient plus précise. Même si le scénario est assez tentant, il faut dire que l’équivalence bassin-structure inhérente semble donner une image de l’espace des configurations un peu trop simpliste. Ceci est peut être due au fait que les simulations correspondent à une régime de temps très courts ( $10^{-8}s$ ), par conséquent cette équivalence est probablement valide seulement sur des échelles de temps très faibles.

### 5.2.2 Les états TAP et la complexité

Comme on a souligné dans les section précédentes les analogies entre la thermodynamique des verres fragiles et des verres de spins discontinus est manifeste si l’on raisonne en terme de paysage d’énergie libre. Il est donc important de préciser mieux ce concept. Le paysage d’énergie libre intervient dans l’approche de Thouless, Anderson et Palmer [132] (TAP), qui est une façon alternative et complémentaire à la méthode des répliques de résoudre la thermodynamique des systèmes désordonnés en champ moyen. En généralisant ce qu’on fait pour le modèle d’Ising complètement connecté, on définit l’énergie libre TAP (pour un modèle de spins) de la façon suivante :

$$-\beta F(m_i; \beta) = \ln \text{Tr} \exp \left( -\beta H + \beta \sum_{i=1}^N h_i (s_i - m_i) \right) \quad (5.7)$$

où  $\text{Tr}$  indique la somme sur tous les degrés de liberté du système et les  $h_i$  sont des champs fixés de façon à ce que  $\langle s_i \rangle = m_i$ . L'énergie libre TAP est donc une fonction des aimantations locales et de la température, dépendant de l'échantillon (on n'a pas moyenné sur le désordre), qui peut être calculée explicitement pour les systèmes en champ moyen. Cette fonction peut avoir, surtout à basse température, une forme très irrégulière avec beaucoup de minima et de cols. Dans la suite nous considérerons un champ magnétique externe nul. Dans ce cas les minima locaux de  $F$  ont une importance particulière puisqu'ils représentent toutes les valeurs possibles des aimantations. En effet, les  $m_i$  vérifient les équations suivantes :

$$\frac{\partial F}{\partial m_i} = 0 \quad , \forall i \quad (5.8)$$

qui sont la généralisation de l'équation  $m = \tanh \beta m$  du modèle d'Ising complètement connecté. Ces équations peuvent avoir plusieurs solutions  $m_i^\alpha$  à basse température et chaque solution stable (qui est un minimum local de  $F$ ) est interprétée comme un état pur. Les résultats thermodynamiques, calculés grâce aux répliques ou à la méthode de cavité, peuvent être retrouvés en sommant sur tous les états avec le poids de Boltzmann [133, 134] :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( \sum_{\alpha} e^{-\beta N f_{\alpha}} \right) \quad (5.9)$$

où  $N f_{\alpha} = F(m_i^{\alpha}, \beta)$  est l'énergie libre de l'état  $\alpha$ . A très basse température l'énergie libre TAP peut avoir un nombre de minima exponentiellement grand en  $N$ . Par conséquent on réécrit (5.9) de la façon suivante :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \max_f (-\beta f + \sigma(f)) \quad (5.10)$$

où  $\sigma(f) = (\ln \mathcal{N}(f))/N$  est le logarithme, divisé par  $N$ , du nombre d'états avec densité d'énergie libre égale à  $f$ .  $\sigma(f)$  est appelée complexité. Pour les verres de spins discontinus, à très haute température  $\frac{1}{N} \ln Z = f_{para}$ , i.e. le système est dans l'état paramagnétique. Par contre dans le régime de température  $T_s < T < T_d$  le système semble être, d'un point de vue thermodynamique, encore dans l'état paramagnétique (il n'y a pas de singularité à  $T_d$ , le paramètre d'Edwards et Anderson est nul et  $\frac{1}{N} \ln Z = f_{para}$ ) ; mais en réalité une analyse dynamique [122] a montré que l'état paramagnétique est fracturé dans un nombre exponentiel d'états vitreux. Dans ce régime de température les états qui dominent la somme (5.9), dont la réunion est l'état paramagnétique, ont une densité d'énergie libre telle que la pente de  $-\beta f$  est égale à celle de  $\sigma(f)$ , voire fig. 5.3. Dans ce régime des états qui n'ont pas l'énergie libre la plus petite peuvent dominer la fonction de partition parce qu'ils sont très nombreux. La transition thermodynamique survient quand  $f^*$  atteint sa valeur minimale  $f_{min}$ , correspondant à une complexité nulle. La transition peut être donc vue comme une crise d'entropie. En effet l'entropie globale du système est formée de deux contributions : l'entropie à l'intérieur d'un état et la complexité. A la transition thermodynamique une

partie de l'entropie disparaît et donc la chaleur spécifique a une chute. De plus, le paramètre d'Edwards et Anderson a un saut discontinu vers la valeur correspondant aux états avec l'énergie libre la plus petite.

Comme on a déjà souligné précédemment on trouve donc des analogies très fortes, qui sont résumé dans la table précédente, entre la description de la transition thermodynamique des verres fragiles et des verres de spins discontinus.

### 5.2.3 Au-delà des analogies

Nous avons vu dans les sections précédentes que les verres de spins discontinus fournissent une réalisation microscopique du scénario proposé pour la transition vitreuse en terme de crise entropique et de paysage d'énergie libre avec plusieurs bassins. Cependant, il n'est pas très clair que le modèle avec le hamiltonien (5.2) donne une description de champ moyen de la transition vitreuse. En particulier, le modèle (5.2) contient du désordre gelé, par contre dans les verres le désordre est auto-induit à travers la dynamique. Une remarque importante concernant ce point est qu'ont été découverts et analysés des modèles avec toutes les caractéristiques des verres de spins discontinus mais sans désordre gelé [135, 136, 137].

Récemment, il y a eu beaucoup d'études pour chercher d'aller au-delà des analogies [101, 138, 139] et bâtir une théorie statistique de la transition vitreuse. En particulier, Mézard et Parisi [101, 138], en supposant qu'une transition existe et est du type décrit dans la section précédente, ont appliqué aux systèmes vitreux fragiles les techniques développées dans le contexte des verres de spins et ont obtenu des prédictions sur la température de transition, la chaleur spécifique, l'entropie configurationnelle, ... Leurs résultats sont en bon accords avec les simulations de dynamique moléculaire effectuées sur les mêmes systèmes. Ceci montre bien que l'analogie n'était pas fortuite, et que probablement il existe un lien profond entre la transition vitreuse et la physique découverte en analysant les verres de spins discontinus.

Cependant, pour aller vraiment au-delà des analogies, un certain nombre de difficultés conceptuelles doivent être résolues. Le but des sections suivantes est de dévoiler quelle sont ces difficultés et de clarifier certains concepts, comme celui de limite de température nulle d'un état pur, qui ont un intérêt général dans la théorie des verres de spins.

Ceci a donné lieu à la publication 3.

## 5.3 Différences entre états purs et structures inhérentes

### 5.3.1 L'entropie configurationnelle et la complexité

Pour étudier le lien entre structures inhérentes et états purs, nous nous sommes concentrés sur des systèmes de spins. Mais les résultats sont généralisables à des systèmes avec des variables continues, comme par exemple un système de particules.

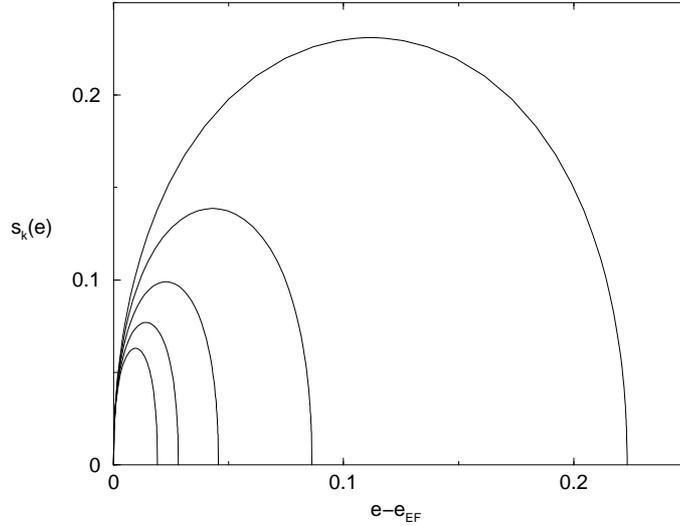


FIG. 5.4 – Logarithme du nombre de configurations  $k$ -stables ayant une densité d'énergie  $e$ .  $e_{EF}$  est la densité d'énergie de l'état fondamental. Les courbes sont tracées en prenant une loi de distribution gaussienne des variables  $J_i$  (avec variance unitaire et moyenne nulle) et correspondent (de gauche à droite) à  $k = 1, 2, 3, 4, 5$ .

D'abord nous avons étudié en détail les structures inhérentes dans un système particulièrement simple : le modèle d'Edwards et Anderson à une dimension caractérisé par le hamiltonien suivant :

$$H = \sum_{i=1}^N J_i S_i S_{i+1} \quad (5.11)$$

où  $S_i$  sont des spin d'Ising et  $J_i$  des variables aléatoires indépendantes distribuées avec une loi  $P(J)$  paire et régulière (elle ne contient pas de pics de Dirac). Ce modèle n'a aucune transition de phase à température finie [45] : l'état paramagnétique est toujours stable. Si pour ce système on considère une dynamique de Glauber, les structures inhérentes sont les bassins obtenus par descente du gradient discret. Les configurations ( $\mathcal{C}_1$ ) stables sous le renversement d'un spin (telles que, si l'on tourne un spin quelconque, l'énergie augmente) jouent le même rôle que les minima dans les systèmes continus. Ces configurations sont souvent appelées configurations métastables [51]. Dans la suite nous nous intéresserons aussi aux configurations  $\mathcal{C}_k$ , qu'on appellera  $k$ -stables, c'est à dire telles que, en tournant n'importe quel groupe de (au maximum)  $k$  spins, l'énergie augmente.

Le nombre  $\mathcal{N}_k(e)$  de configurations  $\mathcal{C}_k$  ayant une densité d'énergie  $e$ , ou plus précisément le logarithme  $s_k(e)$  de ce nombre divisé par  $N$ , peut être obtenu assez facilement pour le modèle (5.11). Moore et Ettelaie [48] effectuèrent le calcul pour  $k = 1$ , nous généralisons leur approche pour une valeur de  $k$  quelconque. L'observation fondamentale qui permet d'effectuer le calcul est [140] qu'une condition nécessaire et suffisante pour qu'une configuration soit  $k$ -stable est que chaque lien frustré soit  $k$ -faible, c'est-à-dire soit plus petit en

module des  $k$  premiers liens à sa droite et les  $k$  premier lien à sa gauche.

La valeur typique de  $s_k(e)$  est alors égale à :

$$s_k(e) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( \sum_{\{\tau_\ell=0,1\}} \delta \left( e - e_{EF} - \frac{2}{N} \sum_{\ell=1}^{N_k} |J_\ell| \tau_\ell \right) \right) , \quad (5.12)$$

où  $N_k$  est le nombre de liens  $k$ -faibles dans la chaîne,  $N e_{EF}$  est l'énergie de l'état fondamental et  $\tau_\ell$  est égal à 1 si le lien  $\ell$  est frustré et zéro autrement. En exponentiant le delta en (5.12) et en sommant sur  $\tau_\ell$  on se ramène à une intégrale qui peut être effectuée par la méthode du col, ce qui permet de calculer aisément  $s_k(e)$  lorsque  $N \rightarrow \infty$ . En fig. 5.4 nous avons tracé les courbes  $s_k(e)$  correspondantes à des couplages  $J_i$  ayant une distribution gaussienne. De façon générale on peut montrer que pour une valeur de  $k$  fixée,  $s_k(e)$  est symétrique autour de son maximum qui vaut  $\ln 2 / (2k + 1)$ . La valeur du maximum est reliée au nombre total de configurations  $\mathcal{C}_k$  et est indépendante de la distribution particulière que l'on choisit pour les couplages [140]. Le comportement de  $s_k(e)$  quand  $\epsilon = e - e_{EF} \rightarrow 0$  est du type  $-\epsilon \ln \epsilon$  si le support de  $P(J)$  ne contient pas l'origine et du type  $\epsilon^{(\alpha+1)/(\alpha+2)}$  si  $P(J) \sim J^\alpha$  quand  $J \sim 0$  (avec  $\alpha > -2$  pour avoir  $e_{EF}$  finie).

Le modèle que nous avons considéré est donc un exemple clair de système avec beaucoup de structures inhérentes (un nombre exponentiel en  $N$ ) et un seul état pur, l'état paramagnétique. En particulier la limite de température zéro de la complexité est clairement différente de  $s_1(e)$ . Ce qui semble plutôt être correct est que  $\lim_{k \rightarrow \infty} s_k(e) = \lim_{T \rightarrow 0} \sigma(e)$  ( $= 0$  dans notre cas).

Avant de terminer cette section nous remarquons que certaines caractéristiques de  $s_k(e)$  que nous avons trouvé pour le modèle (5.11) sont toute à fait générales et peuvent être retrouvées dans n'importe quel modèle en dimension finie :

1. le fait que l'entropie configurationnelle a une pente infinie pour  $\epsilon \sim 0$  est un résultat général qu'on peut prouver par des arguments heuristiques [141, 142].
2. le comportement d'échelle du bord de droit de  $s_k(e)$  peut être obtenu de la façon suivante : en tournant un amas de  $k$  spins dans une configuration qui a une densité d'énergie  $e$  on peut gagner une énergie de l'ordre de  $-k(e - e_{EF})$  et on perd dans le meilleur des cas une énergie de surface  $E_s(k) < O(k^{d-1/d})$ . Par conséquent une configuration qui a une densité d'énergie  $e$  ne sera pas  $k$ -stable si  $k(e - e_{EF}) > E_s(k)$ , ce qui implique que le bord droit de  $s_k(e)$  sera en général plus petit que  $e_{EF} + E_s(k)/k < e_{EF} + k^{-1/d}$ . En particulier la limite pour  $k \rightarrow \infty$  de  $s_k(e)$  sera toujours concentrée en  $e = e_{EF}$  et donc  $s_\infty(e \neq e_{EF}) = -\infty$ .

### 5.3.2 États purs à température nulle et configurations infiniment stables

Dans la section précédente nous avons montré que pour le modèle d'Edwards et Anderson à une dimension les structures inhérentes ne coïncident pas avec la limite de

température nulle des états purs. Par contre les configurations stables sous le retournement d'un nombre quelconque, mais fini par rapport à  $N$ , de spins semblent être reliées à la limite de température nulle des états purs [49, 50, 51]. Pour étudier plus en détails ce point, nous avons analysé la limite de température nulle des solutions des équations TAP pour des systèmes à connectivité finie. D'abord, il est intéressant de voir comment on trouve les équations TAP pour un système de spins défini sur un réseau qui n'a pas de boucles de longueur finie [143]. Nous nous concentrerons par simplicité de présentation sur le cas correspondant à un champ externe nul. On considère un site 0, qui a  $m$  voisins. En sommant, dans la fonction de partition, sur tous les spins sauf  $S_0$  et ses voisins  $S_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ), on obtient un hamiltonien effectif qui contient les termes d'interactions  $J_{0,j}S_0S_j$  plus des champs effectifs  $h_j$  sur chaque voisin de  $S_0$ . L'absence de boucles de longueur finie est essentiel pour que le hamiltonien effectif n'ait pas de termes du type  $S_iS_j$  (ou plus générales, par exemple à quatre spins). En effet, deux voisins de 0 sont reliés par le chemin de longueur deux qui passe par 0, et donc il ne peuvent pas être reliés par un autre chemin de longueur finie. Par conséquent les couplages entre les  $S_j$  engendrés en faisant la somme sur tous les spins, sauf  $S_0$  et ses voisins, devraient être nuls. Il est facile d'écrire les équations vérifiées par  $m_0$  en fonction de  $J_{0,j}$  et  $h_j$  :

$$m_0 = \tanh \left[ \sum_{j=1}^m \tanh^{-1}(\tanh(\beta h_j) \tanh(\beta J_{0,j})) \right]. \quad (5.13)$$

Ensuite, si l'on considère un système de deux spins  $S_0, S_i$ , qui interagissent à travers un couplage  $J_{0,i}$  et qui sont soumis à des champs  $h_0, h_i$ , les aimantations  $m_0$  et  $m_i$  satisfont les équations :

$$m_0 = \frac{\tanh(\beta h_0) + \tanh(\beta J_{0,i}) \tanh(\beta h_i)}{1 + \tanh(\beta h_i) \tanh(\beta J_{0,i}) \tanh(\beta h_0)} \quad (5.14)$$

$$m_i = \frac{\tanh(\beta h_i) + \tanh(\beta J_{0,i}) \tanh(\beta h_0)}{1 + \tanh(\beta h_i) \tanh(\beta J_{0,i}) \tanh(\beta h_0)} \quad (5.15)$$

En inversant ces équations, on trouve  $h_i$  comme fonction de  $m_i$  et  $m_0$ , et à partir de (5.13) on obtient des équations fermées sur les aimantations, ces équations sont les équations TAP. Si l'on prend la limite de connectivité infinie dans ces équations (chaque spin interagit avec  $c \gg 1$  voisins) et un comportement d'échelle approprié des couplages ( $J_{0,i} \sim 1/\sqrt{c}$ ) on retrouve les équations TAP du modèle SK.

Nous montrons maintenant que la limite de température nulle des solutions de ces équations est stable sous le renversement d'un nombre quelconque (mais fini par rapport à  $N$ ) de spins. Pour cela il est suffisant de montrer la stabilité par rapport au retournement d'un amas connexe formé d'un nombre fini  $k$  quelconque de spins. Ceci peut être effectué en observant que par construction les équations TAP pour les aimantations des spins qui appartiennent à un amas connexe sont les mêmes que celles qui seraient vérifiées si l'amas était isolé du reste et il y avait des champs  $h_i$  agissant sur les spins au bord de l'amas. Par conséquent, si l'amas contient un nombre fini  $k$  de spins, la limite de température nulle des aimantations

est égale à la configuration des  $k$  spins qui réalise le minimum global du système isolé des  $k$  spins. Donc, s'il y a plusieurs solutions, alors il y a plusieurs valeurs possibles de  $h_j$ , mais pour chaque solution (chaque ensemble des valeurs des champs au bord) les aimantations convergent vers la configuration qui réalise le minimum global de l'énergie du système de  $k$  spins. La valeur de  $k$  peut être arbitrairement grande, une fois qu'on a pris la limite thermodynamique. Ainsi, les solutions TAP convergent à température nulle vers les configurations stables sous renversement d'un nombre quelconque (mais fini par rapport à  $N$ ) de spins.

Comme on avait souligné dans la section 2.4 pour les modèles complètement connectés on trouve  $s_1 = \lim_{T \rightarrow 0} \sigma$  et plus généralement  $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_2 = \dots \mathcal{C}_\infty$  (et donc que les structures inhérentes sont égales à la limite de température zéro des états purs pour les modèles complètement connectés). Cette coïncidence est une "pathologie" de ces modèles due au fait que les couplages s'annulent dans la limite thermodynamique.

Enfin, pour vérifier dans un cas avec une complexité non nulle, que  $\lim_{k \rightarrow \infty} s_k = \lim_{T \rightarrow 0} \sigma$  nous avons considéré le modèle dont le hamiltonien est la somme de deux termes : le premier qui est le même que (5.11) et le deuxième qui est le hamiltonien du modèle SK. On a pris comme loi de distribution des couplages unidimensionnel  $P(J) = (1 - \alpha)\delta(J) + \alpha p(J)$ , où  $p(J)$  est une distribution paire, et nous avons calculé en perturbation en  $\alpha$  les valeurs recuites <sup>4</sup> de  $s_k$  et  $\sigma$ , où  $\sigma$  a été calculée par deux méthodes différentes (qui ont donné lieu au même résultat) : en faisant la somme sur toutes les solutions des équations TAP et en utilisant la brisure à deux groupes à la Bray et Moore (voire chapitre 7). Comme nous nous y attendions, nous avons obtenu (en perturbations en puissance de  $\alpha$ ) que  $s_1 > s_2 > \dots \lim_{T \rightarrow 0} \sigma = \lim_{k \rightarrow \infty} s_k > 0$ .

## 5.4 Discussion

Dans les sections précédentes nous avons montré que pour des systèmes de spins en dimension finie les structures inhérentes (minima de l'énergie) et les états purs (minima de l'énergie libre) sont des concepts distincts : un état pur contient un général beaucoup de structures inhérentes. Nos résultats se généralisent à un système continu, i.e. un système de particules. Dans ce cas les structures inhérentes sont associés au minima locaux de l'énergie et deux structures inhérentes qui diffèrent par le déplacement d'un nombre fini de particules doivent appartenir au même état pur. Donc, en généralisant ce qu'on a fait pour les modèles de spin, on peut définir comme  $k$ -stables les minima de l'énergie telle que, en déplaçant sur une distance finie un nombre  $k$  de particules, on ne peut pas diminuer l'énergie. Dans la limite de température nulle les états purs sont reliées aux minima qui sont  $\infty$ -stable (la limite  $k \rightarrow \infty$  doit être prise après la limite thermodynamique).

Même après avoir précisé les deux concepts clefs dans l'analogie entre verres des spins discontinus et verre fragiles, et même si l'image physique en terme de crise entropique et paysage avec beaucoup de bassins semble être très prometteuse, on est quand même

---

<sup>4</sup>Ceci veut dire que à la place de calculer la moyenne du logarithme nous avons calculé le logarithme de la moyenne.

confronté à une difficulté essentielle quand on cherche à rendre cette analogie cohérente :

- Les structures inhérentes sont une image trop simpliste des “bassins”. En particulier deux structures inhérentes qui diffèrent par le déplacement d’un nombre fini de particules sont considérées comme deux bassins différents ; ce qui induit une pente infinie à l’origine pour l’entropie configurationnelle [141, 142]. Ceci n’est clairement pas cohérent avec le scénario proposé de crise entropique puisque l’on obtiendrait une température de transition vitreuse nulle.
- Les états purs sont une bonne image des “bassins” seulement pour des systèmes où ces bassins ont un temps de vie infini. Ce qui est le cas pour les systèmes complètement connectés, mais pas pour les systèmes en dimension finie. En particulier on peut prouver que la limite de température nulle de la complexité est égale à  $-\infty$  partout sauf à  $e = e_{EF}$ . De plus, en utilisant des arguments heuristiques de nucléation [144] on peut aussi montrer que ceci reste vrai à température finie (la complexité est égale à  $-\infty$  partout sauf pour les états ayant une énergie libre égale à celle d’équilibre). Par conséquent l’image de la transition donnée dans la section (5.2) ne peut pas s’appliquer si l’on utilise la complexité.

La difficulté essentielle qui se présente est celle de donner une définition “temporelle” aux états. En effet, d’une part on voudrait avoir une image du type thermodynamique de la transition vitreuse comme celle exposée dans la section (5.2), d’autre part cette description fait intervenir un concept de “bassin” qui est clairement dépendant de l’échelle de temps que nous utilisons pour observer le système : sur des temps très courts le système est confiné dans des bassins qui coïncident avec les petites oscillations autour des minima de l’énergie potentielle (les structures inhérentes), sur un temps infini le système est confiné dans des états purs. Mais sur les temps pertinents pour la transition vitreuse comment définir le concept de “bassins” ? Dans le chapitre 7 nous tenterons de donner une réponse à cette question.

Enfin, avant de terminer cette section il est important de commenter pourquoi les résultats de Mézard et Parisi [101, 138], qui sont allés au-delà des analogies et ont obtenu des prédictions pour les verres fragiles en dimension finie, sont en accords avec les résultats des simulations numériques. Cet accord est à première vue étonnante, puisque d’une part ils ont appliqué la théorie développée dans le contexte des verres de spins de champ moyen pour calculer la complexité, qui devrait être nulle en dimension finie, et trouvent une courbe, qui est non nulle, et qui est en bon accord avec l’entropie configurationnelle calculée par les simulations de dynamique moléculaire. En outre cette courbe ne peut pas vraiment coïncider avec l’entropie configurationnelle puisque la température de transition est positive, tandis que en utilisant l’entropie configurationnelle on trouverait une transition à température nulle. Le point subtil, qui a été dévoilé en [142], est que leur calcul repose sur une approximation valable à basse température (ou sur des temps courts). Par conséquent, à travers l’approximation une échelle de temps (courte) a été introduite dans le problème, en considérant comme infiniment stables tous les états métastables avec un temps de vie

plus grande que cette échelle de temps.

## **5.5 Conclusion**

En résumé, par l'étude d'exemples simples nous avons analysé les différences entre les concepts de structure inhérente et d'état pur. Ceci nous a permis de montrer que la difficulté essentielle, pour rendre cohérente une théorie de la transition vitreuse basée sur l'analogie avec les verres de spins discontinus, est relié à la définition "temporelle" d'état. De plus, nous avons montré que le lien entre les solutions TAP et les états purs continue d'être valable aussi pour des systèmes à connectivité finie (au moins à température nulle), en dévoilant que les solutions TAP à température nulle coïncident avec les configurations stables sous le renversement d'un nombre quelconque de spins (mais fini par rapport au volume).



# Chapitre 6

## Le paysage de l'énergie libre et la dynamique à grands temps

### 6.1 Introduction

Dans ce chapitre nous analyserons le lien entre le comportement dynamique à grands temps et le paysage de l'énergie libre dans des cas simples . La forme de ce paysage, qui est sans doute très importante pour la thermodynamique, est de plus en plus utilisée [145] pour expliquer et interpréter le comportement dynamique. Cependant, même s'il semble naturel qu'un lien existe dans le cas d'une dynamique d'équilibre, il n'est pas clair que le paysage d'énergie libre puisse être pertinent pour la dynamique hors équilibre.

Un cas simple, où ce paysage joue un rôle particulièrement important, est celui des verres de spins discontinus en champ moyen. Nous avons montré dans le chapitre précédent comment, par l'approche TAP, on peut analyser complètement leur comportement thermodynamique en terme de paysage d'énergie libre. Par ailleurs, à basse température ces systèmes n'atteignent jamais l'équilibre : leur dynamique à grands temps montre une "violation" du théorème fluctuation dissipation et des effets de vieillissement. Ce qui est frappant est que même si ces systèmes restent toujours hors équilibre, la dynamique à grands temps semblent être reliée à des minima de l'énergie libre qui sont marginalement stables et n'ont rien à voir avec les états TAP qui donnent la contribution dominante à la fonction de partition (cf. eq (5.9)). Ce lien qui a été trouvé implicitement dans l'analyse de Cugliandolo et Kurchan [25] à été utilisé pour donner une interprétation du vieillissement comme une *évolution dans les directions plates du paysage d'énergie libre* [11].

Dans ce chapitre, d'abord, nous montrerons que pour des modèles de champ moyen particulièrement simples les temps caractéristiques les plus longs intervenant dans une dynamique de Glauber sont reliés aux valeurs propres du hessien de l'énergie libre autour de ses points de stationnarité.

Ensuite, nous généraliserons l'approche de Thouless, Anderson et Palmer (TAP) à la dynamique. Nous nous concentrerons sur le modèle à p-spins sphériques, qui (cf. chapitre précédent) fournit une image de champ moyen de la transition vitreuse, mais notre approche

est généralisable à des autres modèles de champ moyen. En particulier, nous écrirons et analyserons les équations dynamiques vérifiées par les aimantations locales pour un échantillon donné. Ceci nous permettra d'étudier en détail le lien entre le paysage d'énergie libre et la dynamique à grands temps, et en particulier de comprendre et de montrer explicitement la relation entre le vieillissement et la présence de directions plates [25, 146, 147]. Ces deux travaux ont donné lieu aux publications IV, V et au compte-rendu I.

## 6.2 Relation entre les échelles de temps les plus longues et l'énergie libre

Dans cette section nous nous intéressons aux temps de relaxation les plus longs intervenant dans la dynamique de Glauber [148] d'un modèle de spins d'Ising. Ces temps caractéristiques sont égaux aux inverses des valeurs propres les plus petites de l'opérateur d'évolution. Par conséquent, pour avoir accès à ces quantités il faut diagonaliser analytiquement ou numériquement la matrice de Glauber. Malheureusement jusqu'à maintenant les études numériques ont été effectuées sur des tailles très petites [149, 150] (la taille de la matrice de Glauber croît comme  $2^N$  pour un système de  $N$  spins) ; tandis que d'un point de vue analytique très peu d'études [151] ont été effectuées à cause des difficultés techniques qui surviennent dans la diagonalisation de la matrice de Glauber.

Dans la publication IV, en généralisant l'approche développée en [151] nous avons obtenu exactement les valeurs propres les plus petites de l'opérateur de Glauber pour le modèle de Hopfield avec un nombre de "patterns" fini [152, 153]. Il s'agit d'un système désordonné, intermédiaire entre le simple modèle de Mattis [154] et les modèle plus riche de Sherrington et Kirkpatrick [10], qui a reçu beaucoup d'attention dans le cadre des études sur les réseaux de neurones.

Dans la suite nous exposerons une approche plus générale que celle exposée dans la publication IV. En particulier, nous présenterons une méthode approchée pour calculer les valeurs propres les plus petites de l'opérateur de Glauber pour un système en dimension finie. Cette méthode devient exacte lorsque appliquée à des systèmes de champ moyen comme le modèle d'Hopfield. Par conséquent le calcul effectué dans la publication IV est un cas particulier de celui exposé dans la suite.

### 6.2.1 Analogie avec un problème quantique

D'abord, nous rappelons le principe de la dynamique à la Glauber pour un système de spins : étant donné une configuration  $\mathbf{S}$ , l'évolution stochastique consiste à choisir un spin au hasard et à le retourner avec un taux de probabilité  $w(\mathbf{S}, i) = \frac{1}{2}(1 - S_i \tanh[\beta h_i(\mathbf{S})])$ , où  $h_i = \sum_j J_{i,j} S_j$  est le champ instantané agissant sur le spin  $S_i$ . Par conséquent, la

distribution de probabilité  $P(\mathbf{S}, t)$  satisfait l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{S}, t) = \sum_{i=1}^N (w(\mathbf{S}^i, i) P(\mathbf{S}^i, t) - w(\mathbf{S}, i) P(\mathbf{S}, t)) \quad , \quad (6.1)$$

où la configuration  $\mathbf{S}^i$  est obtenue à partir de  $\mathbf{S}$  en retournant le spin  $S_i$ . Cette équation linéaire sur  $P(\mathbf{S}, t)$  peut être réécrite comme une équation de Schrödinger sur un système de spins quantiques 1/2. En fait, on peut associer à chaque configuration  $\mathbf{S}$  un ket  $|\mathbf{S}\rangle = |S_1\rangle \times \cdots \times |S_N\rangle$ , où :

$$|S_i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{si } S_i = 1 \quad , \quad |S_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{si } S_i = -1 \quad (6.2)$$

L'ensemble de ces vecteurs est une base orthonormée d'un espace  $\mathcal{V}$  à  $2^N$  dimensions. La distribution de probabilité peut être alors réécrite comme un vecteur de cet espace :  $|P(t)\rangle = \sum_{\mathbf{S}} P(\mathbf{S}, t) |\mathbf{S}\rangle$ . De plus, les matrices de Pauli  $\sigma_i^x$  and  $\sigma_i^z$  agissant sur les vecteurs (6.2) correspondent respectivement aux opérateurs de renversement de spin ( $\sigma_i^x |\mathbf{S}\rangle = |\mathbf{S}^i\rangle$ ) et d'aimantation locale ( $\sigma_i^z |\mathbf{S}\rangle = S_i |\mathbf{S}\rangle$ ). Grâce à ce formalisme on peut réécrire l'équation (6.1) dans la forme compacte suivante :

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = -W|P(t)\rangle \quad , \quad W = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x - 1)(1 - \sigma_i^z \tanh(\beta h_i)) \quad , \quad (6.3)$$

où les opérateur de champs locaux  $h_i$  sont égaux à  $\sum_j J_{i,j} \sigma_j^z$ . Puisque la dynamique de Glauber satisfait le bilan détaillé, on peut obtenir un opérateur hermitique  $W^s$  grâce à la transformation  $W^s = \exp(\beta H/2)W \exp(-\beta H/2)$  (où  $H$  est l'énergie du système) :

$$W^s = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} - \frac{\sigma_i^x}{2} (\cosh(\beta h_i))^{-1} - \frac{\sigma_i^z}{2} \tanh(\beta h_i) \right] \quad . \quad (6.4)$$

Dans la sous-section suivante nous analyserons le spectre de  $W^s$ , qui coïncide avec celui de  $W$ . Il est intéressant de remarquer que l'opérateur  $W^s$  peut être considéré comme le hamiltonien d'un système de spins quantiques 1/2.

### 6.2.2 L'approximation grand spin (large S)

Dans la suite, pour analyser les valeurs propres les plus petites de l'opérateur  $W^s$  nous utiliserons l'approximation large  $S$ , qui consiste à remplacer les opérateurs de spin 1/2 avec des opérateurs,  $\mathbf{J}$ , de spin  $S/2$  et à effectuer un développement en  $1/S$ . Cette approximation est souvent utilisée pour les systèmes quantiques [155]. Par exemple pour le modèle de Heisenberg elle donne lieu à la théorie des ondes de spins. Sa signification devient claire en utilisant le formalisme fonctionnelle. En effet, en réécrivant  $e^{-W^s t}$  en terme d'une intégrale fonctionnelle sur les spins [155] on constate que l'approximation large  $S$  coïncide avec une

approximation semi-classique. Pour  $S = \infty$  on obtient les résultats classiques et au premier ordre (non nul) en  $1/S$  on obtient les premières corrections quantiques, qui correspondent à remplacer l'action par son développement quadratique autour de la solution classique. De plus, cette approximation devient exacte pour des modèles de champ moyen, comme par exemple le modèle d'Hopfield (publication IV) ou pour le modèle d'Ising complètement connecté [151].

La première étape de cette méthode revient à généraliser l'opérateur  $W^s$  à une valeur quelconque de  $S$  :

$$W^s = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{S}{2} - J^x (\cosh(\beta h_i))^{-1} - J^z \tanh(\beta h_i) \right] \quad . \quad (6.5)$$

où  $h_i$  est égale à  $\sum_j 2J_{i,j} J^z$ . Ensuite, l'astuce qui permet d'effectuer le calcul des petites valeurs propres consiste à utiliser la représentation de l'opérateur moment cinétique en terme des bosons de Holstein-Primakoff [155] :

$$L_i^x = \frac{S}{2} - a_i^\dagger a_i \quad (6.6)$$

$$L_i^y = \frac{1}{2i} \left[ a_i^\dagger \sqrt{S - a_i^\dagger a_i} - \sqrt{S - a_i^\dagger a_i} a_i \right] \quad (6.7)$$

$$L_i^z = \frac{1}{2} \left[ a_i^\dagger \sqrt{S - a_i^\dagger a_i} + \sqrt{S - a_i^\dagger a_i} a_i \right] \quad , \quad (6.8)$$

où  $a_i, a_i^\dagger$  sont des opérateurs bosoniques et (6.6, 6.7, 6.8) est une représentation de l'opérateur cinétique  $S/2$  dans le sous-espace engendré par les vecteurs  $(a^\dagger)^n |0\rangle$  avec  $n = 0, \dots, S$  [155]. Le principe de l'approximation large  $S$  est de développer les racines en (6.7, 6.8) en puissance de  $a_i^\dagger a_i / S$ . Cette manipulation est correcte tant qu'on s'intéresse aux vecteurs propres dans un sous-espace caractérisé par un nombre de quanta beaucoup plus petit que  $S$ . Clairement si l'on injecte en  $W^s$  à la place de  $\mathbf{J}_i$  les opérateurs  $\mathbf{L}_i$  définis en (6.6, 6.7, 6.8) les vecteurs propres correspondants aux valeurs propres plus petites seront en général caractérisés par un nombre de quanta qui est du même ordre que  $S$ . Ce qu'il faut faire, pour pouvoir développer en  $1/S$ , est considérer une représentation des  $\mathbf{J}_i$  qui consiste à aligner les opérateurs  $\mathbf{L}_i$  dans les directions correspondantes aux sous-espaces associés aux valeurs propres les plus petites. Plus précisément, on considère la rotation suivante :

$$J_i^x = \sqrt{1 - m_i^2} L_i^x - m_i L_i^z \quad , \quad J_i^y = L_i^y \quad , \quad J_i^z = m_i L_i^x + \sqrt{1 - m_i^2} L_i^z \quad (6.9)$$

et on injecte cette représentation des  $\mathbf{J}_i$  dans  $W^s$ . En développant en  $1/S$  nous trouvons que  $W^s = SW_0^s + \sqrt{S}W_1^s + W_2^s + O(1/\sqrt{S})$ , et que  $W_0^s = W_1^s = 0$  si les  $m_i$  satisfont les équations suivantes :

$$m_i = \tanh \beta H_i \quad H_i = \sum_j J_{i,j} m_j \quad (6.10)$$

Ces équations sont l'équivalent, pour un système en dimension finie, de l'équation sur l'aimantation qu'on trouve dans le cas du modèle d'Ising complètement connecté. De plus, l'expression de  $W_2^s$  en terme des opérateurs bosoniques est :

$$W_2^s = \frac{1}{4} \sum_{i,j} \left[ (a_i + a_i^\dagger)(O^2 - 1)_{i,j}(a_j + a_j^\dagger) \right] + \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (6.11)$$

où  $O_{i,j}$  est la matrice  $N \times N$  symétrique suivante :

$$O_{i,j} = \delta_{i,j} - \frac{\beta J_{i,j}}{\cosh \beta H_i \cosh \beta H_j} \quad (6.12)$$

En effectuant la transformation orthogonale qui diagonalise  $\mathbf{O}$ , nous obtenons une expression de  $W_2^s$  en terme d'opérateurs bosoniques découplés :

$$W_2^s = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{4}(\lambda_j^2 - 1)(b_j + b_j^\dagger)^2 + b_j^\dagger b_j \right] \quad (6.13)$$

où  $\lambda_j$  sont les valeurs propres de  $\mathbf{O}$ . Enfin, grâce à une transformation de Bogoliubov :

$$\begin{pmatrix} c_j \\ c_j^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \phi_j & \sinh \phi_j \\ \sinh \phi_j & \cosh \phi_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_j \\ b_j^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

où  $\phi_j = \frac{1}{2} \ln |\lambda_j|$ , nous pouvons réécrire  $W_2^s$  comme une somme d'oscillateurs harmoniques indépendants :

$$W_2^s = \sum_{i=1}^N |\lambda_j| (c_j^\dagger c_j + \Delta_j) \quad (6.15)$$

où  $\Delta_j = 1$  si  $\lambda_j < 0$  et  $\Delta_j = 0$  si  $\lambda_j > 0$ .

Nous avons donc obtenu que, dans le cadre de l'approximation large  $S$ , les valeurs propres plus petites de l'opérateur de Glauber, associées aux temps de relaxation plus longs, coïncident avec les valeurs absolues des valeurs propres de la matrice  $O_{i,j}$ .

Il est intéressant de remarquer que les valeurs propres  $\lambda_i$  de  $O_{i,j}$  sont les mêmes que celles de la matrice  $H_{i,j} = \delta_{i,j} - \beta J_{i,j} / (\cosh \beta H_i)^2$  obtenue<sup>1</sup> en dérivant par rapport à  $m_j$  la fonction :  $m_i - \tanh(\beta H_i)$ . En effet dans le cas particulier du modèle d'Ising complètement connecté ou du modèle de Hopfield (avec un nombre de patterns fini) les équations  $m_i - \tanh(\beta H_i) = 0$  et la matrice  $H_{i,j}$  correspondent respectivement aux conditions de stationnarité et au hessien de l'énergie libre [151], publication IV. Dans ce cas, étant donnée une solution des équations (6.10), i.e. un point de stationnarité de l'énergie libre, chaque direction stable autour de ce point donne lieu, en (6.15), à un oscillateur harmonique ayant un état fondamental d'énergie nulle, tandis que chaque direction instable donne lieu à un oscillateur harmonique ayant un état fondamental d'énergie  $|\lambda_j|$ , où  $-|\lambda_j|$  est la valeur propre de  $H_{i,j}$  correspondante à cette direction.

---

<sup>1</sup>Ceci dérive du fait que la trace de  $\mathbf{O}^n$  est égale à la trace de  $\mathbf{H}^n$  quelque soit  $n$ .

### 6.2.3 Discussion

Comme nous avons déjà souligné, le calcul approché que nous avons présenté dans la section précédente devient exact pour certains modèles simples de champ moyen. Pour comprendre la raison de cela, il est utile de considérer le cas simple du modèle d'Ising complètement connecté [151]. L'analyse classique de ce système se simplifie parce que l'énergie peut se réécrire en terme de la variable globale  $\sum_i S_i$ . De la même façon l'opérateur de Glauber peut se réécrire en terme de l'opérateur moment cinétique globale  $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{J}_i$ . Ceci permet d'utiliser la méthode de large  $S$ , où maintenant  $S$  est égale à  $N$  et tend vraiment à l'infini dans le cas du modèle d'Ising. Pour cette raison pour le modèle d'Ising complètement connecté et ses généralisations, comme le modèle de Hopfield (avec un nombre de "patterns" fini), la méthode de large  $S$  permet d'obtenir le résultat exact (voir la publication IV pour plus de détails).

Il est intéressant de remarquer que pour ces modèles les paramètres d'ordre thermodynamiques satisfont des équations dynamiques déterministes de descente du gradient dans le paysage d'énergie libre [151, 153]. Par exemple, pour le modèle d'Ising complètement connecté l'aimantation vérifie l'équation dynamique :

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial m} = -m + \tanh \beta m \quad (6.16)$$

Quelque soit la condition initiale après un certain temps le système relaxe vers un point de stationnarité. A cause d'effets entropiques certains points ont des bassins d'attraction extrêmement larges. Par exemple, si l'on prend comme condition initiale une configuration au hasard, alors avec probabilité un, on aura  $m = 0$  comme condition initiale pour l'équation (6.16), et même si à basse température ce point est thermodynamiquement instable, l'équation (6.16) prédit que le système reste bloqué sur ce point. Ceci est dû au fait qu'on a pris d'abord la limite thermodynamique et donc on est en train de considérer des échelles de temps beaucoup plus petites que  $N$ . Dans ce régime de temps les fluctuations d'ordre  $1/\sqrt{N}$  autour de  $m = 0$  croissent de plus en plus, mais elles n'arrivent jamais à faire changer la valeur intensive de  $m$ . En dimension finie cette situation physique correspond à la dynamique de croissance des domaines [24].

Les temps caractéristiques, que nous avons trouvés, associés aux inverses des modules des valeurs propres du hessien de l'énergie libre dans ses points de stationnarité correspondent aux fluctuations autour des points de stationnarité. Les fluctuations dans les directions stables correspondent à des  $\lambda_i$  positifs et décroissent avec des temps caractéristiques  $1/\lambda_i$ . Tandis que les fluctuations dans les directions instables, associées à des  $\lambda_i$  négatifs, croissent avec des temps caractéristiques de "fuite"  $1/|\lambda_i|$ .

## 6.3 L'approche TAP dynamique

Comme nous avons souligné dans l'introduction, souvent on propose [145] une image de la dynamique lente en terme d'évolution dans le paysage d'énergie libre : dans la forme la plus simpliste, on pense à une descente du gradient combinée à des sauts de barrières avec

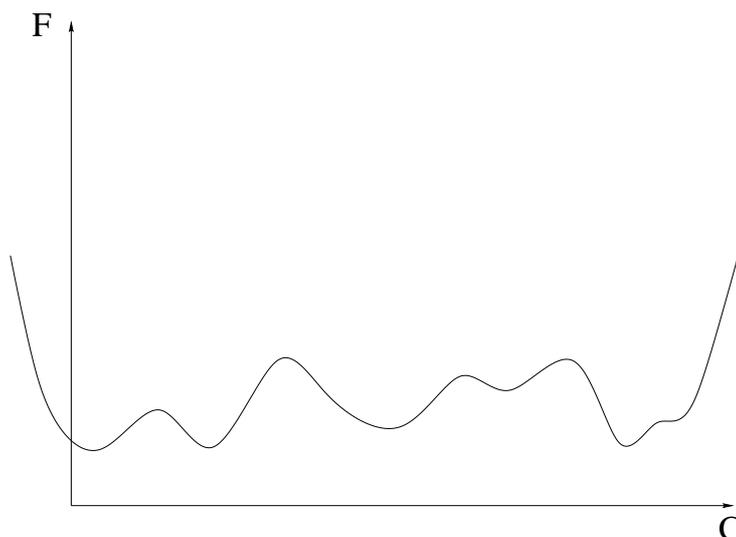


FIG. 6.1 – Représentation schématique d'un paysage d'énergie libre très irrégulier. L'axe des abscisses représente les différentes configurations du système.

un temps d'Arrhenius généralisé  $e^{-\Delta F/T}$  (où  $F$  est l'énergie libre), qui ont lieu dans un paysage très irrégulier (voir fig. 6.1). Les verres de spins discontinus fournissent un cadre théorique idéal pour tester et analyser cette représentation de l'évolution dynamique parce que ils sont en même temps suffisamment complexes pour avoir un comportement vitreux intéressant (cf. chapitre précédent), mais aussi suffisamment simples pour être étudiés analytiquement. De plus, pour ces systèmes, l'analyse de Cugliandolo et Kurchan [25, 146] a montré implicitement un lien entre la dynamique à grands temps (hors équilibre) et les minima de l'énergie libre. Ceci a été utilisé pour donner une interprétation du vieillissement comme une *évolution dans les directions plates du paysage d'énergie libre* [11].

Le but de cette section est de montrer, dans le cas des verres de spins discontinus, en quel sens la dynamique à grands temps peut être vue comme une évolution dans le paysage d'énergie libre, et en particulier de montrer explicitement la relation entre le vieillissement et la présence de directions plates, qui pour l'instant a reçu une explication seulement à température nulle [147]. Ces résultats seront obtenus grâce à une généralisation dynamique de l'approche TAP.

### 6.3.1 Les équations TAP dynamiques

L'approche TAP consiste à calculer l'énergie libre comme fonction des aimantations locales pour un échantillon donné. Les équations de stationnarité de l'énergie libre TAP se traduisent en des équations sur les aimantations locales  $m_i$  qui sont la généralisation de l'équation  $m = \tanh \beta m$  du modèle d'Ising complètement connecté. Il est alors naturel

de se demander quelles sont les équations *dynamiques* satisfaites par  $m_i(t)$  <sup>2</sup>, quelle est la relation entre ces équations et l'énergie libre TAP et comment on voit le vieillissement dans ce formalisme. Pour répondre à ces questions j'ai généralisé l'approche TAP à la dynamique. Je me suis intéressé au modèle à p-spins sphériques mais mon travail peut être facilement appliqué à d'autres modèles de verres de spins discontinus.

La première étape consiste à généraliser l'énergie libre TAP au cas dynamique. Si l'on considère une dynamique de Langevin, et sa représentation, appelé de Martin-Siggia-Rose-DeDominicis-Janssen (MSRDJ) [156, 157, 158] en terme de champs de spin  $S_i(t)$  et de champs de réponse  $\hat{S}_i(t)$ , l'énergie libre TAP dynamique  $\Gamma$  est définie comme la transformée de Legendre suivante :

$$-\beta N \Gamma(\hat{m}_i, m_i, C, R, D) = \ln \int \mathcal{D}S_i \mathcal{D}\hat{S}_i \exp \left[ \int dt S_1(\alpha) + S_2 \right] \Big|_{\alpha=1} \quad (6.17)$$

$$S_1 = \int dt - \sum_i \hat{S}_i \left( \frac{dS_i}{dt} - T \hat{S}_i + \alpha \frac{\partial H}{\partial S_i} \right) \quad (6.18)$$

$$\begin{aligned} S_2 = & \int dt \sum_i \left[ h_i(t)(S_i(t) - m_i(t)) + \hat{h}_i(t)(\hat{S}_i(t) - \hat{m}_i(t)) \right] \quad (6.19) \\ & + \int dt dt' \sum_i \left[ \tilde{C}(t, t') (S_i(t)S_i(t') - C(t, t')) + \tilde{R}(t, t') (S_i(t)\hat{S}_i(t') - R(t, t')) \right] \\ & + \tilde{D}(t, t') (\hat{S}_i(t)\hat{S}_i(t') - D(t, t')) \end{aligned}$$

où  $\alpha$  est un intermédiaire de calcul, dont l'utilité sera expliquée dans la suite, et  $h_i, \hat{h}_i, \tilde{C}, \tilde{R}, \tilde{D}$  sont des paramètres de Lagrange fixés de façon à ce que :

$$\langle S_i(t) \rangle = m_i(t), \quad \langle \hat{S}_i(t) \rangle = \hat{m}_i(t)$$

$$\begin{aligned} C(t, t') &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) S_i(t') \rangle \\ R(t, t') &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) \hat{S}_i(t') \rangle \\ D(t, t') &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{S}_i(t) \hat{S}_i(t') \rangle \end{aligned}$$

où  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne par rapport à la théorie dynamique de MSRDJ définie en (6.17).  $\Gamma$  ainsi définie est la généralisation au cas dynamique de l'énergie libre TAP. En particulier,

<sup>2</sup>Pour des modèles de champ moyen très simples, comme le modèle d'Ising complètement connecté, on trouve que le paramètre d'ordre satisfait une équation déterministe de descente du gradient (voir par exemple l'eq. (6.16)).

les conditions de stationnarité de  $\Gamma$  correspondent aux équations *dynamiques* vérifiées par  $m_i, \hat{m}_i, C, R, D$ . Le calcul de  $\Gamma$  est détaillé dans la publication V, ici nous nous contenterons d'exposer brièvement la méthode, qui est la généralisation au cas dynamique de celle introduite par Plefka [159] et Georges et Yedidia [160]. La démarche que nous avons suivie consiste à développer  $\Gamma$  en puissances de  $\alpha$  autour de  $\alpha = 0$  et à évaluer le résultat final en  $\alpha = 1$ . Il y a deux simplifications importantes qui interviennent et qui rendent le calcul faisable (et beaucoup plus simple dans le cas statique, que les autres méthodes utilisés pour calculer les équations TAP) :

1. A  $\alpha = 0$ , les spins sont découplés, par conséquent le développement en  $\alpha$  revient à un développement autour d'une théorie dynamique de spins non interagissant.
2. Tous les termes du développement en  $\alpha^n$  avec  $n \geq 3$  sont au plus d'ordre  $1/\sqrt{N}$  et donc négligeables dans la limite thermodynamique.

La raison physique de cette dernière simplification est que le développement en  $\alpha$  prend en compte de façon progressive l'interaction entre les spins. Ceci se voit bien dans le cas statique, où les premiers deux termes ( $\alpha^0, \alpha^1$ ) donnent lieu à l'énergie libre naïve, qui par exemple dans le cas d'une interaction à deux spins est égale à :

$$T \sum_i \left( \frac{1 - m_i}{2} \right) \ln \left( \frac{1 - m_i}{2} \right) + \left( \frac{1 + m_i}{2} \right) \ln \left( \frac{1 + m_i}{2} \right) - \sum_{i < j} J_{i,j} m_i m_j \quad (6.20)$$

Le premier terme, appelé terme entropique, correspond à l'entropie de  $N$  spins d'Ising découplés, forcés par des champs extérieurs à avoir des aimantations  $m_i$ ; tandis que le deuxième, appelé terme énergétique, revient à remplacer  $S_i$  par  $m_i$  dans l'énergie <sup>3</sup>. Le coefficient de  $\alpha^2$  donne lieu au célèbre terme de rétroaction de Onsager, qui correspond physiquement à la contribution au champ effectif du spin  $S_i$  due à l'influence que ce dernier exerce sur tous les autres. Les termes suivantes, qui correspondent physiquement à "la réaction de la réaction" et ainsi de suite, sont au plus d'ordre  $1/\sqrt{N}$  pour les modèles complètement connectés [159, 160] et donc négligeables dans la limite thermodynamique. Notons que dès que les couplages sont d'ordre un et la connectivité est finie (ce qui est le cas pour les modèles dilués) tous les termes en  $\alpha^n$  interviennent.

Par le développement en  $\alpha$  nous avons pu calculer  $\Gamma$  (les calculs sont détaillés dans la publication V) et obtenir les équations vérifiées par  $m_i, \hat{m}_i, C, R, D$  pour un échantillon donné. Ces équations admettent une solution caractérisée par  $\hat{m}_i = 0, D = 0$  <sup>4</sup>. Les équations

---

<sup>3</sup>Pour le modèle d'Ising complètement connecté  $J_{i,j} = J/N$  et (6.20) coïncide avec le résultat exact, puisque les termes suivants en  $\alpha^n, n \geq 2$ , sont au plus d'ordre  $1/\sqrt{N}$  et donc négligeables quand  $N \rightarrow \infty$ .

<sup>4</sup>Les solutions caractérisées par  $\hat{m}_i, D$  non nuls sont reliées aux instantons de la théorie dynamique et correspondent à des événements rares par rapport à la solution  $\hat{m}_i = 0, D = 0$  [161, 162, 163], preprint I.

restantes vérifiées par  $C, R, m_i$  sont égales à :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( C(t, t') - Q(t, t') \right) &= 2TR(t', t) - \lambda(t) \left( C(t, t') - Q(t, t') \right) + \\ &+ \frac{p}{2} \int_0^{t'} dt'' \left( C(t, t'')^{p-1} - Q(t, t'')^{p-1} \right) R(t', t'') \\ &+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t dt'' \left( C(t'', t') - Q(t'', t') \right) R(t, t'') C(t, t'')^{p-2} \quad , \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R(t, t') &= -\lambda(t) R(t, t') + \delta(t - t') + \\ &+ \frac{p(p-1)}{2} \int_{t'}^t dt'' R(t, t'') R(t'', t') C(t, t'')^{p-2} \quad , \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{dt} + \lambda(t) \right) m_i(t) &= \sum_{1 \leq i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i, i_2, \dots, i_p} m_{i_2}(t) \cdots m_{i_p}(t) + \\ &+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t dt'' \left( C(t, t'')^{p-2} - Q(t, t'')^{p-2} \right) R(t, t'') m_i(t'') \quad , \end{aligned} \quad (6.23)$$

où  $Q(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i(t) m_i(t')$  est la fonction de recouvrement et  $\lambda(t)$  est le multiplicateur de Lagrange qui impose la condition sphérique  $C(t, t) = 1$ . Dans la publication V je montre que ces équations reviennent à prendre comme condition initiale une configuration donnée. Par conséquent, les fonctions de corrélation et de recouvrement, et les aimantations satisfont les conditions au bord :

$$C(t, 0) = Q(t, 0) \quad m_i(0) = S_i^0$$

où  $S_i^0$  est la configuration initiale du départ.

On peut réécrire l'équation (6.23) de façon à faire apparaître, au moins formellement, l'énergie libre statique  $F_{TAP}$  :

$$\frac{dm_i}{dt} = -\frac{\partial F_{TAP}}{\partial m_i} + \mathcal{H}_i \quad (6.24)$$

où  $\mathcal{H}_i$  sont des termes de mémoire égale à :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i &= \left[ \frac{1}{1 - Q(t, t)} + \frac{p(p-1)}{2T} (1 - Q(t, t)) Q(t, t)^{p-2} - \lambda(t) \right] m_i \\ &+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t dt'' \left( C(t, t'')^{p-2} - Q(t, t'')^{p-2} \right) R(t, t'') m_i(t'') \end{aligned}$$

On peut montrer que ces termes sont non nuls sur des temps d'ordre un et tendent vers zéro asymptotiquement. Par conséquent, les aimantations vérifient, à grands temps, des

équations dynamiques de descente du gradient avec des termes supplémentaires (les  $\mathcal{H}_i$ ) qui s'annulent quand  $t \rightarrow \infty$ . Les limites asymptotiques des aimantations ( $\lim_{t \rightarrow \infty} m_i(t)$ ) vérifient donc les équations TAP statiques. Notons que, au contraire du modèle d'Ising complètement connecté, les équations dynamiques (6.24) sur les aimantations ne sont pas celles de descente de gradient dans le paysage d'énergie libre TAP puisque le terme de Onsager en (6.23) est non-Markovien. La présence de ce terme de mémoire est dû au fait que dans le cas dynamique le terme de réaction correspond à la contribution au champ effectif du spin  $S_i$  due à l'influence que ce dernier a exercé sur tous les autres spins à *tous les temps précédents*.

### 6.3.2 Analyse asymptotique des équations TAP dynamiques

Dans la publication V nous avons analysé le comportement asymptotique des solutions de (6.21,6.22,6.23). Nous avons trouvé trois cas différents :

- *Dynamique de relaxation à l'intérieur d'un état TAP*. Dans ce cas la fonction de corrélation et de réponse sont caractérisées à grands temps par une dynamique d'équilibre : elles deviennent invariantes par translations du temps et sont reliées par la relation fluctuation dissipation  $C'(\tau) = -TR(\tau)\theta(\tau)$ . De plus, les  $m_i(t)$  convergent asymptotiquement vers une solution TAP, caractérisée par un paramètre d'Edwards et Anderson et une énergie, qui coïncident respectivement avec la valeur asymptotique de  $C(\tau)$  et l'énergie asymptotique. Ce type de solution correspond donc à l'équilibration dans la composante ergodique associé à un état TAP. Ce résultat est bien en accord avec l'analyse de la dynamique obtenue à partir de conditions initiales tirée au hasard à partir de la la distribution de Boltzmann à une température  $T'$  [122, 164]. En fait les équations asymptotiques vérifiées par  $C$  et  $R$  quand les aimantations convergent à une des solution TAP qui dominant la fonction de partition à température  $T'$  sont les mêmes que celles obtenues et analysés en [122, 164].
- *Brisure d'ergodicité faible* <sup>5</sup>. Dans ce cas les aimantations tendent à zéro asymptotiquement et les fonctions de corrélation et de réponse, qui montrent une dynamique lente et vieillissante avec violation de théorème fluctuation dissipation à grands temps, sont les mêmes que celles obtenues en [25, 146], où la dynamique de basse température du modèle à p-spins sphériques a été étudiée à partir d'une condition initiale prise au hasard avec une distribution uniforme (cette procédure est équivalente à une trempe à partir de la température infinie). L'annulation des aimantations peut être comprise grâce au travail de Barrat, Burioni et Mézard [166] : si l'on attend suffisamment, deux copies contraintes à évoluer, depuis la même configuration initiale, avec le même bruit thermique jusqu'au temps  $t_w$ , et avec deux bruits thermiques indépendants après  $t_w$ , se décorrèlent complètement quelque soit  $t_w$ . Par conséquent,

---

<sup>5</sup>Le concept de brisure d'ergodicité faible a été introduit par J.P. Bouchaud en [165].

à cause de la grande irrégularité du paysage énergétique et du bruit thermique, la distribution de probabilité dynamique, obtenue en prenant comme condition initiale une configuration quelconque atteinte pendant l'évolution dynamique, s'étale complètement ; donc, en particulier, les aimantations, qui représentent "le centre" de cette distribution, tendent vers zéro asymptotiquement.

- *Vieillessement et évolution dans les directions plates de l'énergie libre.* Cette troisième solution représente un comportement intermédiaire par rapport aux deux solutions précédentes puisque les fonctions de corrélation et réponse sont caractérisées par une dynamique lente comme celle trouvée en [25, 146], mais les aimantations ne tendent pas vers zéro à grands temps. En effet leur limite à grands temps n'existe pas : elles continuent toujours à évoluer et donnent lieu à une fonction de recouvrement égale à la fonction de corrélation ( $C(t, t') = Q(t, t')$ ). Ce comportement est dû au fait que, à grands temps, les aimantations se trouvent dans la partie du paysage d'énergie libre caractérisée par l'existence de directions plates<sup>6</sup>. A cause de ces directions les termes  $\mathcal{H}_i$  jouent alors un rôle fondamental, puisque ils arrivent à faire toujours évoluer le système (même si plus lentement plus le temps passe), ce qui donne lieu au vieillissement. Cette solution asymptotique est obtenue en prenant comme condition initiale une configuration au hasard et en forçant la distribution dynamique à ne pas s'étaler<sup>7</sup> (comme on a vu au point précédent, ceci est l'effet responsable de l'annulation des aimantations à grands temps).

### 6.3.3 Paysage d'énergie exploré pendant l'évolution dynamique

L'analyse des équations TAP dynamiques a permis de montrer explicitement que les propriétés locales du paysage d'énergie libre, c'est-à-dire les minima et le hessien évalué dans les minima, sont reliées à la dynamique à grands temps. Pour montrer clairement que, dans la dynamique, les paysages de l'énergie libre et de l'énergie jouent des rôles différentes, dans la publication V, j'ai étudié le paysage d'énergie vu par le système pendant l'évolution dynamique. En particulier j'ai calculé la densité d'états du hessien de l'énergie  $\rho(\lambda, t) = \sum_i \delta(\lambda - \lambda_i)$ , où  $\lambda_i$  sont les valeurs propres du hessien

$$\mathcal{W}_{i,j} = \left. \frac{\partial^2 H}{\partial s_i \partial s_j} \right|_{\{s_i = s_i(t)\}}$$

évalué dans les configurations  $\{s_i = s_i(t)\}$  atteintes par la dynamique au temps  $t$  (à partir d'une condition initiale prise au hasard). Ce spectre, qui est une loi de Wigner avec une largeur fixe (dépendant de  $p$ ) et un centre qui est une fonction du temps, ne montre aucun changement particulier à la température dynamique. Cette analyse montre explicitement

---

<sup>6</sup>Plus précisément, on peut montrer que la densité des valeurs propres du hessien de l'énergie libre TAP statique  $\partial^2 F_{TAP} / \partial m_i \partial m_j$  évalué en  $\{m_i(t)\}$  tend à grands temps vers une loi semi-circulaire de Wigner centrée en  $\sqrt{2q^{p-2}p(p-1)}$  et avec support  $[0, 2\sqrt{2q^{p-2}p(p-1)}]$ .

<sup>7</sup>Voir la publication V et le compte-rendu I pour plus de détails.

que, à la transition dynamique les propriétés locales du paysage de l'énergie exploré pendant l'évolution ne changent pas, tandis que celles globales changent et ceci se traduit dans l'existence des directions plates dans le paysage d'énergie libre.

## 6.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié le lien entre le paysage de l'énergie libre et la dynamique. Cette étude a été effectuée en généralisant l'approche TAP à la dynamique et aussi en calculant explicitement les plus petites valeurs propres de l'opérateur de Glauber pour des modèles de champ moyen simples et pour des systèmes en dimension finie dans l'approximation large  $S$ . Nos résultats suggèrent que seulement la dynamique à temps longs peut être interprétée en terme d'évolution dans le paysage d'énergie libre. Nous avons trouvé que le paysage d'énergie libre autour de minima joue un rôle très important pour la dynamique. En particulier, les minima stables sont reliés aux distributions de probabilité dynamiquement stables (c'est-à-dire qui n'évoluent pas sous l'évolution dynamique) et le paysage autour d'eux est relié à la dynamique de relaxation à l'intérieur de la composante ergodique correspondante. Tandis que les minima marginalement stables jouent un rôle très important pour le vieillissement. En fait, la dynamique lente à grands temps peut être vue comme une évolution dans le paysage d'énergie libre avec des termes supplémentaires qui s'annulent à grands temps. Ces termes forcent le système à évoluer dans les directions plates de l'énergie libre : plus le temps est grand, plus ces termes deviennent faibles et plus la dynamique se ralentit. Cependant, elle ne s'arrête jamais : le système arrive toujours à s'éloigner de lui même mais de plus en plus lentement plus le temps est grand.

Enfin, il faut souligner que dans notre étude les barrières dans le paysage d'énergie libre n'ont joué aucun rôle. Mais ceci est probablement dû au fait que nous avons considéré des modèles en champ moyen. A ce propos, il serait très intéressant d'étudier les processus instantoniques, qui devrait être reliés au processus activés, dont on a parlé dans le chapitre précédent et qui pourrait être relié au barrières dans le paysage d'énergie libre [162, 163].



# Chapitre 7

## Etats métastables dans les systèmes vitreux

### 7.1 Introduction

Dans le chapitre 5 nous avons souligné que les verres de spins discontinus semblent fournir une image de champ moyen de la transition vitreuse. La description, qui en découle, est basée sur l'existence d'un nombre exponentiellement grand d'états, qui ont un temps de vie infini en champ moyen mais nécessairement fini dans un système réel. La prise en compte du temps de vie fini des états, qu'on appellera états métastables, semble donc être une difficulté essentielle à surmonter pour bâtir une théorie de la transition vitreuse (basée sur l'analogie avec les verres de spins discontinus). Il semble naturel de définir un état métastable, sur une échelle de temps  $\tau$ , comme une distribution de probabilité *dynamique* qui n'évolue presque pas sur des temps d'ordre  $\tau$ . Si l'on était capable alors de calculer les propriétés des états métastables ainsi définis : leur nombre, leur énergie, ..., on pourrait espérer d'obtenir une théorie capable de décrire la physique des systèmes vitreux (dont les verres des spins discontinus fournissent une image de champ moyen). Le travail exposé dans ce chapitre, qui a donné lieu au preprint I, est un premier pas dans cette direction. Dans la suite, d'abord, nous introduirons à travers des exemples simples la définition mathématique d'état métastable [167]. Ensuite nous montrerons comment l'on peut calculer les propriétés des états métastables en analysant le cas simple d'un verre de spins discontinu en champ moyen.

Il est intéressant de remarquer qu'il existe des systèmes ayant un comportement thermodynamique trivial [168, 169, 170] (il n'y pas de transition de phase), qui montrent, d'un point de vue dynamique, toutes les caractéristiques vitreuses décrites dans le chapitre 5. Dans ce cas, il est clair que seulement une définition dynamique "d'état" peut permettre d'expliquer ce comportement en terme d'un scénario basé sur l'analogie avec les verres de spins discontinus.

## 7.2 Définition dynamique d'état métastable

Dans cette section nous introduirons le concept d'état métastable à travers des exemples simples, qui permettront de dévoiler le lien avec les vecteurs propres correspondants aux valeurs propres plus petites de l'opérateur d'évolution dynamique. Nous nous concentrerons sur une dynamique de Langevin, pour laquelle l'opérateur d'évolution est  $e^{-tH}$ , où  $H$  est l'opérateur de Fokker-Planck [171, 172]. Ensuite nous rappellerons des résultats mathématiques [167] concernant les états métastables. Comme nous avons souligné dans l'introduction, nous voudrions aboutir à une définition d'état métastable qui puisse permettre d'appliquer à des systèmes réels l'image physique obtenue par l'analyse des verres de spins discontinus. Le but serait de pouvoir donner un sens à une phrase comme celle-ci : "l'espace de phase contient un nombre  $N_{em}$  d'états métastables sur l'échelle de temps  $\tau$ , auxquels le système a accès par l'évolution dynamique avec une probabilité  $p$ . Aux temps longs les observables peuvent être calculées en moyennant sur les états métastables avec un certain poids  $p$ ". Cette phrase assume implicitement : qu'on sache 1) définir le concept d'état métastable et 2) montrer, avec des arguments ergodiques, que la distribution de probabilité de trouver le système dans une certaine configuration à grands temps peut être approchée par une distribution sur les états métastables. Ceci permettrait de généraliser le scénario obtenu pour les verres de spins discontinus aux systèmes en dimension finie pour lesquels les "états" ont forcément un temps de vie fini.

Dans la suite nous nous concentrerons sur le point 1). Par contre, il semble difficile de pouvoir attaquer le point 2), exactement comme il est très dur (voire infaisable dans la majorité de cas) de démontrer que la dynamique à grand temps converge vers la mesure de Gibbs. Concernant le point 2), à l'heure actuelle il n'y a pas des vérifications expérimentales et il existe des résultats seulement pour les systèmes de champ moyen ou pour des systèmes en dimension finie particulièrement simples. En effet dans l'analyse des verres de spins discontinus en champ moyen, il a été trouvé que la dynamique hors équilibre à grands temps est complètement dominée par les états TAP plus nombreux, qui ont aussi l'énergie libre la plus grande. En particulier les observables à un temps peuvent être obtenue par une moyenne uniforme sur les états (méta)stables ayant l'énergie libre la plus grande. En outre, récemment il a été montré que pour un système cinétique de gaz sur réseau en dimension finie [170], qui montre les propriétés dynamiques caractéristiques de la transition vitreuse [168, 169], la procédure définie au point 2) s'applique si l'on fait une moyenne uniforme sur tous les états avec une certaine densité (qui coïncide avec la densité asymptotique).

On peut espérer que, si le scénario obtenu pour les verres de spins discontinus est généralisable aux systèmes réels, la procédure qui consiste à faire une moyenne plate sur les états métastables, éventuellement restreinte seulement aux états caractérisés par une certaine valeur d'une observable macroscopique (énergie, densité, ...), soit correcte. Nous supposons ceci dans la suite, mais ce point a sans doute besoin d'une justification et d'une analyse ultérieures.

Nous remarquons que remplacer la distribution de probabilité obtenue dynamiquement à grands temps avec une moyenne uniforme sur les états métastables est une généralisation de la proposition d'Edwards pour les matériaux granulaires, qui consiste à moyennner sur

toutes les configurations mécaniquement stables [173]. Pour cette raison dans la suite nous appellerons cette type de moyenne : moyenne à la Edwards.

### 7.2.1 Exemples et remarques simples

Dans le cadre de la dynamique de Langevin la distribution de probabilité dynamique vérifie l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(S, t)}{\partial t} &= -HP(S, t) \\ H &= -\frac{\partial}{\partial S_i} \left( T \frac{\partial}{\partial S_i} + \frac{\partial E}{\partial S_i} \right) \end{aligned} \quad (7.1)$$

où  $H$  est l'opérateur de Fokker-Planck et  $E$  est l'énergie potentielle. La distribution de probabilité dynamique peut s'écrire :

$$P(x, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i(x) \quad c_i(t) = c_i^0 e^{-\lambda_i t} \quad (7.2)$$

où  $\psi_i(x)$  sont le vecteurs propres à droite de  $H$  et  $\lambda_i$  les valeurs propres correspondantes. La formule (7.2) suggère qu'une distribution de probabilité qui évolue lentement sur une échelle de temps  $\tau$  est concentrée sur les vecteurs propres de  $H$  correspondantes à une valeur propre  $\lambda$  telle que  $\lambda\tau \ll 1$ . En effet, les inverses des valeurs propres  $\lambda$  ont l'interprétation d'échelles de temps caractéristique. La question qu'on se pose est alors : pour une échelle de temps  $\tau \gg 1$  donnée, est-ce-que l'on peut construire à partir des vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus petites, des distributions qui soient positives, normalisées, non nulles dans des régions différentes de l'espace et qui n'évoluent presque pas sur l'échelle de temps  $\tau$  ? Si l'on était capable de faire ceci alors on aurait à disposition une façon de construire les distributions de probabilité associées aux états métastables.

On peut d'abord considérer le cas *idéal* correspondant aux états stables, où l'espace des configurations peut être divisé en  $p$  composantes ergodiques séparées  $\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_p$ . Dans ce cas le lien entre états (méta)stables et vecteurs propres de  $H$  est particulièrement simple. En effet à l'intérieur de chaque composante ergodique  $\mathcal{C}_a$  il y a une distributions d'équilibre  $P_a(x)$ , qui est un vecteur propre de valeur propre nulle de  $H$ . L'ensemble des vecteurs propres (indépendants)  $P_a(x)$  engendre le noyau de  $H$ . Donc a partir des vecteurs propres de  $H$  avec valeur propre nulle on peut construire les états stables du système. En particulier on peut calculer leur nombre à partir de la trace de l'opérateur d'évolution :

$$\begin{aligned} \text{tr}[e^{-t^* H}] &= \int dx \int dy \langle x | e^{-\frac{t^*}{2} H} | y \rangle \langle y | e^{-\frac{t^*}{2} H} | x \rangle \\ &= \sum_{a=1}^p \sum_{b=1}^p \int_{x \in \mathcal{C}_a} dx \int_{y \in \mathcal{C}_b} dy \langle x | e^{-\frac{t^*}{2} H} | y \rangle \langle y | e^{-\frac{t^*}{2} H} | x \rangle \\ &= \sum_{a=1}^p \int_{x \in \mathcal{C}_a} dx \int_{y \in \mathcal{C}_a} dy \langle x | e^{-\frac{t^*}{2} H} | y \rangle \langle y | e^{-\frac{t^*}{2} H} | x \rangle \end{aligned} \quad (7.3)$$

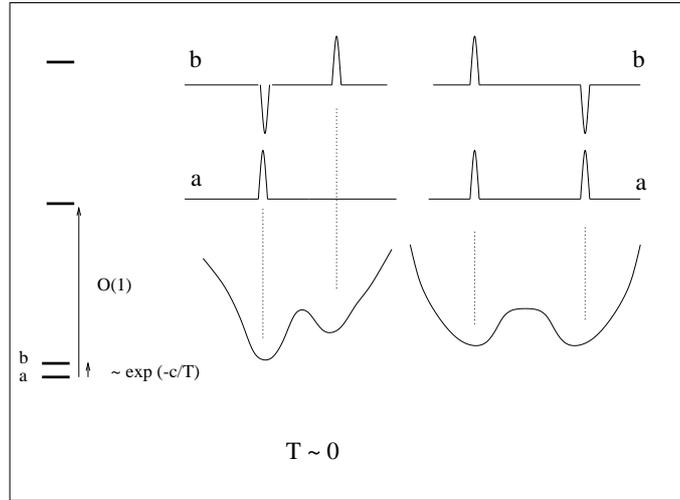


FIG. 7.1 – Spectre de l’opérateur de Fokker Planck pour un potentiel à double puits. Sur la gauche nous avons tracé les valeurs propres les plus petites : si la température est suffisamment faible il y a une valeur propre nulle, une valeur propre  $\sim e^{-c/T}$  qui correspond au temps d’Arrhenius pour sauter la barrière entre les deux puits et ensuite des valeurs propres qui sont d’ordre un. Nous avons aussi dessiné l’allure des fonctions d’ondes associées à la valeur propre nulle (courbe **a**) et au premier état excité (courbe **b**).

Si  $t^*$  est plus grand que tous les temps caractéristiques des relaxations à l’intérieur des composantes ergodiques alors  $\langle y | e^{-\frac{t^*}{2}H} | x \rangle \simeq P_a(y)$ , où  $\mathcal{C}_a$  est la composante ergodique à laquelle  $x$  appartient, et par conséquent on obtient :

$$\text{tr}[e^{-t^*H}] \simeq \sum_{a=1}^p \int_{x \in \mathcal{C}_a} dx \int_{y \in \mathcal{C}_a} dy P(x)P(y) \simeq p \quad (7.4)$$

Dans cet exemple les composantes ergodiques sont strictement séparées. Pour montrer les difficultés (et une solution possible) qui interviennent quand on a à faire à des états caractérisés par un temps de vie fini, nous avons considéré le cas simple d’une dynamique de Langevin d’une particule dans un potentiel à deux puits, voire fig. 7.1. Si la température est suffisamment faible le spectre consiste en une valeur propre nulle, une valeur propre  $\sim e^{-c/T}$  qui correspond au temps d’Arrhenius pour sauter la barrière entre les deux puits et des valeurs propres qui sont d’ordre un. Nous avons dessiné en fig. 7.1 l’allure des fonctions d’ondes associées à la valeur propre nulle (courbe **a**) et au premier état excité (courbe **b**) pour un potentiel asymétrique et symétrique. Si l’on considère une échelle de temps  $\tau$ , beaucoup plus grande que l’échelle de temps caractéristique des excitations dans un puits et beaucoup plus courte que le temps d’Arrhenius pour sauter la barrière ( $O(1) \ll \tau \ll e^{c/T}$ ), on voudrait pouvoir définir deux états métastables qui correspondent à avoir le système confiné respectivement dans un des deux puits. Ceci est en effet possible en faisant une combinaison linéaire de fonctions d’onde **a** et **b**. Utilisant la notation  $P_1$  et  $P_2$  pour les distributions de probabilité associées aux deux états métastables, on obtient respectivement  $P_1 \simeq \mathbf{a}$  et

$P_2 \simeq \mathbf{a} + \mathbf{b}$  dans le cas asymétrique, et  $P_1 \simeq \mathbf{a} + \mathbf{b}$  et  $P_2 \simeq \mathbf{a} - \mathbf{b}$  dans le cas symétrique.

## 7.2.2 Définition mathématique

On peut se demander si la construction des états métastables à partir des vecteurs propres de  $H$  est généralisable à des cas plus compliqués. La réponse à cette question se trouve dans un travail récent de Gaveau et Schulman [167]. Dans la suite nous rappellerons leurs résultats principaux. Nous considérerons un opérateur d'évolution construit à partir de l'opérateur de Fokker-Planck, mais leur résultats s'appliquent à des opérateurs d'évolution plus généraux.

Si un opérateur de Fokker-Planck est caractérisé par un spectre ayant les  $p$  valeurs propres plus petites  $\lambda_1, \dots, \lambda_p$  séparées des autres par un "gap", on peut trouver une échelle de temps  $t^*$  telle que :

$$\begin{aligned} t^* \lambda_i &< \epsilon && \text{pour } i = 1, \dots, p \\ \frac{1}{t^* \lambda_i} &< \epsilon && \text{pour } i = p + 1, \dots \\ \epsilon &<< 1 \end{aligned} \tag{7.5}$$

$t^*$  est donc une échelle de temps beaucoup plus grandes que celles des excitations à l'intérieur des états métastables et beaucoup plus petite que le temps nécessaire pour en sortir. A des termes d'ordre  $\epsilon$  près, on peut trouver de façon unique  $p$  vecteurs propres à droite  $|P_i\rangle$  :

- positifs :  $P_i(x) = \langle x|P_i\rangle \geq 0$
- presque stationnaires :  $H|P_i\rangle \simeq 0 \quad \forall i = 1, \dots, p$
- normalisés et non nuls en des régions différentes de l'espace.

La dernière propriété est reliée au fait qu'il existe  $p$  vecteurs propres à gauche  $\langle Q_i|$ , tels que chaque  $Q_i(x)$  est égale à un sur le support de  $P_i(x)$ , est nul ailleurs et satisfait les relations de normalisation et orthogonalités suivantes :

$$\langle Q_i|P_j\rangle \simeq \delta_{ij} \tag{7.6}$$

De plus, toujours à moins de termes d'ordre  $\epsilon$ , l'opérateur d'évolution s'écrit :

$$e^{-t^* H} \simeq \sum_{i=1}^p |P_i\rangle \langle Q_i| \tag{7.7}$$

Les vecteurs  $|P_i\rangle$  ont donc toutes les bonnes propriétés pour représenter des états métastables : ils donnent lieu à des distributions  $P_i(x)$  positives, normalisés à un, presque stationnaires sur l'échelle de temps  $t^*$  et non nulles en des régions différentes de l'espace des configurations.

### 7.2.3 Moyenne uniforme sur les états métastables

Si l'hypothèse ergodique qui donne lieu à la moyenne à la Edwards est correcte, ce qu'on va supposer dans la suite, alors en utilisant la définition d'état métastable donnée auparavant on obtient :

$$\langle\langle A \rangle\rangle_{t^*} \simeq \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \langle A \rangle_i \quad \text{où} \quad \langle A \rangle_i = \langle Q_i | A | P_i \rangle \quad (7.8)$$

où l'indice  $\langle\langle \cdot \rangle\rangle_{t^*}$  indique la moyenne sur la distribution dynamique  $P(S_i, t)$ . On peut réécrire cette formule de la façon suivante :

$$\langle\langle A \rangle\rangle_{t^*} \simeq \frac{\text{tr}[e^{-t^* H} A]}{\text{tr}[e^{-t^* H}]} \quad (7.9)$$

Dans cette notation le lien avec les états métastables apparaît seulement à travers la valeur de  $t^*$  dans la trace. De plus, il peut être aussi intéressant, comme il a été trouvé en [170] et pour les verres de spins discontinus, de considérer des moyennes plates sur les états métastables avec une certaine énergie, densité, ... Si l'on fixe la valeur de l'énergie  $E$ , par exemple, on peut alors généraliser (7.9) de la façon suivante :

$$\langle\langle A \rangle\rangle_{t^*}(E_o) \simeq \frac{\text{tr}[\delta(E - E_o) e^{-t^* H} A]}{\text{tr}[\delta(E - E_o) e^{-t^* H}]} = \frac{\text{tr}_{E_o}[e^{-t^* H} A]}{\text{tr}_{E_o}[e^{-t^* H}]} \quad (7.10)$$

Dans ce contexte l'équivalent de l'entropie configurationnelle ou de la complexité est le logarithme du nombre d'états métastables, qui est défini de la façon suivante :

$$\mathcal{S}_{t^*}(E_o) \equiv \ln \text{tr}[\delta(E - E_o) e^{-t^* H}] = \ln \text{tr}_{E_o}[e^{-t^* H}] \quad (7.11)$$

Quand  $t^* \rightarrow 0$ , on est en train de considérer comme état métastable chaque configuration et, en effet, (7.10) coïncide avec la mesure microcanonique (et (7.11) avec l'entropie à moins d'une constante). Par contre quand  $t^* = \infty$ , (7.11) coïncide avec la complexité.

La valeur de  $t^*$  qu'il faut considérer devrait être intermédiaire entre celle caractéristique des excitations à l'intérieur des bassins et celle nécessaire pour sortir des bassins. L'analogie avec les verres des spins discontinus et aussi les résultats de dynamique moléculaire semblent suggérer que la première échelle de temps soit celle correspondante au mouvement à l'intérieur d'une cage ( $\tau_\beta$ ) et la deuxième, celle qui correspond à la sortie de la cage ( $\tau_\alpha$ ). Par conséquent il faudrait considérer <sup>1</sup> une valeur de  $t^*$  telle que  $\tau_\beta \ll t^* \ll \tau_\alpha$  (si le scénario proposé est correct alors deux valeurs différentes de  $t^*$  qui vérifient les deux inégalités précédentes devrait redonner à peu près le même résultat).

Avant de terminer cette section il est important de remarquer que dans la démonstration mathématique de Gaveau et Schulman, on fait l'hypothèse que le nombre d'états métastables  $p$  est fini et qu'il y a un gap. Ces deux hypothèses ne sont pas vérifiées pour les systèmes vitreux réels. Cependant, nous supposons, guidés de l'analyse des cas simples considérés précédemment, que ce formalisme soit applicable aussi aux systèmes vitreux fragiles. Bien sûr, cette hypothèse à besoin d'une analyse et une justification ultérieure.

<sup>1</sup>A cause de la limite thermodynamique des subtilités interviennent dans le choix de  $t^*$ . Voir le preprint I, pour une discussion de ce point.

### 7.3 Analyse d'un modèle de champ moyen

Dans cette section nous montrerons comment le formalisme introduit précédemment s'applique à un verre de spins discontinu en champ moyen, i. e. le modèle à p-spins sphériques. Ceci nous permettra de vérifier que ce formalisme redonne les résultats corrects en champ moyen (quand les états sont vraiment stables). De plus, l'analyse de ce cas simple nous permettra d'étudier les propriétés de la solution dynamique, qui est d'un type nouveau par rapport aux solutions trouvées jusqu'à maintenant pour les équations dynamique de champ moyen, et d'élucider les limites et la signification des approches purement *statiques* utilisées jusqu'à maintenant pour obtenir des renseignements sur les états *dynamiquement* stables.

#### 7.3.1 Quelques détails techniques

La trace de l'opérateur d'évolution, restreinte aux configurations avec une densité d'énergie  $E_0$ , peut se réécrire comme une intégrale fonctionnelle sur les champs de spin  $S_i(t)$  et les champs de réponse  $\hat{S}_i(t)$  [172] avec des conditions périodiques au bord sur  $S_i(t)$ . La théorie des champs ainsi obtenue est appelée de Martin-Siggia-Rose-DeDominicis-Janssen (MSRDJ) [157],[156],[158].

Après avoir moyenné sur le désordre <sup>2</sup>, (puisque le modèle à p-spins sphériques est de champ moyen) on peut effectuer l'intégrale sur les variables locales  $S_i(t)$  et  $\hat{S}_i(t)$ , en introduisant les variables globales :

$$C(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) S_i(t') \rangle \quad (7.12)$$

$$R(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) \hat{S}_i(t') \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\delta \langle S_i(t) \rangle}{\delta h_i(t')} \quad (7.13)$$

$$D(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{S}_i(t) \hat{S}_i(t') \rangle \quad (7.14)$$

où  $\langle \cdot \rangle$  indique la moyenne par rapport à la théorie de MSRDJ. Puisque l'on considère la trace de l'opérateur d'évolution on s'attend à ce que  $C, R, D$  soient invariants par translation du temps et donc fonctions seulement de  $t - t'$ .

L'intégrale fonctionnelle se réécrit en termes de  $C, R, D$  de la façon suivante :

$$\int \mathcal{D}C \mathcal{D}R \mathcal{D}D \exp(NS(C, R, D)) \quad (7.15)$$

---

<sup>2</sup>Nous avons calculé le logarithme de la moyenne de la trace. Tandis que la procédure correcte serait de calculer la moyenne du logarithme de la trace. Cependant, au moins dans le cas statique les deux procédures donnent lieu au même résultat.

où l'action  $S$  est égale à :

$$\begin{aligned}
S &= - \int_0^{t^*} dt (\partial_t R(t, t') + \lambda R(t, t') - TD(t, t'))|_{t'=t+} \\
&+ \frac{p}{4} \int_0^{t^*} dt dt' (D(t, t')C^{p-1}(t, t') + (p-1)R(t, t')R(t', t)C^{p-2}(t, t')) \\
&- \frac{\hat{\lambda}}{2} \int_0^{t^*} dt (C(t, t) - 1) + \frac{1}{2} \text{Tr} \ln M
\end{aligned} \tag{7.16}$$

et l'opérateur  $M$  s'écrit :

$$M = \begin{pmatrix} R(t, t') & C(t, t') \\ D(t, t') & R(t', t) \end{pmatrix}, \tag{7.17}$$

La valeur de  $\lambda$  est fixée et reliée à la valeur de l'énergie  $E_0$  (cf. 7.11) et la valeur de  $\hat{\lambda}$  est choisie pour que la contrainte sphérique  $C(t, t) = 1$  soit vérifiée. Dans la suite nous considérerons des temps d'ordre un par rapport à  $N$ , par conséquent l'intégrale (7.15) peut être effectuée par la méthode du col. En imposant que  $C, R, D$  doivent rendre stationnaire l'action  $S$  on obtient les trois équations suivantes :

$$\begin{aligned}
C'(\tau) &= -\lambda C(\tau) + 2TR(-\tau) + \frac{p}{2} \int_0^{t^*} dt'' C^{p-1}(t-t'')R(t'-t'') \\
&+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^{t^*} R(t-t'')C^{p-2}(t-t'')C(t''-t')dt''
\end{aligned} \tag{7.18}$$

$$\begin{aligned}
R'(\tau) &= -\lambda R(\tau) + 2TD(\tau) + \frac{p}{2} \int_0^{t^*} dt'' C^{p-1}(t-t'')D(t'-t'') \\
&+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^{t^*} dt'' C^{p-2}(t-t'')R(t-t'')R(t''-t') + \delta(\tau)
\end{aligned} \tag{7.19}$$

$$\begin{aligned}
-D'(\tau) &= -\lambda D(\tau) + \frac{p(p-1)}{2} \int_0^{t^*} dt'' D(t'-t'')R(t''-t)C^{p-2}(t-t'') \\
&+ \frac{p(p-1)}{2} \int_0^{t^*} dt'' D(t-t'')C^{p-2}(t-t'')R(t''-t') \\
&+ \frac{p(p-1)}{2} (p-2) \int_0^{t^*} dt'' R(t-t'')R(t''-t)R(t''-t')C^{p-3}(t-t'') - \hat{\lambda}R(\tau)
\end{aligned} \tag{7.20}$$

En injectant les solutions de ces équations dans  $S$  on obtient l'entropie configurationnelle (7.11). Il est intéressant de remarquer que ces équations deviennent celles étudiées pour la dynamique du modèle à  $p$ -spins sphériques [124, 25, 122, 164] si l'on considère des fonctions non invariant par rapport à des translation du temps et l'on impose  $D = \hat{\lambda} = 0$ . En fait  $D \neq 0$  ne permet pas de trouver une solution causale [161]. Pour cette raison, au début des études sur la dynamique, les solutions avec  $D$  non nul n'ont pas été considérées. Ensuite il est apparu que ces solutions sont reliées aux instantons de la théorie dynamique, mais jusqu'à maintenant très peu de résultats ont été obtenus concernant ce point [162, 163].

### 7.3.2 Caractéristiques de la solution dynamique et résultats

La solution des équations (7.18,7.19,7.20) est caractérisée par les propriétés suivantes :

1. elle est non causale ( $R(-\tau) \neq 0$  pour  $\tau > 0$ ) et est caractérisée par un  $D$  non nul.
2. elle satisfait l'invariance par translation du temps.
3. elle satisfait une généralisation (non causale) du théorème fluctuation-dissipation :

$$\frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} C(\tau) = R(-\tau) - R(\tau) \quad (7.21)$$

4. quand on la remplace dans l'action on obtient un résultat non nul (d'ordre  $N$ ).

Les propriétés (1) et (4) sont caractéristiques des instantons et sont reliées au fait qu'on regarde des événements rares par rapport aux solutions dynamiques classiques. De plus, le comportement de la solution pour des grandes valeurs de  $t^*$  est différent selon qu'il existe ou non des états (TAP) stables avec énergie  $E_0$  :

- s'il existe des états stables, alors la solution est du type :

$$\begin{aligned} C(\tau) &= C_c(\tau) + \frac{1}{t^*} \hat{C}(\tau), & R(\tau) &= R_c(\tau) + \frac{1}{t^*} (\hat{R}(\tau) + B/T) \\ D(\tau) &= \frac{1}{t^*} D_o(\tau) + \frac{1}{(t^*)^2} \hat{D}\left(\frac{\tau}{t^*}\right) \end{aligned}$$

où la fonction  $R_c(\tau)$  est causale, les fonctions  $\hat{C}, \hat{R}, \hat{D}$  sont d'ordre un seulement quand leur arguments sont d'ordre un et  $B$  est une constante. En particulier les fonction  $C_c(\tau)$  et  $R_c(\tau)$  correspondent à la relaxation à l'intérieur des états avec énergie  $E_0$  étudié en [122, 164]. Il est important de remarquer que les corrections en  $1/t^*$  ne peuvent pas être négligées quand on calcule la trace, parce que on intègre sur l'intervalle de temps  $(0, t^*)$  et donc elles peuvent donner une contribution importante.

- s'il n'existe pas des états stables, alors la solution est similaire à la précédente sauf que  $D$  acquiert une partie d'ordre un :

$$D(\tau) = D_o(\tau) + \frac{1}{(t^*)} \hat{D}\left(\frac{\tau}{t^*}\right)$$

et maintenant  $C(\tau)$  et  $R(\tau)$  ne vérifient plus les équations de "relaxation à l'intérieur d'un état" et il n'existe plus un régime de temps courts pour lequel  $R(\tau)$  est causal.

Nous avons vérifié que cette méthode (quand  $t^* \rightarrow \infty$ ) permet de retrouver la complexité , i.e. le logarithme divisé par  $N$  du nombre des configurations dynamiquement stables, qui est en général obtenue à travers des calculs statiques (en sommant sur les équations TAP, en utilisant l'Ansatz à deux groupes à la Bray et Moore ou la solution à un pas de brisure de la symétrie des répliques non-optimisée par rapport à  $m$  ou la méthode du potentiel). Pour

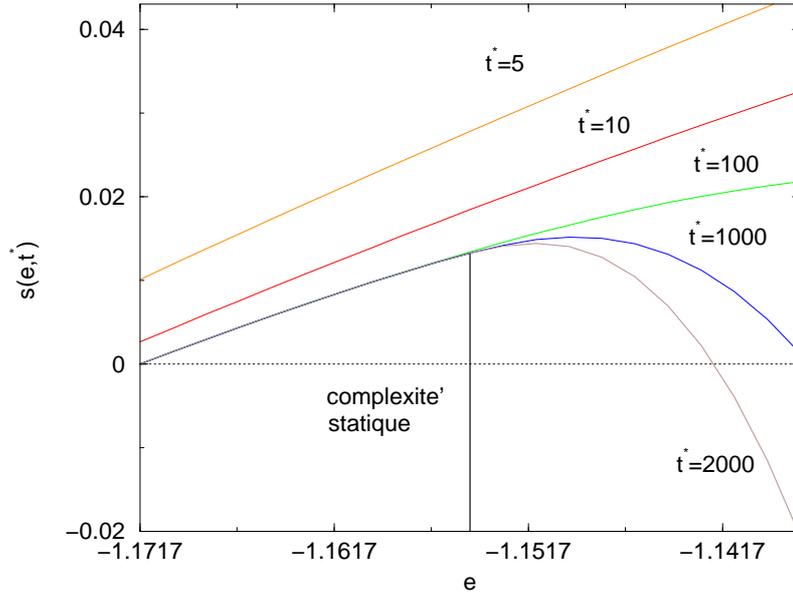


FIG. 7.2 – Logarithme divisé par  $N$  de la trace de l'opérateur d'évolution en fonction de la densité d'énergie  $e$  pour  $p = 3$  et différentes valeurs de  $t^*$  (de haut vers le bas  $t^* = 5, 10, 100, 1000, 2000$ ). Les différentes courbes convergent vers la complexité statique pour  $t^* \rightarrow \infty$ .

effectuer ce calcul nous avons décomposé la solution dynamique, qu'on notera de façon compacte  $Q(\tau; t^*) = (C(\tau; t^*), R(\tau; t^*), D(\tau; t^*))$ , en deux termes :  $Q(\tau; t^*) = Q_0(\tau; t^*) + Q_1(\tau; t^*)/t^*$ , où  $Q_0$  est égale à :

$$Q_0(\tau; t^*) = \left( C_c(\tau), R_c(\tau) + \frac{B/T}{t^*}, \frac{2C/T^2}{(t^*)^2} \right) \quad (7.22)$$

où  $B$  et  $C$  sont deux constantes, dont les valeurs peuvent être obtenues à partir des équations (7.18,7.19,7.20) :

$$\frac{B}{T} = \int_0^{t^*} d\tau (R(\tau) - R_c(\tau)) \quad \frac{2C}{T^2} = \int_0^{t^*} d\tau D(\tau)$$

Si l'on remplace  $Q$  dans l'action, le terme  $Q_1/t^*$  donne lieu à des contributions sous-dominantes quand  $t^* \rightarrow \infty$ , par conséquent la valeur de la complexité statique est égale à  $S(Q_0)$ .

De plus, à température zéro nous avons pu résoudre les équations (7.18,7.19,7.20) et obtenir le logarithme de la trace de l'opérateur d'évolution à énergie  $\mathcal{E}$  fixée pour un temps  $t^*$  quelconque. Le résultat est tracé en fig. 7.2 pour  $p = 3$  et son expression analytique est :

$$S(Q) = \sigma(\mathcal{E}) - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_p(\omega + p\mathcal{E}) \ln(1 - \exp(-t^*|\omega|)) + t^* \int_{-\infty}^0 d\omega \rho_p(\omega + p\mathcal{E}) \omega \quad (7.23)$$

où  $\sigma(\mathcal{E})$  coïncide avec le logarithme divisé par  $N$  du nombre de points de stationnarité de l'énergie potentielle ayant une densité d'énergie  $\mathcal{E}$  [134]; tandis que  $\rho_p(\omega + p\mathcal{E})$ , qui est la loi de Wigner centrée en  $-p\mathcal{E}$  et de largeur  $\sqrt{2p(p-1)}$ , coïncide avec la distribution des valeurs propres du hessien de l'énergie potentielle autour des points de stationnarité ayant une densité d'énergie  $\mathcal{E}$  [174]. Par conséquent, puisque que le spectre de l'opérateur de Fokker-Planck pour un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega$  est [172] :  $E_n = (n + 1/2)|\omega| - \omega/2$ , la formule (7.23) est la même que celle que l'on aurait obtenue en faisant une expansion harmonique de l'énergie autour de chaque point de stationnarité (en incluant ceux instables) et en traitant chaque point de stationnarité de façon indépendante.

### 7.3.3 Brisure de la symétrie des répliques à la Bray et Moore et brisure de supersymétrie.

Il y a vingt ans, pour analyser la phase de basse température du modèle SK, Bray et Moore [175] introduisirent un Ansatz, appelé à deux groupes, sur la matrice  $Q_{a,b}$  (cf. chapitre 2.). A première vue les résultats obtenus par ce type de brisure de la symétrie des répliques peuvent sembler étranges puisque :  $\lim_{n \rightarrow 0} \overline{Z^n} \neq 1$ . En fait, Bray et Moore montrèrent que cet Ansatz permet de calculer la complexité, en particulier ils obtinrent que pour le modèle SK  $\lim_{n \rightarrow 0} \ln \overline{Z^n} = N\sigma$ , où  $\sigma$  est la complexité [176]. De plus, pour d'autres modèles, la complexité fut calculée en sommant sur les solutions stables des équations TAP ([177], publication III) et ensuite il fut vérifié que l'Ansatz à la Bray et Moore redonnait bien le résultat correct. Néanmoins la raison pour laquelle ce type de Ansatz permet de calculer par la méthode des répliques le nombre d'états dynamiquement stables est restée obscure jusqu'à maintenant. La procédure dynamique utilisée dans la section précédente pour calculer la complexité nous a permis de dévoiler la signification de la brisure de la symétrie des répliques à la Bray et Moore et d'expliquer pourquoi elle permet de calculer la complexité.

En fait, en réécrivant la théorie des champs de MSR DJ en termes supersymétriques [172], toutes les fonctions à deux points  $C, R$  et  $D$  peuvent être englobées en [172, 178, 179] :

$$Q(1, 2) = \sum_{i=1}^N \langle S_i(1) S_i(2) \rangle \quad 1 = (T t_1, \bar{\theta}_1, \theta_1) \quad (7.24)$$

$$S_i(1) = s_i(t_1) + \bar{\theta}_1 \theta_1 \hat{s}_i(t_1) + \bar{c}_i(t_1) \theta_1 + \bar{\theta}_1 c_i(t_1) \quad (7.25)$$

où  $\bar{\theta}_1, \theta_1$  sont des variables de Grassmann et  $\bar{c}_i(t), c_i(t)$  sont les champs fermioniques.

La solution  $Q_0$ , qui replacée dans l'action  $S$  redonne la complexité, se réécrit dans cette notation de la façon suivante :

$$Q(1, 2) = Q_c(1, 2) + q + (\bar{\theta}_1 \theta_1 + \bar{\theta}_2 \theta_2) \frac{B/T}{t^*} + \bar{\theta}_1 \theta_1 \bar{\theta}_2 \theta_2 \frac{2C/T^2}{(t^*)^2} \quad (7.26)$$

$$Q_c(1, 2) = \left( 1 + \frac{1}{2} (\bar{\theta}_1 - \bar{\theta}_2) [\theta_1 + \theta_2 - (\theta_1 - \theta_2) \text{sign}(t_1 - t_2)] \frac{\partial}{\partial t_1} \right) (C_c(t_1 - t_2) - q)$$

où  $q$  est le paramètre d'Edwards et Anderson et coïncide avec la valeur asymptotique de  $C_c(\tau)$ . La fonction  $Q_c + q$  est invariant par supersymétrie [172], à l'inverse des deux autres termes en (7.26).

La forme de  $Q(1, 2)$  ressemble à celle de la matrice  $Q_{a,b}$ . En effet, l'Ansatz à deux groupes consiste en une matrice  $Q_{a,b}$  symétrique telle que <sup>3</sup> :

$$Q_{a,b} = 1 + \frac{B}{m} \quad a = b \leq m \quad (7.27)$$

$$Q_{a,b} = 1 - \frac{B}{m} \quad m < a = b \leq n \quad (7.28)$$

$$Q_{a,b} = q + \frac{B}{m} \quad a \neq b; \quad a, b \leq m \quad (7.29)$$

$$Q_{a,b} = q - \frac{B}{m} \quad a \neq b; \quad m < a, b \leq n \quad (7.30)$$

$$Q_{a,b} = q - \frac{C}{m^2} \quad a \leq m, \quad m < b \leq n \quad (7.31)$$

où il faut prendre les limites  $m \rightarrow \infty$  (qui rappelle la limite  $t^* \rightarrow \infty$ ) et  $n \rightarrow 0$  (qui rappelle la supersymétrie). En effectuant respectivement l'intégrale sur les champs ou sur les spins on se ramène à chercher la solution des équations d'extremisation d'une fonctionnelle de  $Q(1, 2)$  dans le cas dynamique (cf. eq. (7.16)) et de  $Q_{a,b}$  dans le cas statique (cf. eq. (3.5)). En remplaçant la solution des équations d'extremisation dans la fonctionnelle on obtient la valeur du logarithme divisé par  $N$  de l'intégrale de MSRDJ, dans le cas dynamique, ou de  $\overline{Z}^n$  dans le cas statique. Avec la notation supersymétrique les fonctionnelles dynamique et statique coïncident [178, 179] à moins d'un terme cinétique, qui est nul pour la solution (7.26). De plus, les deux opérateurs  $Q(1, 2)$  et  $Q_{a,b}$  se comportent de la même façon par rapport à la trace, la convolution ou le produit terme à terme. Par exemple on peut obtenir facilement les identités suivantes :

$$\sum_a f(Q_{a,a}) = \int d1 f(Q(1, 1)) = 2B$$

$$\sum_{a,b} f(Q_{a,b}) = \int d1 d2 f(Q(1, 2)) = 2(f'(1) - f'(q))B + f''(q)B^2 + 2f'(q)C$$

$$\text{Tr}_{a,b} \log Q = \text{Tr}_{1,2} \log Q = -2 \log(1 - q) + \log[(1 - q + B)^2 - 2qC]$$

Par conséquent le calcul statique par la méthode des répliques, qui utilise l'Ansatz à deux groupes, est "isomorphe" à celui dynamique. Ceci explique pourquoi la brisure de la symétrie des répliques à la Bray et Moore permet de calculer la complexité ; en effet elle n'est rien d'autre qu'une réécriture par la méthode de réplique du calcul dynamique pour  $t^* \rightarrow \infty$ . Il y a quand même deux différences importantes entre les deux approches. D'abord

<sup>3</sup>En général l'Ansatz à deux groupes a été toujours appliqué à des modèles avec des spins d'Ising donc les termes diagonaux de la matrice  $Q_{a,b}$  n'étaient pas présents. Les équations (7.27,7.28) correspondent à une généralisation de l'Ansatz de Bray et Moore pour un système avec des spins sphériques.

, dans le cas dynamique on n'a pas la liberté de choisir entre les différents Ansätze celui qui redonne la complexité, mais il faut simplement résoudre les équations du mouvement. Ceci rend la procédure dynamique non ambiguë au contraire de celle statique. Ensuite, il pourrait se passer que même s'il existe une solution aux équations "statiques" fermées sur les constantes  $q, B, C$ , il n'y aucune solution dynamique correspondante à ces valeurs. Dans ce cas, le calcul statique prédirait un nombre exponentiel d'états stables quand le calcul dynamique, qui est plus correct, ne le ferait pas<sup>4</sup>.

## 7.4 Conclusion

La dynamique de certains systèmes, comme les liquides surfondus, les verres de spins ou les parois magnétiques, est caractérisée par une séparation d'échelles de temps. D'une part il y a des échelles de temps courtes souvent interprétées en terme de dynamique d'équilibre de degrés de liberté "rapides", qui correspondent par exemple à la dynamique à l'intérieur d'une cage pour les liquides surfondus ou les fluctuations à l'intérieur des parois pour la croissance de domaines. D'autre part, il y a aussi des échelles de temps longues, qui sont responsables de la dynamique lente et hors équilibre du système, qui correspondent par exemple aux rearrangements structurelles pour les liquides surfondus ou au mouvement des parois pour la croissance de domaines. Dans le cas des liquides surfondus, l'analogie avec les verres de spins discontinus et les simulations numériques semblent indiquer que le mouvement rapide correspond à une dynamique d'équilibre à l'intérieur d'un bassin ou d'un état métastable, tandis que le mouvement lent est dû au fait que le temps nécessaire pour sortir d'un bassin (grâce à un saut d'une barrière énergétique ou entropique) devient de plus en plus grand plus le temps passe, ceci donne lieu au phénomène dit du vieillissement. Le concept de bassin joue donc un rôle crucial dans ce scénario. Néanmoins, jusqu'à maintenant l'image qu'on en avait était assez insatisfaisante. En effet d'une part pour avoir une intuition on utilisait les structures inhérentes, qui peuvent donner une image fidèle seulement à temps très courts (et même dans ce régime de temps elles ne semblent pas être cohérentes avec le scénario proposé parce qu'elles prédiraient une température de transition nulle), et d'autre part on avait à disposition, grâce à l'analyse des modèles de champ moyen, le concept d'état TAP ou état pur qui est pertinent seulement si les bassins ont un temps de vie infini. Dans ce chapitre nous avons cherché à combler cette lacune. Nous avons rappelé la définition mathématique d'état métastable (de bassin) [167] et nous avons proposé, en s'inspirant de ces résultats mathématiques, une méthode pour calculer la valeur moyenne des observables en faisant une moyenne uniforme sur les états métastables. Ceci devrait permettre, si l'hypothèse ergodique à la Edwards est correcte (ce qui reste un problème ouvert!), d'avoir une description pseudo-thermodynamique de la dynamique à grands temps d'un système

---

<sup>4</sup>Dans le preprint I nous avons présenté un argument heuristique qui suggère que cette différence entre le calcul dynamique et statique des états stable pourrait survenir pour le modèle SK. Cette différence pourrait permettre de comprendre pourquoi le comportement dynamique est si différent entre les modèles caractérisés par une brisure complète de la symétrie de répliques, comme le SK, et ceux caractérisés par une brisure à un pas, comme le modèle à p-spins sphériques.

vitreux fragile. De plus, l'application de ces idées au modèle à  $p$ -spins sphériques nous a permis de dévoiler quelles sont les propriétés de la solution dynamique qui interviennent dans ce type de calculs. Cette solution est d'un type nouveau par rapport à celles étudiées jusqu'à maintenant et montre des propriétés caractéristiques des instantons. L'étude qui nous avons menée peut se révéler utile en vue d'une application de la même méthode à des systèmes en dimension finie ou de l'étude des processus activés dans les modèles de champ moyen. Enfin, nous avons établi un lien entre le calcul dynamique et la brisure de la symétrie de répliques à la Bray et Moore, qui a permis de comprendre la signification et les limites de l'Ansatz à deux groupes.

# Chapitre 8

## Conclusion

Les systèmes désordonnés sur des réseaux complètement connectés sont très intéressants d'un point de vue théorique parce qu'ils sont assez simples pour être étudiés analytiquement et en même temps exhibent des comportements intéressants et inattendus. En particulier le scénario physique, qui correspond à la brisure de la symétrie des répliques, est très riche et différent par rapport à ce qu'on trouve pour les systèmes ordonnés et il est difficile de penser qu'il aurait pu être obtenu d'une façon autre que à travers une solution exacte.

Cependant, ces systèmes ne contiennent pas certains ingrédients pertinents et exhibent des simplifications drastiques par rapport à leurs correspondants en dimension finie. Par exemple, comme nous avons souligné aux chapitres 2 et 5, les minima locaux de l'énergie coïncident avec la limite de température nulle des états purs pour les modèles complètement connectés. Cela n'arrive clairement pas pour les modèles désordonnés en dimension finie, pour lesquels le paysage d'énergie est en général très irrégulier et caractérisé par un nombre exponentiel, dans le nombre de degrés de liberté, de minima locaux, sans qu'il y ait un grand nombre d'états purs.

Pour comprendre comment les résultats obtenus grâce à l'analyse des modèles complètement connectés s'étendent en dimension finie, il faut d'une part réussir à tenir compte des effets physiques qui sont absents de cette analyse mais qui sont pertinents pour les systèmes réels, comme par exemple les événements rares dûs aux fluctuations spatiales du désordre. D'autre part il faut aussi comprendre comment la levée des simplifications, caractéristiques des modèles complètement connectés, change l'image physique obtenue à travers la solutions de ces modèles. Par exemple, la majorité des états purs qu'on trouve dans l'analyse de basse température de ces systèmes, disparaissent en dimension finie ; en général on dit de façon un peu ambiguë qu'ils deviennent métastables. Il est donc crucial de savoir comment ceci va changer la description physique et de développer des techniques qui puissent permettre d'obtenir des prédictions qualitatives et quantitatives.

Le travail présenté dans le chapitre 7 est un point de départ dans cette direction, mais beaucoup reste encore à faire : de nombreuses hypothèses nécessitent une justification ultérieure et différents points méritent une analyse plus approfondie. De plus, je pense qu'une analyse des processus activés, déjà dans le cadre du champ moyen, est cruciale pour améliorer la compréhension de la dynamique vitreuse. D'un point de vue technique,

l'étude des processus activés (en champ moyen) se traduit en une analyse d'événements rares, et donc de solutions instantoniques des équations du mouvement. Les propriétés de la solution dynamique trouvée au chapitre 7 seront sûrement d'aide dans la recherche de la solution associée aux processus activés.

En outre, je pense que les systèmes à connectivité finie peuvent être très utiles afin d'étendre l'image physique obtenue à travers l'étude des systèmes complètement connectés. Dans cette thèse je me suis principalement concentré sur les aspects statiques des systèmes à connectivité finie. Un prolongement naturel concerne les aspects dynamiques. D'une part je pense qu'une étude de la dynamique hors-équilibre pourrait se révéler très intéressante. Ce travail devrait pouvoir être effectué en généralisant la méthode variationnelle et l'approximation à un défaut, que nous avons développées dans cette thèse, au cas dynamique. D'autre part, concernant les problèmes d'optimisation, je pense que le lien entre la dynamique de certains algorithmes (algorithmes stochastiques de recherche locale) et les systèmes de spins quantiques dilués (cf. chapitre 3) pourrait se révéler très fécond et mérite une analyse approfondie.

Enfin, un prolongement intéressant du travail sur les équations TAP dynamiques concerne les verres de spins quantiques en champ moyen, qui ont reçu beaucoup d'attention dans les dernières années [180]. Jusqu'à maintenant l'analyse de ces modèles à été effectuée par la méthode des répliques ou en étudiant leur dynamique hors-équilibre. Je pense qu'une approche TAP permettrait probablement d'obtenir une image physique plus intuitive, comme cela arrive pour les systèmes classiques. Techniquement, l'approche TAP quantique peut être effectuée par la même méthode développée dans la publication V, en exploitant l'écriture de la fonction de partition "quantique" en terme d'une intégrale fonctionnelle, où  $\beta$  joue le rôle du temps.

# Bibliographie

- [1] K. Binder and A.P. Young. Spin Glasses. *Rev. Mod. Phys.*, 58 :801–976, 1986.
- [2] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro. *Spin glass theory and beyond*. World Scientific, 1993.
- [3] K.H. Fisher and J.A. Hertz. *Spin glasses*. Cambridge University Press, 1991.
- [4] V.S. Dotsenko, M.V. Feigel'man, and L.B. Ioffe. *Spin glasses and related problems*. Soviet Scientific Reviews, vol 15 (Harmann), 1990.
- [5] Lifshitz. The energy spectrum of disordered systems. *Adv. Phys.*, 13 :483–536, 1964.
- [6] R.B. Griffiths. Nonanalytical behavior above the critical point in a random ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 23 :17–19, 1969.
- [7] A.J. Bray. Dynamics of dilute magnets above  $t_c$ . *Phys. Rev. Lett.*, 60 :720–723, 1988.
- [8] M. Randeira, J.P. Sethna, and R.G. Palmer. Low frequency relaxation in Ising spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 54 :1321–1325, 1985.
- [9] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F*, 5 :965–974, 1975.
- [10] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35 :1792–1796, 1975.
- [11] J.-P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mézard. *Spin glasses and random fields*, pages 161–254. World Scientific, 1998.
- [12] C. De Dominicis, I. Kondor, and T. Temesvari. *Spin glasses and random fields*, pages 119–160. World Scientific, 1998.
- [13] A.J. Bray and M. Moore. *Proceedings of the Heidelberg Colloquium on Glassy dynamics*. Springer, 1987.
- [14] D.S. Fisher and D.A. Huse. Equilibrium behavior of the spin-glass ordered phase. *Phys. Rev. B*, 38 :386–409, 1988.
- [15] D.S. Fisher and D.A. Huse. Nonequilibrium dynamics of spin glasses. *Phys. Rev. B*, 38 :373–385, 1988.
- [16] G.J.M. Koper and H.J. Hilhorst. A domain theory for linear and nonlinear aging effects in spin glasses. *J. Physique*, 49 :429–443, 1988.
- [17] M.J. Thill and H.J. Hilhorst. Theory of critical state of low dimensional spin glass. *J. Physique I*, 6 :67–95, 1996.

- [18] J. Houdayer and O. Martin. A geometrical picture for finite dimensional spin glasses. *Eur. Phys. Lett.*, 49 :794–800, 2000.
- [19] R. Abou-Chacra, P.W. Anderson, and D.J. Thouless. A selfconsistent theory of localization. *J. Phys. C*, 6 :1734–1752, 1973.
- [20] J.D. Miller and B. Derrida. Weak disorder expansion for the Anderson model on a tree. *J. Stat. Phys.*, 75 :357–388, 1994.
- [21] A. J. Bray and D. Huifang. Griffiths singularities in random magnets : Results for a soluble model. *Phys. Rev. B*, 40 :6980–6986, 1989.
- [22] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr., and M.P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220 :671–680, 1983.
- [23] J. Vannimenus and M. Mézard. On the statistical mechanics of optimization problems. *J. Physique Lett.*, 45 :1145–1153, 1984.
- [24] A.J. Bray. Theory of phase ordering kinetics. *Adv. in Phys.*, 43 :357–459, 1994.
- [25] L.F. Cugliandolo and J. Kurchan. Analytical solutions of the off-equilibrium of a long-range spin glass model. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :173–177, 1993.
- [26] A. Barrat. The p-spin spherical spin glass model. *cond-mat/9701031*, 1997.
- [27] A. Barrat. *Quelques aspects de la dynamique hors d'équilibre des verres de spin*. PhD thesis, Paris VI, 1996.
- [28] L. Viana and A.J. Bray. Phase diagrams for dilute spin glasses. *J. Phys. C*, 18 :3037–3051, 1985.
- [29] M. Mézard and G. Parisi. Replicas and optimization. *J. Physique Lett.*, 46 :771–778, 1985.
- [30] H. Orland. Mean-field theory for optimization problems. *J. Physique Lett.*, 46 :763–770, 1985.
- [31] C. De Dominicis and P. Mottishaw. Replica symmetry breaking in weak connectivity systems. *J. Phys. A*, 20 :L1267–L1273, 1987.
- [32] R. Monasson. Some remarks on hierarchical replica symmetry breaking in finite-connectivity systems. *Phil. Mag. B*, 77 :1515–1521, 1998.
- [33] R. Monasson. Optimisation problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin-glasses. *J. Phys. A*, 31 :513–529, 1998.
- [34] P. Erdős and A. Rényi. On random graphs. *Publicationes Mathematicae*, 6 :290–297, 1959.
- [35] B. Bollobas. *Modern Graph Theory*. NY Springer-Verlag, 1998.
- [36] M. Karonsky and T. Luczak. Random hypergraphs. *Combinatorics*, 2 :283–293, 1993.
- [37] J.R.L. Almeida and D.J. Thouless. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick Solution of a Spin Glass Model. *J. Phys. A*, 11 :983–990, 1978.

- [38] R.R.P. Singh and M. Fisher. Short-range Ising spin glasses in general dimension. *J. Appl. Phys.*, 63 :3994–3996, 1988.
- [39] E. Marinari, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, J. Ruiz-Lorenzo, and F. Zuliani. Replica Symmetry Breaking in short range spin glasses : A review of the theoretical foundations and of the numerical evidence. *cond-mat/9906076*, 1999.
- [40] C.N. Yang and T.D. Lee. Statistical theory of equations of states and phase transitions. I Theory of condensation. *Phys. Rev.*, 87 :404–410, 1952.
- [41] C.N. Yang and T.D. Lee. Statistical theory of equations of states and phase transitions. II Lattice gases and Ising model. *Phys. Rev.*, 87 :411–417, 1952.
- [42] A. Barrat and R. Zecchina. Time scale separation and heterogeneous off-equilibrium dynamics in spin models over random graphs. *Phys. Rev E*, 59 :R1299–R1302, 1999.
- [43] M.D. Erdinger, C. A. Angell, and S.R. Nagel. Supercooled liquids and glasses. *J. Phys. Chem.*, 100 :13200–13212, 1996.
- [44] W. Kob, C. Donati, S.J. Plimpton, P.H. Poole, and S.C. Glotzer. Dynamical heterogeneities in a supercooled Lennard-Jones liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :2827–2831, 1998.
- [45] J. M. Luck. *Systèmes désordonnés unidimensionnels*. Collection Aléa-Saclay, CEA, 1992.
- [46] I. Kanter and H. Sompolinsky. Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :164–168, 1987.
- [47] D.J. Thouless. Spin glass on a Bethe lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :1082–1086, 1986.
- [48] R. Ettelaie and M.A. Moore. Residual entropy and simulated annealing. *J. Physique. Lett.*, 46 :893–900, 1985.
- [49] D.A. Huse and D.S. Fisher. Pure states in spin glasses. *J. Phys. A*, 20 :L997–L1003, 1987.
- [50] A. Bovier and J. Frolich. A heuristic theory of the spin glass phase. *J. Stat. Phys.*, 44 :347–391, 1986.
- [51] C.M. Newman and D.L. Stein. Metastable states in spin glasses and disordered ferromagnets. *cond-mat/9908435*, 1999.
- [52] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, and L. Troyansky. Determining computational complexity from characteristic ‘phase transitions’. *Nature*, 400 :133–138, 1999.
- [53] Y. Fu and P. Anderson. Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimisation. *J. Phys. A*, 19 :1605–1620, 1986.
- [54] K.Y.M. Wong, D. Sherrington, P. Mottishaw, R. Dewar, and C. De Dominicis. Graph partitioning and dilute spin glasses : the minimum cost solution. *J. Phys. A*, 21 :L99–L105, 1988.
- [55] H. Rieger. *Lecture Notes in physics. Frustrated systems : ground state properties via combinatorial optimization*. Springer-Verlag, 1997.

- [56] I. Bieche, R. Maynard, R. Rammal, and J. P. Uhry. On the ground states of the frustration model of a spin glass by a matching method of graph theory. *J. Phys. A*, 13 :2553–2576, 1980.
- [57] J.C. Angles d’Auriac, M. Preissmann, and R. Rammal. The random field Ising model : algorithm complexity and phase transition. *J. Physique. Lett.*, 46 :173–180, 1985.
- [58] M.R. Garey and D.S. Johnson. *Computers and intractability : A guide to the theory of NP-Completeness*. W.H. Freeman and Company, 1979.
- [59] S.A. Cook. The complexity of theorem-proving procedures. *Proc. 3rd Acm symposium on Theory of Computing*, pages 151–158, 1971.
- [60] F. Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *J. Phys. A*, 15 :3241–3253, 1982.
- [61] C. Bachas. Computer intractability of the frustration model of a spin glass. *J. Phys. A*, 17 :L709–L712, 1984.
- [62] B. Selman. *Course given at the ICTP school on NP-hardness and Phase Transitions*, 1999.
- [63] R. Monasson and R. Zecchina. Entropy of the K-Satisfiability Problem. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :3881–3885, 1996.
- [64] A.Z. Broder, A.M. Frieze, and E. Upfal. *Proc. 4th Annual ACM-SIAM Symp, on Discrete Algorithms*, page 322, 1993.
- [65] B. Selman and S. Kirkpatrick. Critical behavior in the satisfiability of random boolean expressions. *Science*, 264 :1297–1301, 1994.
- [66] B. Selman and S. Kirkpatrick. Critical behavior in the computational cost of satisfiability testing. *Artificial intelligence*, 81 :101–122, 1996.
- [67] M. Davis and H. Putnam. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 7 :201, 1960.
- [68] *Artificial intelligence*, 81, 1996.
- [69] Martin Weigt and Alexander Hartmann. How many guards needs a museum - an easy-hard transition in vertex covering of random graphs. *cond-mat/0001137*, 2000.
- [70] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, and L. Troyansky. 2+p-sat : Relation of typical-case complexity to the nature of the phase transition. *Random Structures and Algorithms*, 15 :414–436, 1999.
- [71] A. Goerdt. *7th Int. Symp. on Foundations of computer science*, page 264, 1992.
- [72] M.F. Plass B. Aspvall and R.E. Tarjan. *Inf. Process. Lett.*, 8 :121, 1979.
- [73] B. Bollobas, C. Borgs, J. Chayes, J.H. Kim, and D.B. Wilson. The scaling window of the 2-sat transition. *To appear in Random Structure and Algorithms*, *arXiv :math.CO/9909031*.
- [74] A. Frieze and S. Suen. Analysis of two simple heuristics on a random instance of K-SAT. *J. of Algorithms*, 20 :312–335, 1996.

- [75] O. Dubois. *Theoretical Computer Science*, 81 :49, 1991.
- [76] O. Dubois. *Talk given at the ICTP conference NP-hardness and Phase Transitions*, 1999.
- [77] D. Achlioptas, L. Kirousis, E. Kranakis, and D. Krizanc. Rigorous results for random 2+p-sat. *preprint, to be published on Theor. Compo. Science*, 2000.
- [78] R. Monasson and R. Zecchina. Statistical mechanics of the random K-SAT model. *Phys. Rev. E*, 56 :1357–1370, 1997.
- [79] R. Monasson and R. Zecchina. Tricritical points in random combinatorics : the 2+p-sat case. *J. Phys. A*, 31 :9209–9217, 1998.
- [80] P. Mottishaw and C. De Dominicis. On the stability of randomly frustrated systems with finite connectivity. *J. Phys. A*, 20 :L375–L379, 1987.
- [81] K.Y.M. Wong and D. Sherrington. Intensively connected spin glasses : toward a replica-symmetry-breaking solution of the ground state. *J. Phys. A*, 21 :L459–L466, 1988.
- [82] A. Crisanti and H. Sommers. The spherical p-spin interaction spin glass model : the statics. *Z. Phys. B*, 87 :341, 1992.
- [83] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. Connections between some kinetic and equilibrium theories of the glass-transition. *Phys. Rev. A*, 35 :3072–3080, 1987.
- [84] T.R. Kirkpatrick and D. Thirumalai. Random solutions from a regular density functional hamiltonian : a static and dynamical theory for the structural glass-transition. *J. Phys. A*, 22 :L149–L155, 1989.
- [85] T.R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, and P.G. Wolynes. Scaling concepts for the dynamics of viscous liquids near an ideal glassy state. *Phys. Rev. A*, 40 :1045–1054, 1989.
- [86] R. Monasson. The structural glass transition and the entropy of the metastable states. *Phy. Rev. Lett.*, 75 :2847, 1995.
- [87] S. Cocco and R. Monasson. Phase diagrams for algorithms indicate where and how much problems are hard to solve. *preprint*, 2000.
- [88] F. Ricci and R. Zecchina. *Talk given at the ICTP workshop on graph theory and statistical physics*, 2000.
- [89] M. Budinich. *In preparation*, 2000.
- [90] P. Svenson and M.G. Nordal. Relaxation in graph coloring and satisfiability problems. *Phys. Rev. E*, 59 :3983–3999, 1999.
- [91] J. Brooke, D. Bitko, T.F. Rosenbaum, and G. Aeppli. Quantum annealing of a disordered ferromagnet. *Science*, 284 :779–781, 1999.
- [92] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phy. Rev.*, 109 :1492–1505, 1958.
- [93] D.J. Thouless. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, 13 :93–142, 1974.

- [94] D.J. Thouless. Introduction to disordered systems. In *Les Houches, Session XLIII, 1984. Critical Phenomena, random systems, gauge theories*, pages 681–722. Elsevier Science Publication, 1986.
- [95] B. Souillard. Waves and electrons in inhomogeneous media. In *Les Houches, Session XLVI, 1986. Chance and Matter*, pages 305–380. Elsevier Science Publication, 1987.
- [96] A.L. Altschuler and B.D. Simons. *Les Houches, Session LXI, 1994. Mesoscopic quantum physics*. Elsevier Science Publication, 1995.
- [97] T. Guhr, A. Muller-Groeling, and H.A. Weidenmuller. Random-matrix theories in quantum physics : common concepts. *Phys. Rep.*, 299 :189–425, 1998.
- [98] C. Liu and S.R. Nagel. Sound in granular material : disorder and nonlinearity. *Phys. Rev. B*, 48 :15646–15650, 1993.
- [99] X. Jia, C. Caroli, and B. Velicky. Ultrasound propagation in externally stressed granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :1863–1867, 1999.
- [100] T. Keyes. Instantaneous Normal Mode Approach to liquid state dynamics. *J. Phys. Chem.*, 101 :2921–2930, 1997.
- [101] M. Mézard and G. Parisi. Thermodynamics of Glasses : A First Principles Computation. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :747–751, 1999.
- [102] I.A. Campbell. Random walks on a closed loop and spin glass relaxation. *J. Physique Lett.*, 46 :L1159–L1162, 1985.
- [103] S. Feng and D. Sornette. Can sound be localized in granular media? *Phys. Lett. A*, 184 :127–130, 1993.
- [104] H.M. Jaeger and S. R. Nagel. Physics of the granular state. *Science*, 255 :1523–1531, 1992.
- [105] A. Drescher and G. De Josselin De Jong. Photoelastic verification of a mechanical model for the flow of a granular material. *J. Mech. Phys. Solids*, 20 :337–351, 1972.
- [106] A.J. Bray and G.J. Rodgers. Diffusion in a sparsely connected space : A model for glassy relaxation. *Phys. Rev B*, 38 :11461–11470, 1988.
- [107] A.D. Mirlin and Y.V. Fyodorov. Universality of level correlation function of sparse random matrices. *J. Phys. A*, 24 :2273–2286, 1991.
- [108] M.L. Mehta. *Random Matrices and the statistical theory of energy levels*. Academic Press, 1967.
- [109] G.J. Rodgers and C. De Dominicis. Density of states of sparse random matrices. *J. Phys. A*, 23 :1567–1573, 1990.
- [110] Y.V. Fyodorov and A.D. Mirlin. On the density of states of sparse random matrices. *J. Phys. A*, 24 :2219–2223, 1991.
- [111] A. Kamenev and M. Mézard. Wigner-Dyson statistics from the replica method. *J. Phys. A*, 32 :4351–4373, 1999.
- [112] A. Cavagna, I. Giardina, and G. Parisi. Analytic computation of the instantaneous normal modes spectrum in low-density liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :108–111, 1999.

- [113] M.H. Cohen and E.N. Economou. Existence of mobility edges in Anderson's model for random lattices. *Phys. Rev. B*, 5 :2931–2948, 1971.
- [114] T. Morita and K. Hiroike. A new approach to the theory of classical fluids III. *Prog. Theor. Phys.*, 25 :537–578, 1961.
- [115] C.A. Angell. Formation of glasses from liquid and biopolymers. *Science*, 267 :1924–1934, 1995.
- [116] J. Jäckle. Models of the glass transition. *Rep. Prog. Phys.*, 49 :171–231, 1986.
- [117] Gotze. Recent tests of the mode coupling theory for the glassy dynamics. *J. Phys. C*, pages A1–A45, 1999.
- [118] W. Kob. Computer simulations of Supercooled Liquids and Glasses. *J. Phys. C*, 11 :R85–R115, 1999.
- [119] G. Tarjus and D. Kivelson. The viscous slowing down of supercooled liquids and the glass transition : Phenomenology, concepts, and models. *cond-mat/0003368*, 2000.
- [120] B. Derrida. Random-energy Model : An exactly solvable model of disordered system. *Phys. Rev. B*, 24 :2613–2626, 1981.
- [121] D.J. Gross and M. Mézard. The simplest spin glass. *Nucl. Phys. B*, 240 :431–451, 1984.
- [122] A. Barrat, R. Burioni, and M. Mézard. Dynamics within metastable states in a mean field spin glass. *J. Phys. A*, 29 :L81–L87, 1996.
- [123] J.-P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mézard. Mode-coupling approximations, glass theory and disordered systems. *Physica A*, 226 :243, 1996.
- [124] A. Crisanti, H. Horner, and H.-J. Sommers. The spherical p-spin interaction spin glass model : the dynamics. *Z. Phys. B*, 92 :257–271, 1993.
- [125] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and L. Peliti. Energy flow, partial equilibration and effective temperatures in systems with slow dynamics. *Phys. Rev. E*, 55 :3898–3914, 1997.
- [126] G. Parisi. Off-equilibrium fluctuation-dissipation relation in fragile glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :3660–3664, 1997.
- [127] W. Kob and J.-L. Barrat. Fluctuations, response and aging dynamics in a simple glass-forming liquid out of equilibrium. *cond-mat/9905248*, 1999.
- [128] R. Di Leonardo, L. Angelani, G. Parisi, and G. Ruocco. Off-equilibrium effective temperature in monatomic Lennard-Jones glass. *cond-mat/0001311*, 2000.
- [129] A. Crisanti and F. Ritort. Equilibrium and aging dynamics of simple models for glasses. *cond-mat/9912207*, 2000.
- [130] F.H. Stillinger and T.A. Weber. Packing structures and transitions in liquids and solids. *Science*, 225 :983–989, 1984.
- [131] W. Kob, F. Sciortino, and P. Tartaglia. Aging as dynamics in configuration space. *cond-mat/9905090*, 1999.

- [132] D.J. Thouless, P.W. Anderson, and R.G. Palmer. Solution of solvable model of a spin glass. *Phil. Mag.*, 35 :593–601, 1977.
- [133] C. De Dominicis and A.P. Young. Weighted averages and order parameter for the infinite range Ising spin glass. *J. Phys. A*, 16 :2063–2075, 1983.
- [134] H.-J. Sommers A. Crisanti. On the TAP approach to the spherical p-spin SG model. *J. Physique I*, 5 :805–813, 1995.
- [135] J.-P. Bouchaud and M. Mézard. Self induced quenched disorder : a model for the glass transition. *J. Physique I*, 4 :1109–1114, 1994.
- [136] E. Marinari, G. Parisi, and F. Ritort. Replica field theory for deterministic models : I Binary sequences with low autocorrelation. *J. Phys. A*, 27 :7615–7646, 1994.
- [137] E. Marinari, G. Parisi, and F. Ritort. Replica field theory for deterministic models : II A non random spin glass with glassy behaviour. *J. Phys. A*, 27 :7647–7668, 1994.
- [138] M. Mézard and G. Parisi. A first principle computation of the thermodynamics of glasses. *J. Chem. Phys.*, 111 :1076–1095, 1999.
- [139] M. Cardenas, S. Franz, and G. Parisi. Constrained Boltzmann-Gibbs measures and effective potential for glasses in hypernetted chain approximation and numerical simulations. *J. Chem. Phys.*, 110 :1726–1734, 1999.
- [140] T. Li. Structure of metastable states in a random Ising chain. *Phys. Rev. B*, 24 :6579–6587, 1981.
- [141] F.H. Stillinger. Supercooled liquids, glass transitions, and the Kauzmann paradox. *J. Chem. Phys.*, 88 :7818–7825, 1988.
- [142] M. Mézard. First Steps in Glass Theory. *cond-mat/0005173*, 2000.
- [143] D.R. Bowman and K. Levin. Spin glass theory in the Bethe approximation : insights and problems. *Phys. Rev. B*, 25 :3438–3441, 1982.
- [144] S. Franz, M. Mezard, G. Parisi, and L. Peliti. The response of glassy systems to random perturbations : A bridge between equilibrium and off-equilibrium. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :1758–1762, 1998.
- [145] Landscape paradigms in physics and biology. *Physica D*, 107 :117–437, 1997.
- [146] L.F. Cugliandolo and J. Kurchan. Weak ergodicity breaking in mean-field-spin-glass models. *Phyl. Mag. B*, 71 :501–514, 1995.
- [147] J. Kurchan and L. Laloux. Phase space geometry and slow dynamics. *J. Phys. A*, 29 :1929–1948, 1996.
- [148] R. J. Glauber. Time dependent statistics of the Ising model. *J. Math. Phys.*, 4 :294–307, 1963.
- [149] R. Melin. Glauber dynamics in a zero magnetic field and eigenvalue spacing statistics. *J. Physique I*, 6 :469–492, 1996.
- [150] H. Yoshino, K. Hukushima, and H. Takayama. Relaxational modes and aging in the Glauber dynamics of the Sherrington-Kirkpatrick model. *Prog. Theor. Phys.*, supplement No.126 :107–110, 1997.

- [151] Th.W. Ruijgrok and J.A. Tjon. Critical slowing down and non-linear response in an exactly solvable model. *Physica*, 65 :539–565, 1972.
- [152] J.J. Hopfield. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 79 :2554–2558, 1982.
- [153] D.J. Amit. *Modeling brain function*. Cambridge University Press, 1989.
- [154] D.C. Mattis. Solvable spin system with random interactions. *Phys. Lett. A*, 56 :421–422, 1976.
- [155] A. Auerbach. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer, 1998.
- [156] P.C. Martin, E.D. Siggia, and H.A. Rose. Statistical dynamics of classical systems. *Phys. Rev. A*, 8 :423–437, 1973.
- [157] C. De Dominicis. Techniques de renormalisation de la théorie des champs et dynamique des phénomènes critiques. *J. de Physique*, 37 :C1–247, C1–253, 1976.
- [158] H.-K. Janssen. On a lagrangean for classical field dynamics and renormalization group calculations of dynamical critical properties. *Z. Phys. B*, 23 :377–380, 1976.
- [159] T. Plefka. Convergence condition of the tap equations for the infinite-ranged spin-glass model. *J. Phys. A*, 15 :1971–1978, 1982.
- [160] A. Georges and J. Yedidia. How to expand around mean-field-theory using high-temperature expansion. *J. Phys. A*, 24 :2173–2192, 1991.
- [161] H. Sompolinsky and A. Zippelius. Relaxational dynamics of the Edwards-Anderson model and the mean field theory of spin glasses. *Phys. Rev. B*, 25 :6860–6975, 1982.
- [162] A.V. Lopatin and L.B. Ioffe. Instantons in the Langevin dynamics : an application to spin glasses. *Phys. Rev. B*, 60 :6412–6419, 1999.
- [163] A.V. Lopatin and L.B. Ioffe. Barriers in the p-spin interacting spin-glass model. The dynamical approach. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4208–4212, 1999.
- [164] S. Franz and G. Parisi. Recipes for metastable states in spin glasses. *J. Physique I*, 5 :1401–1415, 1995.
- [165] J.P. Bouchaud. Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems. *J. Physique I*, 2 :1705–1713, 1992.
- [166] A. Barrat, R. Burioni, and M. Mézard. Ageing classifications in glassy dynamics. *J. Phys. A*, 29 :1311–1330, 1996.
- [167] B. Gaveau and L.S. Schulman. Theory of non equilibrium first order phase transitions for stochastic dynamics. *J. Math. Phys.*, 39 :1517–1533, 1998.
- [168] W. Kob and H.C. Anderson. Kinetic lattice-gas model of cage effects in high-density liquids and a test of mode-coupling theory of the ideal-glass transition. *Phys. Rev. E*, 48 :4364–4377, 1993.
- [169] J. Kurchan, L. Peliti, and M. Sellitto. Aging in lattice-gas models with constrained dynamics. *Europhys. Lett.*, 39 :365–370, 1997.

- [170] A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto, and M. Sellitto. Edwards Ensembles : Thermodynamic Ideas for Granular Media. *preprint, cond-mat/0006140*, 2000.
- [171] G. Parisi. *Statistical field theory*. Frontiers in physics, Addison-Wesley, 1988.
- [172] J. Zinn-Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarendon Press, Oxford, 1997.
- [173] S.F. Edwards and R.B.S. Oakeshott. Theory of powders. *Physica A*, 157 :1080–1090, 1989.
- [174] A. Cavagna, I. Giardinà, and G. Parisi. On the stationary points of the TAP free energy. *Phys. Rev. B*, 57 :11251–11257, 1998.
- [175] A.J. Bray and M. Moore. Replica symmetry breaking in spin glass theories. *Phys. Rev. Lett.*, 41 :1068–1072, 1978.
- [176] A.J. Bray and M. Moore. Broken replica symmetry and metastable states in spin glasses. *J. Phys. C*, 13 :L907–L912, 1980.
- [177] G. Parisi and M. Potters. On the number of metastable states in spin glasses. *Eur. Phys. Lett.*, 32 :13–17, 1995.
- [178] J. Kurchan. Supersymmetry in spin glass dynamics. *J. Physique I*, 2 :1333–1352, 1992.
- [179] S. Franz and J. Kurchan. On the computation of static expectation values from dynamics in spin glasses. *Europhys. Lett.*, 20 :197–203, 1992.
- [180] S. Sachdev. *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press, 1999.

## Chapitre 9

### Chapitre des publications

# Publication 1

A Variational description of the ground state structure in random satisfiability problems

*Eur. Phys. J. B* **14** 551-558 (2000)

## Publication 2

A single defect approximation for localized states on random lattices

*J. Phys. A* **32** L255-L261 (1999)



## Publication 3

From inherent structures to pure states : Some simple remarks  
and examples

*Eur. Phys. Lett.* **50** 155-161 (2000)



## Publication 4

Relationship between long timescales and the static free-energy in  
the Hopfield model

*J. Phys. A* **31** L391-L396 (1998)



# Publication 5

Dynamical TAP approach to mean field glassy systems

*J. Phys. A* **32** 8365-8388 (1999)



# Preprint 1

Metastable states in glassy systems

*cond-mat/0005499, soumis à Phys. Rev. E*



# Compte-rendu 1

Role of free energy landscape in the dynamics of mean field glassy systems

*J. Phys. Condens. Matter* **12** 6375-6384 (2000)