

Description analytique des travaux jusqu'au 2007

Systèmes désordonnés et vitreux

La physique statistique des systèmes désordonnés et vitreux a constitué un intérêt constant tout au long de ma carrière scientifique. La compréhension de la nature des phases vitreuses des systèmes désordonnés telles que verres de spin et verres structuraux est l'un des problèmes ouverts d'intérêt fondamentale en physique statistique et matière condensée. Ses implications ont une grande importance dans des domaines de recherche interdisciplinaire telles que la théorie de la complexité en informatique, la théorie de l'information, les réseaux de neurones, la théorie statistique de l'évolution naturelle etc. Mes recherches portent sur l'approche statistique aux phénomènes vitreux, où l'hypothèse fondamentale est que les causes des phénomènes vitreux sont communes à une large classe de systèmes et peuvent être comprises à l'intérieur de modèles simplifiés. Dans ce contexte, les modèles de verres de spin en champ moyen occupent une place très importante dans ma recherche. En plus de modéliser les matériaux de verres de spin, pour lesquelles ils ont été originellement conçues, certaines classes de verres de spin en champ moyen ont été proposées, originellement sur une base phénoménologique, puis sur bases théoriques plus solides, comme des approximations de champ moyen à la physique des verres structuraux. Des phénomènes spectaculaires comme la forte réduction entropique observée dans les verres et les phénomènes de dynamique lente peuvent être étudiés théoriquement en détail dans ces modèles. Mes intérêts en théorie statistique des états vitreux incluent les verres de spin en champ moyen et en dimension finie, les phénomènes de brisure de l'ergodicité au niveau de la mesure d'équilibre et au niveau dynamique, les phénomènes de vieillissement et dynamique lente, les propriétés universelles des verres structuraux, la nature de la transition vitreuse, le rôle des états métastable dans la relaxation, les processus activés, la théorie mathématique des verres de spin, les systèmes de spin sur graphe aléatoire, les systèmes de Kac, permettant d'interpoler entre modèles en dimension finie et modèles en champ moyen. Ma recherche a un caractère principalement théorique mais utilise aussi des simulations numériques comme support naturel. Je suis expert en plusieurs techniques de théorie statistique de champs telles que des méthodes perturbatives et non-perturbatives de mécanique statistique, la méthode des répliques et de cavité, la méthode fonctionnelle en dynamique, l'analyse probabiliste et rigoureuse, etc. Je travail aussi avec des méthodes de simulations numériques avancées telles que le « parallel tempering » pour des simulations de Monte Carlo.

Mes résultats les plus pertinents dans le domaine incluent :

- L'introduction de la méthode des répliques couplées pour l'étude des configurations hors d'équilibre dans les verres de spin.
- L'estimation de la dimension critique inférieure des verres de spin par des méthodes d'interface basée sur le travail
- L'une des premières études sur le vieillissement en champ moyen, donnant

les premières évidences par intégration numérique des équations dynamique de la validité de la solution asymptotique hiérarchique proposée peu avant.

- Les premières études numériques sur le «fluctuation dissipation ratio » dans des verres de spin.
- L'étude dynamique de l'un des premiers exemples de modèle de « verres de spin sans désordre »
- L'introduction du potentiel effectif dans les systèmes vitreux, permettant d'étudier états métastables et régions de l'espace de configurations de mesure nulle. La méthode permet entre autre, une caractérisation purement statique de la transition dynamique en champ moyen.
- La mise en évidence d'une longueur de corrélation dynamique dans la théorie de champ moyen des verres de spin et dans la théorie de couplage de mode (Mode Coupling Theory) associées à la susceptibilité de verre de spin. Théorie des hétérogénéités dynamiques dans les verres.
- La découverte d'une relation profonde entre vieillissement et brisure de l'ergodicité d'équilibre, permettant en principe la mesure du paramètre d'ordre vitreux statique en partant de l'étude de la violation du théorème fluctuation - dissipation en dynamique de vieillissement.
- Une description statistique en terme de quasi-équilibre des systèmes vieillissants.
- L'analyse de la limite de Kac pour les systèmes désordonnés de champ moyen, montrant des exemples d'ordre de champ moyen local.
- L'introduction dans les modèles dilués d'une méthode d'interpolation permettant de déduire une validité variationnelle des expressions données par les répliques ou la cavité.
- L'analyse de la métastabilité dans les modèles de Kac désordonnés, permettant de lier temps de relaxation vitreuse à une barrière d'énergie libre.

Verres de Spin : propriétés d'équilibre

Travaux

[B78, B77, B73, B72, B69, B64, B24, B65, B43, B23, B30, B29, B26] [D1]

Collaborations avec G. Parisi, M.A. Virasoro, Vik. S. Dotsenko, M. Mézard, M. Ney-Nifle, M. Campellone, F. Ricci-Tersenghi, A. Billoire, E. Marinari, F. L. Toninelli, F. Tria.

Mes premiers travaux sur les verres de spin de champ moyen ont comme but la compréhension de l'origine des propriétés spectaculaires des états d'équilibre des verres de spin dans la phase non ergodique prédites par la théorie de champ moyen, comme l'existence d'une multiplicité infinie d'états purs d'équilibre avec une distribution de probabilité non-banale des distances à l'intérieur d'un interval continu, et l'organisation ultramétrique, impliquant une topologie hiérarchique des états. L'article [B78] concerne l'origine de l'ultramétrie et montre, avec une analyse probabiliste dans le «random Energy Model » (REM) et par le moyen de la méthode des répliques dans le modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK), comment des corrélations de longue portée sont à la fois ori-

gine et condition nécessaire pour l'organisation hiérarchique des états. Les articles [B77, B73] utilisent des mesures d'équilibre de plusieurs répliques en même temps avec contraintes sur les distances mutuelles pour analyser des configurations qui violent les propriétés d'équilibre. On montre ainsi que la probabilité des configurations telles que le recouvrement (ou co-distance) est hors du support de sa distribution de probabilité et la probabilité des configurations qui violent l'ultramétrie, ont une forme de lois de grandes déviations, avec une énergie libre, appelée « potentiel effectif recuit » dans ce contexte, qui est extensivement plus haute que l'énergie libre des états d'équilibre. Cette prédiction a été vérifiée dans des simulations numériques de Monte Carlo très détaillées dans le travail [B36]. La même méthode [B77, B73] a été utilisée dans [B64] pour étudier les relations entre états d'équilibre à températures différentes, et montrer à l'intérieur d'un modèle simplifié, l'existence du phénomène de « chaos en température », phénomène selon lequel les états d'équilibre à température différente sont statistiquement indépendant. La méthode introduite a été ensuite exploitée par d'autres chercheurs et a permis de montrer, après des discussions sur plusieurs années, l'existence du phénomène de chaos dans le modèle SK. La méthode du potentiel recuit a ensuite été généralisée en [B72] à des systèmes de dimension finie pour aborder le problème important de la détermination de la dimension critique inférieure pour les verres de spin, au-dessous de la quelle la transition de phase de verre de spin ne peut pas exister. Ce travail propose de déterminer la dimension critique inférieure analysant les solutions instantoniques à une théorie de champ pour deux systèmes couplés avec des conditions au bord brisant l'invariance par translation. Ceci a donné la première analyse non perturbative en théorie de verres de spin en dimension finie, suggérant une dimension critique inférieure pour un verre de spin (définie comme la valeur pour laquelle l'exposant d'interface s'annule) de $5/2$. Cette prévision a été récemment confirmée de manière spectaculaire dans des simulations numériques par S. Boettcher. Plus récemment dans l'article [B24] on a montré des liens profonds entre le potentiel recuit et l'analyse de Guerra et Talagrand des modèles de champ moyen qui a permis de démontrer l'ansatz de Parisi dans une large classe de verres de spin de champ moyen. Dans ce travail, le potentiel a été utilisé pour simplifier la preuve de Talagrand dans le cas des modèles à p-spin et la formuler dans le langage de la physique théorique. L'idée de systèmes avec contraintes sur la distance trouve sa forme aboutie dans la formulation de l'article [B65] où au lieu de considérer répliques couplées de manière symétrique, on considère un système à distance fixée par rapport à une réplique de référence équilibrée avec la mesure de Boltzmann-Gibbs. Ceci permet une exploration de l'espace des configurations invisible dans l'étude simple de la fonction de partition et acquiert une grande importance dans le cadre de l'application de la théorie des verres de spin à la physique des verres structuraux (voire plus bas). On parle dans ce cas de 4 l'énergie libre comme fonction de le recouvrement comme du « potentiel effectif gelé ». La méthode entraîne une extension non-banale de la théorie des répliques et permet de calculer, par des méthodes purement statiques, la température de transition dynamique, comme le point où le potentiel acquiert un minimum local secondaire, et l'entropie configurationnelle, comptant le nombre

d'états métastables à chaque température comme la différence en énergie libre entre les deux minimas. L'un des problèmes fondamentaux et très débattue en théorie des verres de spin est la relation entre théorie de champ moyen et la physique en dimension finie. Les théories phénoménologiques telle que la théorie des gouttelettes de Fisher et Huse et l'approximation de Migdal-Kadanoff suggèrent une nature de la phase verre de spin en dimension finie différente de celle en champ moyen, avec seulement deux états purs d'équilibre reliés par symétrie de renversement de spins. Malheureusement, malgré des grands efforts la théorie des verres de spin en dimension finie reste un problème irrésolu et beaucoup des nos connaissances à ce sujet reposent sur des simulations numériques. Dans le but de discerner le scénario correct de la phase verre de spin dans des simulations il est important de comprendre quelles prévisions diffères dans les cas différents. Le travail [B43] fournit donc une réponse théorique à des simulations numériques visant à calculer la distribution du recouvrement entre état fondamental et premier état excité dans des systèmes de verre de spin. Dans [B43] cette distribution est calculée dans le modèle SK, en introduisant une répulsion avec l'état fondamentale et on montre que grâce à l'ultramétrie, il y a une loi d'échelle universelle où la fonction de répartition ne dépend que d'une variable d'échelle liant le recouvrement et le paramètre de répulsion. Dans le même travail on considère également le cas, manifestement nonultramétrique des polymères dirigées en milieu aléatoire, où, par matrices de transfert, on montre comme la relation d'échelle entre répulsion et recouvrement est violée dans ce cas. La relation entre champ moyen et dimension finie est aussi le sujet de l'article [B23] qu'il est consacré à l'étude par simulations de Monte Carlo d'un modèle de verres de spin interpolant entre un réseau unidimensionnel et un graphe complètement connecté. On peut dans ce cas étudier par matrices de transfert le crossover entre le comportement paramagnétique du modèle unidimensionnel et le comportement vitreux pour le modèle complètement connecté. Les travaux [B30, B29] [D1] sont des rares exemples de résultats rigoureux en physiquemathématique des verres de spin en dimension finie et sont consacrés à l'étude de la limite de Kac dans les verres de spin. Dans ce cas, on peut comprendre la relation entre dimension finie et champ moyen en tous les détails. Les modèles de Kac (1939), où le rayon d'interaction est un paramètre variable, sont des modèles classiques en physique mathématique pour étudier, dans des modèles de transition gaz/liquides ou ferromagnétique la nature de cette relation. En 1966, Lebowitz et Penrose purent analyser la limite de Kac, de porte infinie après limite thermodynamique, pour un modèle de gaz équivalent à un modèle d'Ising ferromagnétique et montrer que l'énergie libre converge vers celle de la théorie de Van der Waals, complémentée par la construction de Maxwell, éliminant ainsi l'une des pathologies principales du champ moyen : l'existence d'états métastable de durée de vie infinie. Dans [B30] a été analysé l'analogie du modèle de Kac pour une large classe de verres de spin et montré la convergence de l'énergie libre vers la valeur de champ moyen pour toute température et dimension. C'est la première démonstration qu'un modèle de dimension finie a une physique proche de celle de champ 5 moyen dans une certaine limite. Le travail [D1] montre des résultats analogues dans des modèles de Kac qui ad-

mettent comme limite non pas des modèles complètement connectés, mais des modèles de verre de spin dilués. Ces derniers sont importants à la fois pour les simulations numériques, en étant beaucoup plus simples à simuler, et pour les applications en informatique théorique, théorie de l'information et théorie de la communication (voir plus bas). Dans [B29], l'analyse de la limite de Kac est étendue au comportement des fonctions de corrélations locales et on a pu montrer existence d'ordre de champ moyen local, sur des échelles de longueur de l'ordre de la portée des interactions. Pour un grand rayon d'interaction, la fonction de probabilité du recouvrement local est proche de la fonction correspondante (pour le système entier) en champ moyen. L'ordre local est une condition nécessaire, mais bien sur pas suffisante pour l'ordre à longue portée et son étude requiert d'aller au-delà de la limite de Kac. Dans [B26] on a proposé l'utilisation d'un potentiel effectif pour étudier la possibilité de ce type d'ordre dans un développement asymptotique autour du champ moyen pour des valeurs grandes mais finies de la portée des interactions. Ce travail fournit une légitimation au formalisme utilisé dans [B72] pour étudier la dimension critique inférieure.

Verres de Spin : Dynamique

Travaux [B76, B70, B71, B63, B66, B61, B62, B47, B55, B51, B46, B32] [D4, D3], Collaborations avec J. Kurchan, M. Mézard, A.C.C. Coolen, J. Hertz, H. Rieger, E. Marinari, G. Parisi, A. Barrat, L. Peliti, M.A. Virasoro, V. Lecomte, R. Mulet.

Une partie importante de mon travail concerne la dynamique de vieillissement dans les systèmes vitreux. Le vieillissement apparaît dans les systèmes vitreux comme un phénomène d'évolution lente dans la phase vitreuse où la dynamique devient de plus en plus lente dans l'évolution dans le temps. D'un point de vue formel, le vieillissement peut être décrit comme un état asymptotique hors d'équilibre où l'invariance par translations temporelle est violée et les propriétés de décorrélation de la dynamique dépendent du temps passé dans la phase vitreuse avec des lois d'échelles liant les propriétés au temps d'observation et l'âge du système. Mon premier travail en dynamique des verres de spin [B76] concerne le thème qui deviendra important dans la suite de la relation entre dynamique et mesure d'équilibre et montre comment il est possible de manière formelle de calculer les valeurs d'équilibre en sommant sur des quasi-solutions aux équations dynamiques. Les travaux [B70, B71], apparus peu après le travail fondamental de Cugliandolo et Kurchan en 1993, concernent le vieillissement dans les verres de spin de champ moyen et ont fourni les premières évidences en faveur de la solution hiérarchique, les lois d'échelle dans la brisure de l'invariance par translation temporelle, les violations du théorème fluctuation-dissipation, basé à la fois sur une analyse asymptotique des équations et sur l'extrapolation de la solution numérique détaillée des mêmes équations à temps finis. Le problème d'une solution numérique des équations permettant d'aller à temps long réapparaît dans l'article [B63] où les équations intégro-différentielles de la dynamique sont résolues par des développements en série de temps courts et ces séries resommées par la

méthode de Padé. Suite à ces travaux, dans l'article [B66] ont été effectuées les premières mesures numériques du rapport fluctuation-dissipation (FDR) dans des simulations Monte Carlo de verres de spin tridimensionnel, en démontrant que les prévisions qualitatives de la théorie de champ moyen étaient bien vérifiées pour la dynamique des systèmes en dimension finie. Suite au développement en théorie de champ moyen dynamique, il y avait eu des propositions de traiter théoriquement la dynamique par des approximations adiabatique. Dans [B61], cette hypothèse est soumise à test dans un cas simple exactement soluble où on a pu vérifier la validité limite de l'hypothèse adiabatique, qui a été ensuite abandonnée pour les verres de spin. Au milieu des années 90, suite à la proposition de Kirkpatrick, Thirumalai et Wolynes d'utiliser des modèles de verres de spin sans symétrie par renversement des spins comme une limite de champ moyen pour le comportement de verres structuraux, et l'identité des équations dynamique pour le «p-spin glass model » avec l'équation du couplage de mode schématique utilisée par Goetze et collaborateurs pour décrire la dynamique des verres structuraux, il y eurent beaucoup des discussions sur comment la physique des verres structuraux, systèmes sans désordre intrinsèque, pouvait être représentée par des modèles de verres de spin, intrinsèquement désordonnés. Il fut donc trouvé par différents groupes des modèles avec comportement verres de spin en absence de désordre gelé. L'analyse en [B62] présente l'un des premiers exemples de « verres de spin sans désordre » où une étude dynamique a pu montrer une phénoménologie de vieillissement vitreux. Le modèle en question avait été introduit par Amit et Roginsky et consistait en un Hamiltonien avec interactions construites avec des symboles $3j$ entre triplets de variables. Le travail [B47] aborde un problème différent de dynamique dans les verres de spin, qui est la taille des bassins d'attraction des états métastables, qui en champ moyen sont capable de confiner le système sur un temps infini. Celle ci peut être étudiée en considérant des conditions initiales choisies entre celles à distance fixe d'un état métastable. Si les conditions initiales sont choisies avec la mesure de Boltzmann-Gibbs restreinte, on trouve des bassins d'attraction de taille extensive avec un seuil déterminé en distance de Hamming. Si par contre les conditions initiales sont choisies de manière uniforme sur une sphère de rayon fixe autour de l'état de référence, le bassin d'attraction ont une taille sous extensive. Un thème de grande importance dans ma recherche sur la dynamique lente est la relation entre vieillissement et mesure d'équilibre. En particulier, je me suis intéressé aux implications pour l'équilibre de la persistance du vieillissement sur toutes les échelles de temps, et vice versa, les implications sur la dynamique de l'existence de phases de verre de spin thermodynamique. Une quantité fondamentale qui caractérise le vieillissement est le FDR, qui quantifie les violations du théorème fluctuation-dissipation en réponse linéaire hors d'équilibre. Ses propriétés ont été associées à celles d'une (ou plusieurs) températures effectives réglant les échanges de chaleur entre degrés de liberté lents. Les travaux [B55, B51] abordent l'étude de la relation entre la relation entre réponse dynamique et violation du FDT et brisure de l'ergodicité au niveau de la mesure d'équilibre dans un cadre général en dimension finie. En résulte une généralisation de la théorie de la réponse linéaire valable dans des conditions moins restrictives que la

condition d'équilibre thermodynamique complète appropriée pour des systèmes vieillissants en dimension finie. En supposant que les quantités dépendant de la configuration du système à un seul temps soient asymptotiquement près de leurs valeurs d'équilibre, on peut mettre en relation le FDR avec la probabilité $P(q)$ de le recouvrement entre configurations d'équilibre, qui signale la brisure de l'ergodicité au niveau de la mesure de Gibbs. Des FDR asymptotiquement non-banale et la brisure de l'ergodicité sont des phénomènes qui ne peuvent pas exister l'un sans l'autre. Le résultat est intéressant parce que, par moyen d'une quantité mesurable (le FDR a été récemment été mesuré dans un verre de spin matériel par Ocio et Herisson à Saclay), on peut obtenir des informations sur la probabilité entre états d'équilibre, inaccessible à des mesures expérimentales directes. L'analyse est basée sur le concept mathématique de «stabilité stochastique» de l'état de Gibbs et l'état dynamique par rapport à des perturbations décorrélé avec l'énergie. Il est possible de démontrer que cette propriété vau presque partout (en sens mathématique) dans l'espace des paramètres. Des concepts similaires permettent ainsi de démontrer que l'ultrametricité statique et dynamique sont intimement liées l'une à l'autre. L'analyse de [B55, B51] étant basée sur des propriétés formelles, dans [B46] [D4] il à été développée une interprétation des phénomènes de vieillissement qui reprend la connexion entre quantités dynamiques et quantités d'équilibre et en déduit une description statistique de l'état vieillissant. Le point de départ de ce travail est la démonstration dans le vieillissement d'un principe d'équivalence généralisé entre régression des fluctuations spontanées et les fluctuations induites par un champ extérieur. Ce principe d'Onsager généralisé permet de rationaliser une relation qui existe en champ moyen entre FDR et taux de croissance de l'espace de phase, généralisant la relation thermodynamique entre énergie, entropie et température. Celle ci, comme plusieurs groupes l'ont reconnu en même temps que nous, implique l'équiprobabilité dans la visite des états métastables dans le vieillissement et donne une interprétation statistique au FDR comme température effective, qui s'ajoute à celle thermodynamique proposée par Cugliandolo, Kurchan et Peliti. En découle la possibilité de traiter des systèmes vitreux comme des systèmes thermodynamiques avec plusieurs températures, comme précédemment propose sur base phénoménologique par plusieurs groupes. Suite à ce développement, A. Barrat et L. Berthier ont proposé une généralisation du rapport entre statique et dynamique valable pour les systèmes avec vieillissement interrompu, où, après un régime pré-asymptotique de vieillissement, le système parvient à équilibrer en un temps fini. Celle ci, met en relation le FDR à temps plus court du temps de relaxation, avec la fonction $P(q)$ mesurée sur des tailles petites, que plusieurs études numériques et théoriques ont montré être similaires à celle du champ moyen avant de passer à un comportement paramagnétique sur de grandes tailles. Cette relation est importante parce qu'elle permet de définir une longueur comme fonction du temps sur laquelle le système est à l'équilibre. En outre, elle suggère la validité de la description de champ moyen sur l'échelle locale même dans des systèmes ayant asymptotiquement, en temps et espace, un comportement ergodique. L'existence d'une telle possibilité a été démontrée pour des modèles avec interactions désordonnées de Kac de basse dimension

dans [B30, B29] [D1] (voir plus haut). Pour avoir un sens thermodynamique, la relation entre FDR et distribution du recouvrement, elle doit être vraie pour tout couple de fonction corrélation - réponse conjuguées. Dans [B32] [D3] on introduit un couple de corrélation - réponse non directement liés à l'autocorrélation spin-spin et la réponse du spin au champ magnétique habituellement utilisées, et on a pu confirmer, dans le cas du verre de spin d'Edwards-Anderson en deux dimensions, la relation proposée par Barrat et Bertier.

Modèles statistiques de dynamique lente

Travaux [B67, B61, B59, B37, B31] Collaborations avec F. Ritort, R. Mulet, G. Parisi, K. Dawson, M. Sellitto

La théorie de la dynamique des verres de spin de champ moyen a stimulé la recherche de modèles simplifiés où les phénomènes de vieillissement et dynamique lente peuvent être compris de manière plus claire. Un problème très discuté dans les années 90 était le rôle des «barrières entropiques» vis à vis des barrières énergétiques dans le ralentissement vitreux de la dynamique. Dans les articles [B67, B61, B59] a été analysé théoriquement un modèle d'urnes introduit peu avant par Ritort où la dynamique devient lente à basse température pour des effets purement entropiques. Le modèle a été résolu en approximation adiabatique dans [B67] avec des résultats en excellent accord avec les simulations et montre, malgré l'absence d'une quelconque barrière d'énergie, un temps de relaxation de type Arrhenius. Dans [B61, B59] la dynamique du modèle est analysée de manière exacte, en écrivant des équations hiérarchiques exactes et en les résolvant par la fonction génératrice, pour calculer corrélations et réponses. On a donc mis en évidence un FDR non-banal dans le modèle, qui dans ce cas ne peut pas être mis en relation directe avec la température efficace qui apparaît dans l'approximation adiabatique. Dans [B37], on a étudié la dynamique vitreuse du modèle de Kob-Andersen, qui est un modèle de particules sur réseaux avec un Hamiltonien banal, la seule interaction est l'exclusion, mais soumise à des règles dynamiques qui, tout en respectant le bilan détaillé, ne permettent pas certains mouvements dans le système. Dans cette étude, on également a étudié la fonction de corrélation à quatre points et la longueur de corrélation associée en montrant le développement d'une longueur de corrélation dynamique ayant un comportement qualitatif en accord avec les simulations numériques des liquides de Lennard-Jones et la théorie développée par Parisi et moi-même (voir plus bas). L'article [B31] étudie par simulation numérique la nature de la relaxation lente dans un mélange binaire sur réseaux, qui présente une phase vitreuse en approximation de Bethe. Par des simulations de Monte Carlo, on a montré à la fois l'existence d'un temps de relaxation à double exponentiel et un comportement de verre fragile et l'absence d'une transition idéale en temps fini.

Physique Statistique de la transition vitreuse

Travaux [B60, B57, B56, B54, B49, B25, B22, B40, B42, B44] [D9, D5, D6] Collaborations avec D. Alvarez, F. Ritort, G. Parisi, A. Barrat, M. Cardenas,

M. Mézard, F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt, R. Zecchina, S. Sastry, N. Deo, S. C. Glotzer, A. Cavagna, I. Giardina, C. Donati.

Comme décrit dans l'introduction, mon activité en physique des verres structuraux se concentre principalement sur l'analogie entre la physique des verres comme décrite par des théories statiques comme la théorie de crise entropique de Gibbs-Di Marzio, sa contrepartie dynamique de Adam-Gibbs, la Théorie Dynamique de Couplage de Modes (MCT) et la physique des verres de spin en champ moyen avec une transition aléatoire de premier ordre (random first order transition). Suite à la proposition d'utiliser des modèles désordonnés pour comprendre la physique des verres structuraux, il y a eu des nombreux efforts pour comprendre le comportement des modèles avec interactions à p-spin désordonnées en dimension finie. Dans [B60] [D9], à été introduit un modèle de plaquettes, généralisant à des interactions désordonnées le modèle «gonihedrique» utilisé en théorie des cordes, et qui ensuite a été l'objet de plusieurs études dans le contexte de la relation entre dynamique vitreuse et croissance de domaines. Ce modèle possède une symétrie particulière qui implique une grande dégénérescence entre niveaux énergétiques. Cette dégénérescence conduit à basse température à une compétition entre différents états fondamentaux, donnant lieu à une dynamique vitreuse. Le modèle a été étudié par des simulations de Monte Carlo, par lesquelles on a pu constater une relaxation de type «supra Arrhenius» avec temps de relaxation pouvant se représenter aussi bien comme une loi de Vogel-Fulcher que comme l'exponentiel d'une constante sur la température au carré. Dans ces mêmes travaux on montre comment le temps de relaxation dans ce modèle peut être mis en relation inverse avec l'entropie configurationnelle. Les travaux [B57, B56, B54, B49] représentent des applications systématiques de la théorie du potentiel effectif (voir la description de [B65]) au problème de la transition vitreuse. Dans [B57, B56] il est étudié le diagramme de phase au niveau de champ moyen, pour un modèle à p-spin d'un système couple de manière attractive avec un état d'équilibre. Grâce à ce couplage, on a accès à des régions de l'espace des configurations avec poids négligeable dans la mesure d'équilibre. On prédit un diagramme de phase dans le plan température-couplage avec une ligne de transition qui sépare un état «confiné», où le système reste près de l'état de référence, d'un état «deconfiné» où le système s'en éloigne indéfiniment. L'analyse étant faite en champ moyen, une construction de Maxwell a été proposée pour décrire des systèmes réalistes dans la zone de coexistence de phase. Dans ces articles, on a montré aussi la possibilité d'utiliser la méthode des répliques couplées comme outil dans les simulations numériques pour tester les prévisions théoriques dans des systèmes réalistes, et on trouve pour des mélanges binaires de Lennard-Jones des évidences en faveur d'une transition du premier ordre dans le couplage en accord avec les prévisions théoriques. Dans [B54, B49], la théorie du potentiel effectif a été étendue à des modèles réalistes de liquide, des sphères dures dans l'approximation HNC. Cette étude montre comme des concepts développés dans des modèles désordonnés en champ moyen apparaissent de manière naturelle dans des schémas d'approximation classique de la théorie des liquides. De plus, cette étude montre les limites de l'approximation HNC, qui, comme les théories en champ moyen, conduisent, dans la phase vitreuse à potentiels effec-

tifs non-convexes. Il en résulte clairement la nécessité d’aller au-delà de cette approximation. La construction d’une théorie qui traite de manière cohérente les effets de la portée finie des interactions en décrivant les processus qui restaurent l’ergodicité brisée au niveau champ moyen, et permettent d’estimer le temps de relaxation demeure comme un des défis de la physique de l’état condensé et de la mécanique statistique pour les années à venir. Suivant des idées phénoménologiques de Wolynes et collaborateurs, et plus récemment de Biroli et Bouchaud, des tentatives de progresser dans ce problème ont été entreprises dans les articles [B25, B22] où il a été proposé de traiter la portée finie des interactions par mis des modèles désordonnés (p-spin) de Kac en un développement asymptotique autour de la théorie de champ moyen. Dans [B25], la théorie du potentiel (voir plus haut) a été employée pour dériver une théorie des champs efficace permettant d’estimer la longueur de cohérence suggérée par les théories phénoménologiques. La théorie obtenue est de complexité remarquable due à la nécessité de traiter le système avec la méthode des répliques. Cette formulation permet de réduire le problème de la restauration de l’ergodicité en termes de solutions instantoniques aux équations de champ. Une solution simplifiée a été proposée, qui confirme par un calcul microscopique, les prédictions obtenues dans un cadre phénoménologique, d’une relation inverse entre longueur de cohérence et entropie configurationnelle. Malheureusement, plusieurs indices montrent que la solution n’est pas tout à fait consistante et doit être modifiée en une théorie cohérente. Associé aux solutions de nucléation, il y a une barrière d’énergie libre, qui sur la base des analogies avec les systèmes avec transition du premier ordre, avait été associée au temps de relaxation du système. Dans l’article [B22], on a discuté cette relation pour le même modèle de Kac à p-spin discuté en [B25]. Avec une analyse inspirée d’un travail classique de Lebowitz et Penrose des années 70, on a pu montrer que : 1) il est possible de caractériser des états métastables avec un temps de vie finie dans le modèle (selon une définition mathématiquement propre). 2) Les configurations d’équilibre typique font partie de ces états. 3) Il est possible en principe de caractériser le temps de relaxation à partir de l’analyse d’une barrière d’énergie libre, calculable en principe par des moyens purement statiques. 4) La forme de cette barrière ne coïncide pas avec celle proposée par les théories phénoménologiques et estimée [B25], mais ce réduit à celle-ci si une hypothèse supplémentaire de «automoyenne» sur les instantons conduisant à la relaxation est vérifiée. Comprendre la nature de cette hypothèse, ainsi qu’obtenir une théorie consistante de la barrière d’énergie est un des mes thèmes de recherche actifs. Le travail [B40], qui s’insère dans la filière des modèles de spin sur graphe aléatoire, fait face au problème de trouver un modèle accessible à l’analyse théorique, qui présente, à la fois, une phase cristalline à basse température, et une phase de liquide sur-refroidie qui évolue vers une transition vitreuse. On a montré dans ce travail comment un modèle d’Ising avec interactions ferromagnétiques à trois spins sur graphe aléatoire, reproduit cette phénoménologie. D’un côté, l’état fondamental est ferromagnétique par construction, de l’autre, le modèle ne présente pas des mécanismes de retour local vers un tel état. Le travail [B42] soulève le problème des propriétés statistiques des niveaux propres de la matrice des modes normales instantanés dans

la matrice Hessienne de l'énergie potentielle autour des configurations typiques des liquides. On a pu montrer par analyse numérique des données de dynamique moléculaire comme l'espacement entre niveau suit la loi de Wigner typique des systèmes chaotiques. Les travaux [B44] [D5, D6] abordent le problème très débattu des hétérogénéités dynamiques dans les systèmes vitreux. On propose dans ces articles l'utilisation de fonctions de corrélation à quatre points comme indicateurs de dynamique spatialement hétérogène. On fournit les premiers arguments théoriques et les évidences numériques de la croissance d'une longueur de corrélation dynamique associée à cette fonction. On met en évidence comment la théorie de la dynamique des systèmes désordonnés en champ moyen, et par extension la théorie de couplage de modes, prédisent la divergence de la susceptibilité dynamique liée par la théorie de la réponse linéaire à la corrélation à quatre points. Par relations d'échelle on obtient donc le comportement de la longueur. Dans cette série de travaux on met en évidence comment, en accord avec les résultats des simulations, susceptibilité et longueur de corrélation ont un maximum dans temps. Ce maximum est déplacé à des temps de plus en plus grands quand la température est baissée, et la valeur du maximum devient de plus en plus grande. La théorie de champ moyen [11] prédit une divergence de la longueur de corrélation à la transition de brisure de l'ergodicité. Cette divergence doit être coupée au delà du champ moyen. Dans ces travaux, on propose aussi une méthode de calcul de la susceptibilité par des moyens purement statistiques à partir du potentiel effectif. Ces travaux ont été repris récemment par Biroli, Bouchaud et collaborateurs qui ont développés et étendus les résultats de notre analyse.

Modèles de spin dilués, problèmes d'optimisation et inférence

Travaux [B39, B38, B33, B34, B28] Collaborations avec M. Leone, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina, A. Montanari, F.L. Toninelli, H. Bauke, S. Mertens.

Des progrès très importants, au niveau de la physique statistique fondamentale, et au niveau des applications à des domaines interdisciplinaires telle que l'informatique théorique et la théorie de l'information, sont venues de l'extension de méthodes d'analyse des verres de spin en champ moyen à des systèmes dilués : des modèles de spin sur graphe aléatoire. Dans ce contexte, le travail [B39] a fourni les premiers exemples de modèles dilués pour lesquelles l'énergie du fondamental et l'énergie libre à température finie peuvent être calculés de manière exacte à l'intérieur d'une solution avec brisure de symétrie des répliques à un pas. Les simplifications obtenues ont été utiles dans les solutions de modèles plus complexes obtenues après par d'autres chercheurs. Après le travail de N. Sourlas, on sait que le problème de codes correcteur d'erreur peut être formulé comme un problème de verres de spin sur réseau dilué. En particulier, les codes de type « LDPC » sont isomorphes à des modèles de spin sur graphe aléatoire. L'article [B38] aborde le problème de comment les phénomènes vitreux typiques dans ces modèles, affectent les propriétés de décodage, et montre que des algorithmes de décodage simple telles que le « belief propagation » ou similaires ne peuvent pas

parvenir à convergence au-dessous d'un seuil de transition où des états métastables apparaissent. Dans les dernières années, on a assisté à des progrès spectaculaires dans la physique mathématique des verres de spin en champ moyen, qui ont conduit à la démonstration, récemment obtenue par M. Talagrand, de l'ansatz de Parisi pour une large classe de systèmes complètement connectés. Ce progrès a été rendu possible par l'introduction par F. Guerra d'une méthode d'interpolation permettant la comparaison de l'énergie libre des modèles étudiés avec celle d'un système plus simple. Dans sa formulation originale, la méthode était restreinte aux modèles complètement connectés. Vu l'intérêt des modèles dilués et l'importance d'obtenir des démonstrations rigoureuses pour les applications en informatique et théorie de l'information, il était naturel de penser à généraliser les méthodes d'interpolation à ce cas. Les articles [B33, B34] portent donc sur la physique mathématique des systèmes dilués et déduisent des bornes inférieures rigoureuses sur l'énergie libre. Dans l'article [B33] il a été étudié le cas des modèles sur graphes de Erdos-Renyi à connectivité Poissonienne, pour les modèles de verre de spin de Viana-Bray, le modèle de XOR-SAT et K-SAT aléatoires de la théorie de la complexité en informatique théorique. On a pu montrer que dans le cas de modèles avec interactions entre n -uplets de spin avec n paire, les formules obtenues par la méthode des répliques ou la méthode dans de différents degrés d'approximation, donnent de bornes inférieures sur l'énergie libre. Ceux-ci se traduisent dans la K-SAT en bornes supérieures au seuil de satisfiabilité, quantité centrale dans l'étude de ce système. Le travail [B34] aborde le problème de généraliser les bornes pour les mêmes modèles sur des graphes de connectivité arbitraire. Ceux-ci présentent des problèmes nouveaux qui, pour être résolues, requiert la dérivation d'une famille d'identités entre distributions de champs de cavité généralisant les inégalités de Ghirlanda-Guerra, importantes pour l'analyse rigoureuse du cas connecté, aux modèles dilués. Le travail [B28] consiste en une étude du problème du « Number Partitioning », problème classique en théorie de la complexité, où on se donne une suite aléatoires de poids et on les repartie en deux classes en cherchant à minimiser la différence entre les deux poids totales des classes. On aborde le problème de la relation entre la distance en énergie des niveaux du système avec la distance de Hamming dans l'espace des configurations. Ce problème est intéressant dans la mesure où les algorithmes locaux d'optimisation exploitent ce type de corrélations dans la recherche des solutions. Les résultats de cette analyse montrent que sur des petits intervalles énergétiques, les niveaux sont indépendants en correspondant à des configurations à distance maximale. Ses résultats sont en particulier vrai pour l'état fondamental, et permettent de rationaliser l'échec des algorithmes dans ce problème.

Systèmes granulaires

Travail [B35] Collaboration J. Berg, M. Sellitto.

Ce travail aborde le problème de tester l'hypothèse d'Edwards, selon laquelle, lorsqu'un milieu granulaire est soumis à des « manipulations extensives » les états bloqués de densité égale apparaissent avec égale probabilité. Comme

pour beaucoup de phénomènes en physique statistique, si cette hypothèse a un caractère générale, la raison doit résider dans des mécanismes statistiques commun à des larges classe de systèmes plus que dans le détail des interactions dans des systèmes spécifiques. Le travail [B35] teste l'hypothèse d'Edwards dans des modèles de spin simples, en tenant compte des propriétés suivantes des systèmes granulaires : 1) Les systèmes ont un nombre exponentiel d'état d'équilibre statique dans un intervalle continue d'énergie, 2) Les systèmes sont soumis à une dynamique de « tapping » consistant en des phases dynamiques d'excitations, modélisées comme des pas de Monte Carlo de température finie, suivies par des phases de relaxation à l'équilibre statique, modélisées comme de pas de Monte Carlo à température nulle, jusqu'à arrêt complet du système. Les modèles considérés étaient des chaînes d'Ising avec contraintes cinétiques et des modèles de spin sur graphe aléatoire. L'analyse montre que si l'hypothèse d'Edwards n'est certainement pas exacte, néanmoins elle fournit une bonne approximation pour le comportement des modèles, qui peut être systématiquement amélioré.

Articles pour des Encyclopédies

Il s'agit de deux articles de synthèse sur la dynamique des systèmes vitreux. Le premier [C3]3dogs, en italien, a été commissionné par l'« Enciclopedia del 900 » Treccani ed. qui est la plus importante encyclopédie italienne à caractère scientifique. Le deuxième [C3]enc apparue dans l'« Encyclopedia of Mathematical Physics » Elsevier ed. en anglais. Les articles fournissent une introduction à la phénoménologie de la transition vitreuse et le vieillissement et une revue de la théorie dynamique du vieillissement.

Applications en biologie théorique

Mes recherches sur des applications biologiques concernent principalement des domaines ou les concepts de la physique statistique peuvent jouer un rôle important dans la formulation et la solution des problèmes posés. Mes résultats dans ce domaine incluent :

- L'analyse de la nature statistique des propriétés de catégorisation dans des modèles de mémoire associative.
- Une analyse des modèles d'hétéropolymère aléatoire montrant l'absence d'une phase vitreuse dans le repliement due à la nature intrinsèquement unidimensionnelle du problème.
- L'analyse de modèles d'évolution en paysage de «fitness » aléatoire.
- L'étude d'un modèle épidémiologique d'évolution du virus de la grippe A chez l'homme et son interaction avec le système immunitaire, proposant en mécanisme expliquant les schémas évolutifs observés.

Réseaux des Neurones.

Travaux [B80, B79] Collaboration avec M.A. Virasoro, P. Del Giudice et D. Amit.

J'ai débuté dans la recherche avec des études sur l'apprentissage dans les réseaux de neurones. Mes recherches concernent la catégorisation et la généralisation, dans la théorie statistique de l'apprentissage par des réseaux neuraux, qui assimile l'apprentissage à un processus stochastique où le système modifie son état de manière à retenir l'information venant du monde extérieur. Dans ce cadre, dans l'article [B80], a été étudié le comportement de généralisation des réseaux des neurones du type «perceptron » soumises à des tâches, d'apprentissage d'informations réparties en classes. L'étude déduit la limite de capacité pour stocker des «patterns » organisés en classes, et montre que dans la phase «difficile », au delà de la limite de capacité, où les patterns ne peuvent pas être mémorisés de manière exacte, l'apprentissage conduit à la rétention de l'information relative aux classes. Dans l'article [B79], a été formulée une matrice synaptique capable de stocker de manière optimale des classes non corrélées de patterns. Le comportement de ce modèle illustre dans un exemple concret que, quand soumis à des lésions aléatoires, des modules qui mémorisent une information corrélée, perdent aussitôt la capacité de discerner les individus à l'intérieur des classes, puis celle de distinguer les classes 14 différentes.

Repliement des Hétéropolymères Aléatoires

Travaux [B75, B41, B50] [D12]

Collaborations avec Vik. Dotsenko, M. Mézard, T. Garel, H. Orland, Z. Konkoli, J. Hertz, G. Parisi

Au début des années '90 les hétéropolymères aléatoires avaient été proposées comme des modèles pour comprendre les aspects statistiques du repliement des protéines, afin de montrer comment un paysage d'énergie complexe pouvait être compatible avec un repliement efficace. Le «random energy model » avait été proposé comme modèle simplifié pour le paysage énergétique des protéines qui capturerait les propriétés fondamentales des modèles plus complexes d'hétéropolymères connues par des analyses théoriques approchées. Un problème ouvert à l'époque était de comprendre si les hétéropolymères pouvait montrer des phases vitreuses stables. Le travail [D12] contient de forts arguments contre l'existence de phases vitreuses, basés sur la théorie de perturbation autour du champ moyen et la nature unidimensionnelle des chaînes polymériques. Le travail [B41], par une analyse de la dynamique des hétéropolymères montre que des effets vitreux de vieillissement et dynamique lente peuvent être présent sur des échelles de temps courtes par rapport à celles du repliement. L'article [B75] concerne le problème inverse au problème de la prédiction de la forme tertiaire à partir des interactions et soulève le problème de trouver des interactions entre monomères qui permettent d'avoir des configurations compactes fixées comme états fondamentaux. Le problème est résolu en champ moyen où le problème est lié à la mémorisation de permutations aléatoires dans des réseaux des neu-

rones. L'analyse montre qu'il est possible de stabiliser un nombre extensif de formes dans le système. Dans le travail [B50], les configurations polymériques compactes sont modélisées comme des marches Hamiltoniennes sur réseaux réguliers et est abordé le problème du calcul du nombre de marches avec un degré de similitude. Ceci est résolu en champ moyen, où, à nouveau, le lien avec les permutations apparaît et conduit à une estimation exponentielle du nombre de chemins.

Théorie Statistique de l'évolution Darwinienne

Travaux [B74, B58, B27] [D11] Collaborations avec L. Peliti, M. Sellitto, F. Tria, M. Laessig

Le processus d'évolution naturelle peut être en première approximation décrit, sur des échelles de temps pas trop long, comme une marche aléatoire dans un paysage de «fitness» complexe, où les individus plus adaptés ont une probabilité majeure de reproduction. La théorie de la quasi-espèce de Eigen a mis en évidence dans des exemples simples comment la dichotomie entre pression sélective et mutations aléatoires peut conduire, à une transition de phase entre un régime où la population est concentrée en une quasi-espèce près d'un maximum de fitness et un régime de basse fitness dominé par les mutations avec une population étalée. Bien sûr, les propriétés du paysage de fitness jouent un rôle important pour les caractéristiques des quasi-espèces et des seuils d'erreur. Le choix de fonctions de fitness complexe de type verre de spin avec beaucoup de maximums locaux séparés par des vallées apparaît comme choix naturel dans le contexte de l'évolution. Dans les articles [B74, B58][D11], on étudie le modèle de quasi-espèce dans un paysage de type REM. Les résultats montrent un le seuil d'erreur qui apparaît comme une transition du premier ordre et que des effets d'hystérésis peuvent prévenir la convergence à la solution stable. Le travail [B27] consiste en une étude du problème, de grand intérêt actuel, de la compréhension de la dérive génétique (genetic drift) dans la dynamique évolutive du virus de la grippe A, et son interaction avec le système immunitaire. En particulier, est abordé le problème de comment la population virale parvient à évoluer rapidement pour échapper à l'immunité acquise tout en restant concentré en une quasi-espèce d'individus similaires. Les résultats, basés sur des simulations numériques d'un modèle épidémiologique avec individus avec mémoire immunitaire, montre qu'une source de compétition adaptative entre différents génomes mutants est nécessaire pour tenir la population concentrée.