

Numéro d'ordre :

UNIVERSITÉ DE PARIS XI — U.F.R. DES SCIENCES D'ORSAY

## **Habilitation à diriger des recherches**

Spécialité :

Sciences Physiques

présentée par

**Alain BARRAT**

Laboratoire de Physique Théorique,  
Université de Paris-Sud, Bâtiment 210, 91405 Orsay cedex

Sujet :

**I- Milieux granulaires denses, gaz granulaires :  
des systèmes modèles hors de l'équilibre**

**II- Eléments d'étude des réseaux complexes**

*Jury composé de*

D. Cassi	Professeur à l'université de Parme	Rapporteur
L. Cugliandolo	Professeur à l'université de Paris VI	Rapporteur
D. Dean	Professeur à l'université de Toulouse III	Rapporteur
S. Majumdar	Directeur de Recherches au LPTMS	
O. Martin	Professeur à l'université de Paris-Sud	
P. Viot	Directeur de Recherches au LPTL	



# Table des matières

<b>Avant-propos</b>	<b>5</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>7</b>
<b>I Milieux granulaires denses</b>	<b>9</b>
<b>A Introduction</b>	<b>11</b>
A.1 Expériences . . . . .	11
A.2 Approches théoriques . . . . .	12
<b>B Le modèle « Tetris » avec formes aléatoires</b>	<b>15</b>
B.1 Forçage constant . . . . .	16
B.2 Cycles . . . . .	17
B.3 Effet mémoire . . . . .	19
B.4 Conclusion . . . . .	20
<b>C Utilisation de notions thermodynamiques</b>	<b>21</b>
C.1 Théorème Fluctuation-Dissipation et généralisations . . . . .	21
C.2 L'approche d'Edwards . . . . .	22
C.2.1 Stratégie générale . . . . .	23
C.2.2 Equilibre . . . . .	23
C.2.3 La mesure d'Edwards . . . . .	24
C.2.4 Dynamique de compaction . . . . .	25
C.2.5 Comparaison des mesures . . . . .	25
C.2.6 Conclusions de l'étude . . . . .	26
C.3 Indications expérimentales dans le cas d'un « liquide » granulaire . . . . .	27
C.3.1 L'expérience . . . . .	27
C.3.2 La relation FD pour un oscillateur brownien . . . . .	27
C.3.3 Résultats . . . . .	28
<b>II Gaz granulaires</b>	<b>33</b>
<b>A Introduction</b>	<b>35</b>
A.1 Expériences . . . . .	35
A.2 Modélisation et approches théoriques . . . . .	35

A.2.1	Sphères dures inélastiques . . . . .	35
A.2.2	Traitement du modèle . . . . .	36
<b>B</b>	<b>Distributions de vitesse</b>	<b>39</b>
B.1	Problématique . . . . .	39
B.2	Un modèle effectif : Dynamique projetée et coefficients de restitution aléatoires	40
B.3	Un cas particulier : la dimension 1 . . . . .	42
B.4	Conclusion . . . . .	45
<b>C</b>	<b>Mélanges : Non-équipartition de l'énergie</b>	<b>47</b>
C.1	Résultats expérimentaux . . . . .	47
C.2	Généralités . . . . .	48
C.3	Théorie cinétique . . . . .	48
C.4	Simulations de dynamique moléculaire . . . . .	49
C.5	Obtention et test de l'équation d'état du mélange . . . . .	51
<b>D</b>	<b>Une expérience de « Démon de Maxwell »</b>	<b>53</b>
D.1	Le phénomène . . . . .	53
D.2	Cas d'un mélange binaire . . . . .	54
D.2.1	Paramètre d'ordre pour la transition . . . . .	55
D.2.2	Résultats pour un mélange binaire . . . . .	55
<b>III</b>	<b>Réseaux complexes</b>	<b>59</b>
<b>A</b>	<b>Introduction</b>	<b>61</b>
<b>B</b>	<b>Réseaux pondérés : Caractérisation et modélisation</b>	<b>65</b>
B.1	Outils . . . . .	65
B.2	Résultats empiriques . . . . .	67
B.3	Modélisation . . . . .	69
B.4	Conclusions et perspectives . . . . .	71
<b>C</b>	<b>Cartographie de réseaux complexes</b>	<b>73</b>
C.1	Introduction . . . . .	73
C.1.1	Problématique . . . . .	73
C.1.2	Un modèle pour l'outil <code>traceroute</code> . . . . .	74
C.2	Analyse de champ moyen du processus de cartographie . . . . .	75
C.3	Exploration numérique de graphes synthétiques . . . . .	76
C.4	Conclusions et perspectives . . . . .	78

# Avant-propos

Ce mémoire d'habilitation porte sur des travaux de recherche réalisés entre fin 1998 et fin 2004, c'est-à-dire depuis mon arrivée au Laboratoire de Physique Théorique à Orsay. Les résultats présentés ici sont le fruit de collaborations avec les personnes suivantes :

- Partie I : V. Colizza (Rome), G. D'Anna (Lausanne), J. Kurchan (Paris), V. Loreto (Rome), P. Mayor (Lausanne), F. Nori (Michigan), M. Sellitto (Trieste)
- Partie II : T. Biben (Grenoble), J.N. Fuchs (Orsay), Z. Ràcz (Budapest), E. Trizac (Orsay), F. van Wijland (Orsay)
- Partie III : I. Alvarez-Hamelin (Orsay), M. Barthélemy (CEA-Bruyères-le-Châtel), L. Dall'Asta (Orsay), R. Pastor-Satorras (Barcelone), A. Vázquez (Notre-Dame), A. Vespignani (Orsay).

Je profite de ce préambule pour témoigner ma gratitude envers les membres du jury. Je voudrais également remercier toutes les personnes avec qui j'ai eu le plaisir de travailler durant ces années de recherche : qu'ils sachent que toutes ces collaborations m'ont été extrêmement agréables.

6

à *Luisa*

# Introduction générale

Ce mémoire d'habilitation à diriger les recherches présente dans ses deux premières parties des travaux dans le domaine de la physique statistique des milieux granulaires. Ce domaine a connu une grande activité dans les dernières années compte tenu de la multiplicité des questions, des expériences, des champs possibles d'application, en particulier au sein de la physique statistique hors d'équilibre. Il concerne de nombreux groupes aussi bien d'expérimentateurs que de théoriciens.

Les systèmes étudiés sont par essence hors d'équilibre ; par les échelles d'énergie mises en jeu, les milieux granulaires peuvent en effet être considérés comme à température nulle, et toute dynamique comme réponse à une stimulation externe ; la diversité des stimulations possibles, c'est-à-dire des manières d'injecter de l'énergie, résulte en une grande diversité de situations à étudier.

La première partie de ce mémoire correspond à une injection « faible » d'énergie : on étudie alors la matière granulaire dense en compaction. Après une introduction présentant les principaux résultats expérimentaux et un certain nombre d'approches théoriques, un chapitre est consacré à l'étude numérique détaillée d'un modèle certes schématique mais dont les règles simples permettent de reproduire une phénoménologie riche. Suit un chapitre à propos d'une approche ambitieuse qui tend à généraliser les outils de la thermodynamique habituelle à ces systèmes hors d'équilibre. Nous avons en effet montré dans le cadre de modèles schématiques que ces idées, d'abord mises en avant par S.F. Edwards et collaborateurs, peuvent se révéler fort pertinentes. Je présente aussi des premières expériences permettant de mesurer une « température » dans les milieux granulaires denses.

Dans la deuxième partie du mémoire, je présente des travaux visant à comprendre au contraire les « gaz granulaires », c'est-à-dire la matière granulaire soumise à des vibrations suffisamment fortes pour la fluidiser et la rendre similaire à un gaz. Les états stationnaires que l'on peut créer diffèrent cependant de ceux que l'on peut observer dans les gaz moléculaires (systèmes conservatifs), parfois de manière spectaculaire et non intuitive. Les différents chapitres présentent plusieurs de ces différences, comme la non-équipartition de l'énergie cinétique ou le phénomène du « Démon de Maxwell ».

Finalement, j'ai choisi de présenter dans une troisième partie des travaux plus récents, qui concernent l'étude des réseaux complexes. Ce domaine, qui connaît une intense activité depuis quelques années, est par nature interdisciplinaire et m'a permis d'entrer en contact avec des communautés aussi diverses que l'épidémiologie ou l'étude du réseau Internet. J'ai donc voulu inclure une description partielle de ces travaux, qui concernent une part croissante de mon activité de recherche, dans mon mémoire d'habilitation.

Liste des publications dont le contenu a fourni la matière de ce mémoire d'habilitation :

- Partie I :
  - A. Barrat, V. Loreto, *Response properties in a model for granular matter*, J. Phys. A **33** (2000) 4401.
  - A. Barrat, V. Loreto, *Memory in aged granular media*, Europhys. Lett. **53** (2001) 297.
  - A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto, M. Sellitto, *Edwards measures for powders and glasses*, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 5034.
  - A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto, M. Sellitto, *Edwards' measures : a thermodynamic construction for dense granular media and glasses*, Phys. Rev. E **63** (2001) 051301.
  - V. Colizza, A. Barrat, V. Loreto, *Definition of temperature in dense granular media*, Phys. Rev. E **65** (2002) 050301.
  - A. Barrat, V. Colizza, V. Loreto, *Fluctuation-Dissipation Ratio for Compacting Granular Media* Phys. Rev. E **66** (2002) 011310.
  - G. D'Anna, P. Mayor, A. Barrat, V. Loreto, F. Nori, *Observing Brownian motion in vibration-fluidized granular matter*, Nature **424** (2003) 909.
- Partie II :
  - A. Barrat, E. Trizac, J.N. Fuchs, *Heated granular fluids : the random restitution coefficient approach*, Eur. Phys. J. E **5** (2001) 161.
  - A. Barrat, T. Biben, Z. Rácz, E. Trizac, F. van Wijland, *On the velocity distributions of the one-dimensional inelastic gas*, J. Phys. A **35** (2002) 463.
  - A. Barrat, E. Trizac, *Random inelasticity and velocity fluctuations in a driven granular gas*, Eur. Phys. J E **11** (2003) 99.
  - A. Barrat, E. Trizac, *Lack of energy equipartition in homogeneous heated binary granular mixtures*, Gran. Matt. **4** (2002) 57.
  - A. Barrat, E. Trizac, *Molecular dynamics simulations of vibrated granular gases*. Phys. Rev. E **66** (2002) 051303.
  - A. Barrat, E. Trizac, *A molecular dynamics Maxwell Demon experiment for granular mixtures*, Mol. Phys. **101** (2003) 1713.
- Partie III :
  - A. Barrat, M. Barthélemy, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *The architecture of complex weighted networks*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. **101** (2004) 3747.
  - A. Barrat, M. Barthélemy, A. Vespignani, *Weighted evolving networks : coupling topology and weights dynamics*, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 228701.
  - A. Barrat, M. Barthélemy, A. Vespignani, *Modeling the evolution of weighted networks*, Phys. Rev. E **70** (2004) 066149.
  - A. Barrat, M. Barthélemy, A. Vespignani, *Traffic-driven model of the World Wide Web graph*, Lecture Notes in Computer Science **3243** (2004) 56.
  - L. Dall'Asta, I. Alvarez-Hamelin, A. Barrat, A. Vázquez, A. Vespignani, *Traceroute-like exploration of unknown networks : a statistical analysis*, Lecture Notes in Computer Science (2005).



Première partie

## **Milieux granulaires denses**



# Chapitre A

## Introduction

### A.1 Expériences

L'intérêt de la communauté de physique statistique [1] pour l'étude de la compaction des milieux granulaires a été en grande partie suscité par une série d'expériences réalisées à Chicago [2]. Le groupe de Jaeger et Nagel a en effet considéré de façon systématique l'évolution d'un granulaire modèle, à savoir des billes monodisperses, contenues dans un tube vertical étroit, soumis à des secousses (« taps ») d'amplitude connue (voir figure A.1) : ce forçage, dont l'intensité est quantifiée par le rapport  $\Gamma$  entre l'accélération maximale atteinte et la pesanteur, conduit à une compactification lente. La densité du système est mesurée d'une part en étudiant la hauteur maximale des billes dans la colonne, et également de façon plus locale en quatre hauteurs différentes. Les principaux résultats de l'étude sont les suivants :

- le système, initialement préparé dans un état reproductible de faible densité  $\rho_0$ , évolue lentement vers un état plus compact ; la loi d'évolution de la densité moyenne est convenablement décrite par la forme  $\rho(t) = \rho_\infty - \frac{\rho_\infty - \rho_0}{1 + B \ln(1+t/\tau)}$ , où  $\rho_\infty$ ,  $B$ ,  $\tau$  sont des paramètres de fit et  $t$  est le temps mesuré en nombre de secousses. On fera référence à cette dépendance fonctionnelle comme « loi logarithmique inverse ».
- à forçage constant  $\Gamma$ , l'évolution est plus rapide et permet de rejoindre des densités plus élevées pour des amplitudes  $\Gamma$  plus importantes
- pour des valeurs de  $\Gamma$  pas trop grandes, la densité est localement plus importante près du haut de la colonne.
- si on impose au système une amplitude de forçage d'abord faible, puis qui augmente lentement, la densité croît ; lorsqu'on diminue de nouveau  $\Gamma$ , la densité *continue à croître*. La courbe initiale de densité en fonction de  $\Gamma$  est donc *irréversible*. Une seconde séquence d'augmentation suivie de diminution de  $\Gamma$  donne par contre une courbe *réversible*. Les courbes réversible et irréversible se rejoignent pour  $\Gamma$  suffisamment grand, supérieur à  $\Gamma^* \approx 5$ .
- la densité obtenue en diminuant  $\Gamma$  depuis une valeur importante jusqu'à un  $\Gamma_0$  donné est nettement plus importante que la densité asymptotique obtenue en maintenant  $\Gamma = \Gamma_0$ .

D'autres expériences, réalisées dans la même configuration, ont aussi considéré des changements brutaux [4] dans l'intensité du forçage : l'influence à temps courts d'un tel changement est opposée à ce que l'étude à  $\Gamma$  constant pourrait laisser prévoir. En effet, on obtient lors d'une augmentation brutale de  $\Gamma$  une décompaction, tandis qu'une diminution brutale de  $\Gamma$  mène à une augmentation temporaire du taux de compaction. Cet effet, appelé « mémoire à

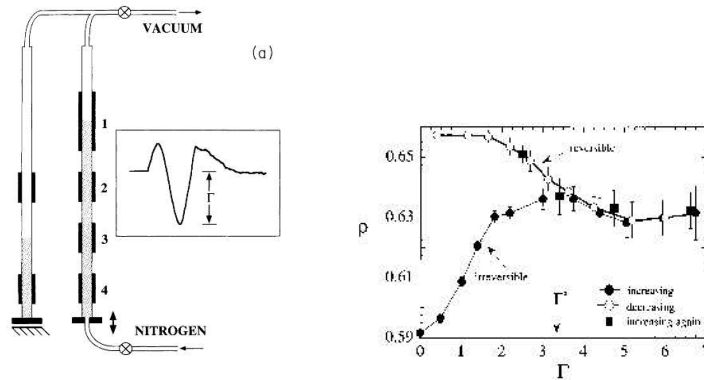


FIG. A.1 – Figure de gauche : schéma de l’expérience du groupe de Chicago. Les billes sont contenues dans un étroit cylindre. La densité est mesurée par quatre condensateurs. Figure de droite : courbes « irréversible » et « réversible » obtenues en augmentant puis en diminuant l’amplitude du forçage  $\Gamma$ .

court terme », disparaît après un régime transitoire : le taux de compaction correspondant à la nouvelle valeur de  $\Gamma$  est rejoint à temps longs. Nous verrons dans le chapitre B comment l’étude d’un modèle simple permet de comprendre l’ensemble de ces résultats en exploitant la présence d’hétérogénéités.

Les expériences réalisées à Chicago utilisaient un tube très étroit (son diamètre représente à peu près 10 billes) afin de supprimer la possibilité d’apparition de rouleaux de convection. Les effets de bords pouvant de ce fait être très importants, de nouvelles expériences ont été réalisées à Rennes dans une géométrie différente [3]. Une relaxation lente a été ainsi observée, mais la forme fonctionnelle obtenue est en exponentielle étirée, et le système rejoint un état stationnaire. Ceci est rendu possible en particulier par la présence de convection qui accélère fortement la compaction. De plus, les profils de densité ont également pu être mesurés.

Notons finalement que l’utilisation de secousses n’est pas le seul moyen de rendre un granulaire plus compact : des expériences menées au laboratoire IUSTI à Marseille ont étudié le cisaillement d’une boîte parallélépipédique remplie de billes [5]. Le cisaillement est réalisé très lentement, son amplitude  $\theta_{max}$  caractérisant donc l’intensité du forçage. Une phénoménologie similaire au cas des secousses a été obtenue, avec cependant la présence de cristallisation à partir des parois. De plus, grâce à l’utilisation de billes transparentes et d’un liquide iso-indice, les trajectoires individuelles de billes colorées peuvent être suivies durant la dynamique. Des phénomènes tels que l’effet de « cage »<sup>1</sup> ont ainsi été mis en évidence pour la première fois de manière directe dans les granulaires.

## A.2 Approches théoriques

Diverses approches théoriques ont été proposées pour comprendre la phénoménologie de la compaction des milieux granulaires.

<sup>1</sup>une particule est piégée par la « cage » formée par ses voisins proches ; deux types de mouvements sont alors présents : petits déplacements à l’intérieur de la cage, et sauts plus importants lorsque la particule s’échappe de la cage.

Des simulations partant du niveau microscopique ont été réalisées par Mehta et al. [6] : les particules sont simulées de la manière la plus réaliste possible, et des réarrangements coopératifs sont autorisés. Ces simulations prédisaient une évolution du système avec deux échelles de temps (correspondant à des mouvements individuels et collectifs), avec une dépendance en temps de la densité en désaccord avec les expériences ultérieures, ce qui a limité l'intérêt porté à ces travaux.

Le modèle du « Parking » [7] fut proposé par l'équipe ayant réalisé les expériences de Chicago : il s'agit de décrire l'évolution d'une couche donnée du granulaire. Deux mécanismes sont alors en compétition : l'adsorption d'un grain venant d'une autre couche, si le volume libre dans la couche est suffisant, et l'éjection de grains due au forçage. Les particules ne peuvent pas diffuser à l'intérieur de la couche, et bien sûr ne peuvent pas se recouvrir. Ce modèle, très phénoménologique, présente l'avantage de pouvoir être traité analytiquement en dimension 1. En particulier, dans un certain régime temporel, la densité varie comme l'inverse du logarithme du temps.

D'autres modèles phénoménologiques de différents types ont été proposés et étudiés dans les dernières années. En particulier, des modèles de particules sur réseau en dimension 1 peuvent être ramenés à des systèmes de spins. Plusieurs groupes ont travaillé sur ces modèles, démontrant une phénoménologie riche [8, 9, 10, 11]. L'analogie des « coups » donnés aux granulaires a même permis de définir et d'étudier un nouveau type de dynamique pour ces systèmes de spins (voir en particulier la thèse d'A. Lefèvre [10]).

Un certain nombre de modèles microscopiques considèrent des particules diffusant sur un réseau : bien que ceci ne soit pas réaliste, l'idée est de définir des modèles simples qui peuvent être analysés en détail numériquement, et qui conservent certains ingrédients essentiels pour reproduire la riche phénoménologie de la compaction des granulaires. La présence du champ de gravité et du forçage est simulée par l'utilisation d'un réseau carré ou cubique « penché », avec une direction privilégiée (la verticale), et des probabilités différentes pour les particules de diffuser vers le haut ( $p_{up}$ ) ou vers le bas ( $p_{down}$ ). L'amplitude du forçage est alors donnée par le rapport  $x = p_{up}/p_{down}$  de ces probabilités. Dans tous les cas, les particules sont confinées dans une boîte avec un fond fixe, et diverses contraintes géométriques ou cinétiques sont utilisées pour simuler les contraintes stériques des granulaires réels. Parmi ces modèles, on peut citer :

- le gaz sur réseau frustré [12], directement inspiré par l'étude des verres de spin : chaque particule  $i$  peut se trouver dans deux états, décrits par une variable  $s_i = \pm 1$ . Les particules diffusent, avec la restriction que deux particules voisines doivent satisfaire la contrainte  $s_i s_j = \epsilon_{ij}$ , où les  $\epsilon_{ij} = \pm 1$  sont des variables aléatoires gelées qui introduisent de la frustration et ralentissent ainsi la dynamique à haute densité.
- le modèle de Kob et Andersen [13], d'abord défini dans le contexte des liquides surfondus, considère un gaz sur réseau, en dimension 3 ; les particules ponctuelles diffusent sur le réseau avec la restriction suivante : une particule peut aller d'un site à un site voisin si le site d'arrivée n'est pas occupé et si de plus la particule a moins de  $m$  voisins aussi bien dans sa position initiale que dans sa position finale (pour un réseau cubique en dimension 3, on utilise en général  $m = 4$ ). Cette contrainte a pour but de reproduire la « cage » formée pour chaque grain par les grains qui l'entourent et produit une forte croissance du temps de relaxation à haute densité<sup>2</sup>. Ce modèle, bien que très simple et schématique, reproduit de nombreux aspects de la phénoménologie des verres [15, 16] et des granulaires en compaction [17].

---

<sup>2</sup>Pour des résultats exacts récents sur cette croissance, voir [14]

- dans le modèle « Tetris » [18], les contraintes sont au contraire purement géométriques : les particules sont des bâtonnets rigides qui peuvent prendre deux orientations orthogonales, correspondant aux axes du réseau. La frustration vient du fait que deux particules ayant la même orientation ne peuvent occuper deux sites qui sont voisins dans cette direction. Ce modèle présente deux états « antiferromagnétiques » de densité 1, et la dynamique peut être décrite en termes de croissance de domaines, avec  $\rho_\infty = 1$ . Cette pathologie peut être éliminée en considérant une variante de ce modèle, qui utilise des particules de formes aléatoires. Une étude détaillée de cette variante a été présentée dans [19, 20]. Le chapitre B présente un résumé de cette étude.

Mentionnons finalement une approche théorique très ambitieuse, initialement développée par S.F. Edwards et collaborateurs [21], qui a connu un renouveau d'intérêt dans les dernières années. Aux temps longs, la dynamique de compaction mène le granulaire à effectuer un certain échantillonnage de l'espace des configurations a priori accessible. Il s'agit alors de comprendre comment obtenir cet échantillonnage de façon statique, c'est-à-dire de définir une mesure de l'espace des phases qui le reproduise. La mesure proposée par Edwards est construite en considérant une moyenne sur toutes les configurations *bloquées* (c'est-à-dire telles qu'aucun grain ne peut bouger sans un apport extérieur d'énergie) de volume donné. L'hypothèse consiste donc à traiter toutes les configurations bloquées de volume donné comme équivalentes. Cette approche vise donc à décrire un granulaire dense d'une manière thermodynamique, en utilisant un petit nombre de paramètres : la simple donnée de la densité rejointe *dynamiquement* à temps longs, par exemple, permettrait, via la construction de la mesure d'Edwards à cette densité, de connaître et prédire d'autres observables comme des fonctions de corrélation. Nous verrons au chapitre C comment nous avons pu tester l'intérêt et la validité de cette approche dans le cas de deux modèles sur réseau, à savoir le modèle de Kob et Andersen et une variante du modèle Tetris [22, 23]. De nombreuses autres études ont également été réalisées pour divers modèles, [8, 9, 11, 24, 25, 26, 27, 28], menant à la conclusion importante que la mesure d'Edwards a une validité approchée pour reproduire les observables obtenues dynamiquement ; la mesure peut être améliorée si la mesure est restreinte en fixant non seulement l'énergie mais également d'autres observables. Des expériences sont actuellement en cours de développement pour apporter un éclairage également expérimental à cette problématique [29, 30].

Les deux chapitres suivants présentent donc d'une part une étude numérique d'un modèle de particules sur réseau (chapitre B), et d'autre part une présentation de la mesure d'Edwards et des méthodes que nous avons utilisées pour tester sa pertinence (chapitre C).

## Chapitre B

# Le modèle « Tetris » avec formes aléatoires

Comme brièvement expliqué dans le chapitre précédent, ce modèle considère des particules impénétrables diffusant sur un réseau carré incliné à  $45^\circ$ . L'ingrédient principal réside dans la frustration géométrique dictée par les formes aléatoires des particules : chaque particule est schématisée par une croix à quatre branches de longueurs aléatoires  $l_{NE}$ ,  $l_{NW}$ ,  $l_{SW}$ ,  $l_{SE}$ , occupant les liens du réseau (figure B.1). Deux particules ne peuvent alors se trouver sur des sites voisins que si la somme des longueurs des bras sur le lien joignant ces deux sites est inférieure au pas du réseau.

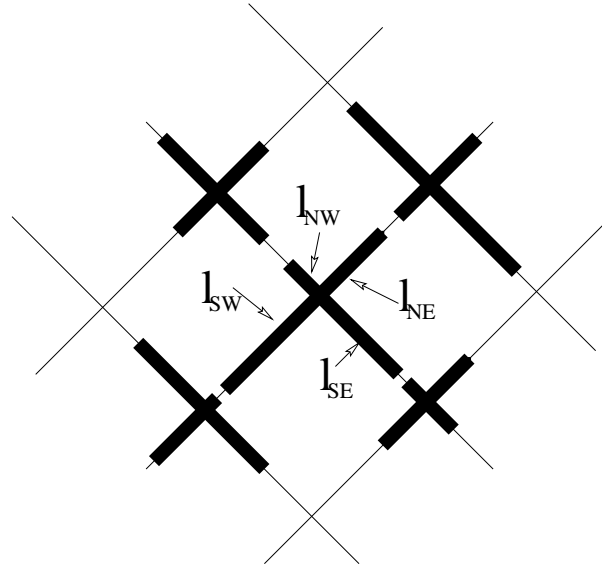


FIG. B.1 – Exemple d'arrangement local de particules pour le modèle Tetris avec formes aléatoires : chaque particule peut être schématisée par une croix à quatre branches de longueurs aléatoires  $l_{NE}$ ,  $l_{NW}$ ,  $l_{SW}$ ,  $l_{SE}$ .

La gravité est introduite en considérant que les particules diffusent plus facilement vers le bas (probabilité  $p_{down}$ ) que vers le haut (probabilité  $p_{up}$ ), et le forçage est quantifié par la

quantité  $x = p_{up}/p_{down}$ , défini entre 0 et 1 (car  $p_{up} < 1/2$ ) : si le système n'était soumis à aucun forçage, on aurait une simple relaxation à  $p_{up} = 0$ .

Les particules sont confinées sur un réseau avec conditions aux bords latérales périodiques, mais fond rigide à hauteur  $z = 0$ . Le système est initialisé en laissant diffuser les particules une à une depuis le sommet jusqu'au fond de la boîte. On obtient ainsi un système peu dense. Le forçage commence alors, selon une dynamique de type Monte-Carlo : à chaque pas de temps, les particules tentent de diffuser dans une direction choisie aléatoirement selon les probabilités  $p_{up}$  et  $p_{down}$  (droite et gauche étant choisies avec probabilités égales) ; le mouvement est accepté si aucune contrainte stérique n'est violée.

L'évolution du système est quantifiée par la mesure d'une part de quantités globales, comme l'énergie potentielle totale (ou hauteur moyenne), la densité moyenne dans la partie inférieure de la boîte (le quart ou la moitié), et d'autre part de quantités plus locales, comme les profils de densité. Nous verrons comment ces profils  $\rho(z, t)$ , qui mesurent la densité moyenne à hauteur  $z$  et instant  $t$ , permettent d'interpréter les résultats des simulations.

Nous avons étudié aussi bien le cas d'un forçage constant que l'effet de variations, lentes ou brutales, de son intensité.

## B.1 Forçage constant

A  $x$  constant, la densité du système, mesurée dans la moitié inférieur de la boîte, croît lentement (figure B.2), et l'évolution peut être décrite par une loi logarithmique inverse. De plus, si à un temps  $t$  donné on mesure la densité rejointe par le système en fonction de  $x$ , on s'aperçoit de l'existence d'une valeur optimale de  $x$ , qui dépend de la zone dans laquelle est mesurée la densité.

Afin de mieux comprendre les phénomènes se produisant durant la compaction, il convient d'étudier comment les profils de densité  $\rho(z, t)$  évoluent au cours du temps. Cette étude est essentielle car il est clair que deux systèmes peuvent avoir la même densité ou la même énergie potentielle mais avoir des profils de densité très différents.

La figure B.3 montre des diagrammes spatio-temporels d'évolution des profils pour diverses amplitudes de forçage  $x$ . Alors que les courbes d'évolution de la densité ou de la hauteur moyenne ont des formes similaires pour différentes valeurs de  $x$ , de fortes différences sont ici mises en évidence. La première constatation est la possibilité de diviser grossièrement le système en deux : le cœur et l'interface, dont les évolutions sont couplées.

Tout d'abord, la largeur de l'interface est plus large pour de plus fortes amplitudes. D'autre part, une couche très dense se forme à faible amplitude juste sous l'interface. La formation de cette couche vient du fait que la diffusion est plus facile grâce au volume libre au-dessus de l'interface, et donc les particules proches de l'interface peuvent plus facilement se réarranger localement et donner des configurations plus denses. Cependant, cette couche dense va bloquer la compaction à temps longs en agissant comme une barrière au réarrangement des particules du cœur qui n'ont pas de volume libre à disposition. Ceci est particulièrement visible sur la figure B.3 : à temps longs, la seule évolution notable consiste en un élargissement très lent de la couche dense, mais la densité du cœur reste faible.

A grand  $x$  par contre, les particules diffusent plus facilement, et l'interface est nettement plus large : la compaction du cœur en est donc facilitée, et sa densité continue à croître à temps longs. Ainsi, à temps longs, un système soumis à un forçage plus fort va être globalement plus compact. A trop grand forçage néanmoins, l'interface devient tellement large qu'elle empiète



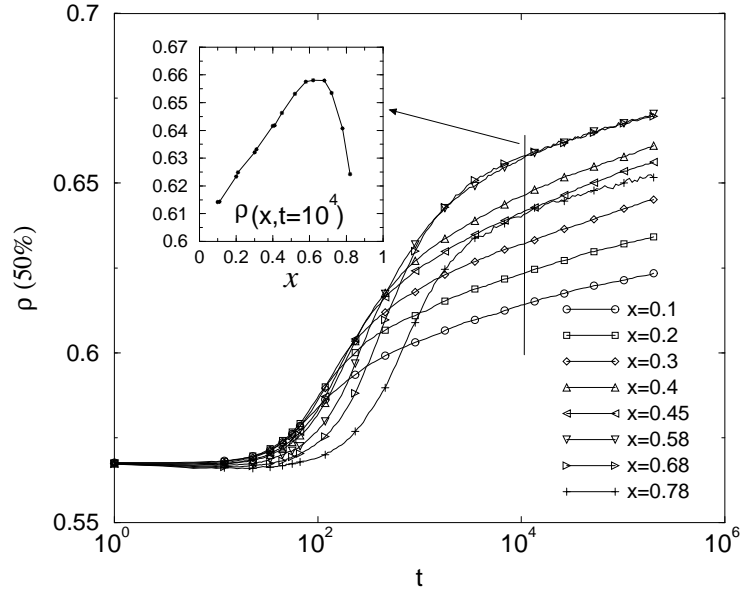


FIG. B.2 – Evolution de la densité moyenne dans les 50% inférieurs du système, pour différentes amplitudes du forçage. L'insert montre la densité à  $t = 10^4$  en fonction de  $x$ .

sur la zone de mesure de la densité : la densité mesurée diminue alors : ceci explique l'existence d'une valeur optimale de  $x$  comme observé en figure B.2.

Notons finalement que les évolutions de l'interface et du cœur se font sur des échelles de temps très différentes : l'interface, avec sa couche dense ou non, se forme rapidement, tandis que le cœur évolue ensuite beaucoup plus lentement.

Pour résumer, des amplitudes faibles permettent de rendre compacte une zone proche de l'interface, mais cette zone bloque ensuite l'évolution des couches plus profondes, tandis que des amplitudes fortes compactifient de façon efficace les zones plus profondes tout en donnant une interface peu dense. Ceci nous amène à une meilleure compréhension de l'efficacité des « cycles ».

## B.2 Cycles

La meilleure façon d'obtenir un granulaire très dense est de commencer par un forçage très énergétique, puis d'en diminuer l'amplitude. Cette constatation de tous les jours (utilisée par exemple pour compactifier du sucre, du café dans un récipient) a été vérifiée et quantifiée expérimentalement (cf. les courbes irréversibles-réversibles mentionnées au chapitre précédent).

Nous avons étudié cet effet dans le cadre du modèle Tetris, en faisant varier  $x$  lentement d'une grande valeur  $x_I$  jusqu'à  $x_F$  : la compaction est d'autant plus efficace que l'amplitude du forçage est diminuée plus lentement et que l'amplitude de départ est grande. On constate par exemple que le profil de densité obtenu en passant d'une amplitude  $x_I = 0.9$  à  $x_F = 0.1$  (en pas de  $\Delta x = 0.01$  et  $10^4$  pas de temps à chaque valeur de  $x$  intermédiaire), montré en figure B.4, est très différent des profils obtenus à amplitude constante : le cœur est très dense, de façon homogène, et l'interface très étroite.

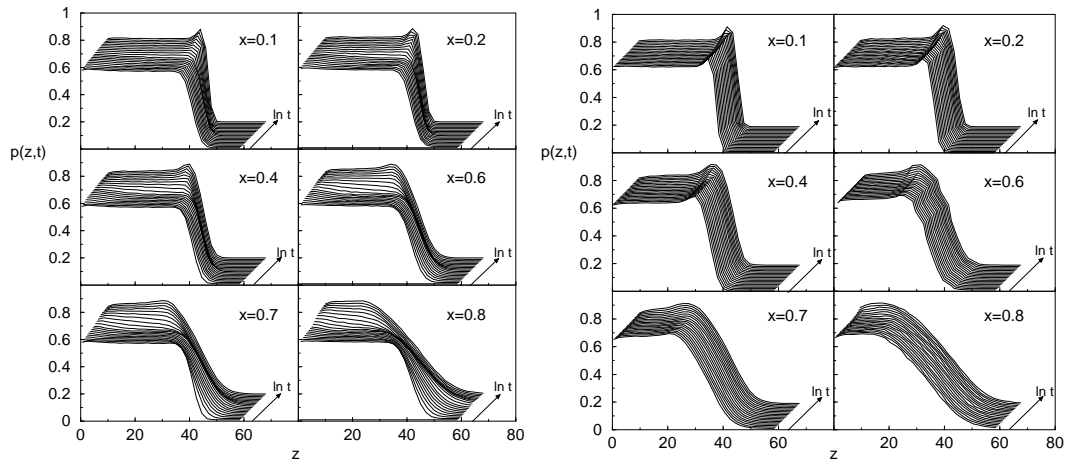


FIG. B.3 – Profils de densité pour diverses valeurs de  $x$ , à temps courts ( $t = 0$  à  $t = 10^4$ ) à gauche et à temps longs ( $t = 10^4$  à  $t = 10^6$ ) à droite. A petit  $x$  on observe la formation d'une couche dense, et une interface plus large à grand  $x$ .

L'étude de la section précédente permet de comprendre ces résultats : la grande valeur initiale de  $x$  permet de compactifier les couches profondes ; la diminution progressive de  $x$  va compactifier les couches de plus en plus proches de l'interface, sans perturber les couches déjà compactes, jusqu'à ce que, à petit  $x$ , l'interface elle-même devienne compacte. Bien sûr, plus le processus est lent, et plus les couches successives atteignent des densités élevées.

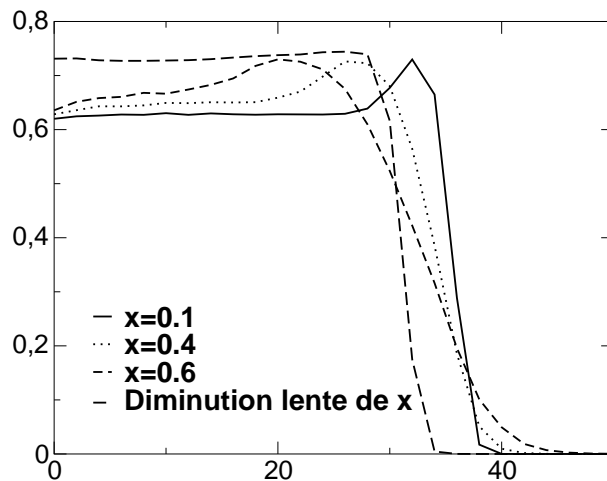


FIG. B.4 – Profils de densité obtenus à forçage constant et lors d'une diminution lente du forçage.

### B.3 Effet mémoire

Les effets de mémoire qui ont été mis en évidence expérimentalement [4] peuvent tout aussi bien être compris en analysant les profils de densité : l'expérience concluait essentiellement au fait que la densité seule ne suffisait pas à caractériser l'état du système, ce qui est précisément la raison de l'utilisation des profils de densité.

La procédure consiste à laisser le système évoluer sous un forçage  $x_1$  pendant un temps  $t_w$ , puis à changer brutalement l'amplitude en  $x_2$  et à revenir à l'amplitude  $x_1$  à  $t_w + \Delta t$ . Notons que cette procédure est directement inspirée des expériences de saut en température dans les verres de spins [31].

Le premier effet observable est une mémoire à court terme, également obtenue dans les expériences (figure B.5). Cet effet est symétrique et correspond à une réponse contre-intuitive par rapport à l'évolution de la densité à  $x$  constant : le système a donc une mémoire de son évolution avant  $t_w$ . En effet, si  $x_2 > x_1$  on obtient une décompaction à temps courts après  $t_w$  tandis que, si  $x_2 < x_1$ , la vitesse de compaction commence par augmenter sensiblement. Après ce transitoire, le taux de compaction change et se rapproche de celui observé à constant  $x = x_2$  : compaction plus rapide si  $x_2 > x_1$ , et plus lente si  $x_2 < x_1$ . Le deuxième effet de mémoire est observé uniquement si  $x_2 < x_1$ , et pour  $t_w$  suffisamment grand : dans ce cas, le système est déjà très compact à  $t_w$ , et évolue très peu durant  $\Delta t$ . A  $t_w + \Delta t$ ,  $x$  est brutalement augmenté de  $x_2$  à  $x_1$ , une rapide décompaction se produit donc, et la courbe d'évolution de la densité repart du point rejoint après l'évolution à  $x_1$  à  $t_w$  : le système a gardé la mémoire de son état à  $t_w$ . Pour  $x_2 > x_1$ , le système évolue notablement entre  $t_w$  et  $\Delta t$  et aucune mémoire à long terme ne peut donc exister.

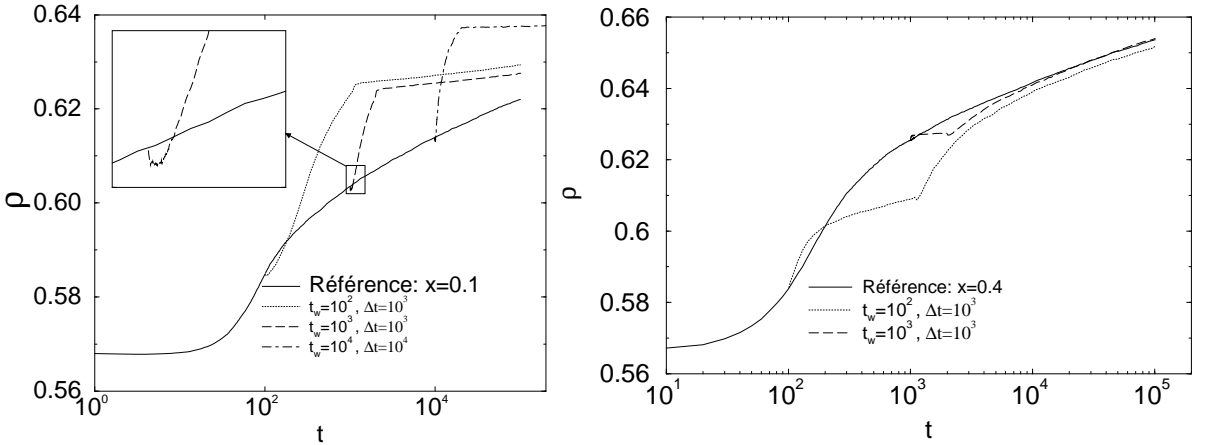


FIG. B.5 – Illustration de l'effet mémoire à temps courts. Gauche :  $x_1 = 0.1$ ,  $x_2 = 0.4$  ; une décompaction est observée juste après l'augmentation du forçage. Droite :  $x_1 = 0.4$ ,  $x_2 = 0.1$  ; à temps courts une brusque accélération de la compaction se produit.

Ces résultats peuvent être interprétés grâce aux profils de densité. Dans le premier cas, lorsque  $x_2 > x_1$ , le premier effet est une décompaction globale, en particulier à l'interface qui, une fois moins compacte, permet plus facilement les réarrangements et finalement une meilleure compaction du cœur. Au contraire, dans le second cas, lorsque  $x$  est abaissé brutalement, les particules vont avoir tendance à aller vers le bas rapidement, ce qui donne temporairement une

accélération de la compaction, en particulier au niveau de l'interface qui réagit rapidement. L'interface plus compacte bloque par contre les futurs réarrangements et finit par ralentir la compaction. Après  $t_w + \Delta t$ , l'augmentation du forçage supprime la couche dense et la compaction peut recommencer. Si  $t_w$  est assez grand, le cœur du système est déjà assez compact et le forçage plus faible pendant  $\Delta t$  ne lui permet pas d'évoluer. A  $t_w + \Delta t$ , le forçage est de nouveau augmenté ; l'interface relaxe rapidement ce qui ramène le système à sa situation à  $t_w$ .

## B.4 Conclusion

L'étude numérique détaillée du modèle Tetris avec particules de forme aléatoire a permis de montrer l'intérêt de ce modèle : l'ingrédient simple de volume exclu entre des particules de formes diverses mène à une frustration géométrique induite par la dynamique de compaction, et donc à un fort ralentissement de cette dynamique. La riche phénoménologie de la compaction granulaire est ainsi reproduite, et analysée en détails par l'utilisation des profils de densité (il est à noter que certains aspects, comme l'existence d'une couche dense sous la surface libre, ont été en fait confirmés par des expériences ultérieures [3]). L'analyse des profils de densité montre bien l'importance des hétérogénéités, souvent négligées dans des modèles plus phénoménologiques, pour l'interprétation de certains effets comme l'effet mémoire. Finalement, ce modèle se révèle donc une approche valide pour effectuer analyses et prédictions. En particulier, il fait partie des modèles « simples » de matériaux granulaires permettant d'étudier d'autres approches telles que celle présentée au chapitre suivant : la possibilité de représenter le granulaire en compaction par un nombre limité de variables de type thermodynamique, selon les idées de S.F. Edwards.

## Chapitre C

# Utilisation de notions thermodynamiques

Les systèmes granulaires constituent l'un des plus fameux exemples de systèmes hors d'équilibre; en particulier, la température habituelle n'y joue aucun rôle. Le fait que ces systèmes soient constitués en général d'un grand nombre de particules incite cependant à vouloir les traiter par des méthodes de type thermodynamique. Il est donc raisonnable de chercher à comprendre jusqu'à quel point de telles approches sont envisageables. En particulier, est-ce que des concepts comme température ou entropie peuvent être utilisés ?

Une approche thermodynamique est justifiée en général lorsqu'il est possible d'identifier une distribution laissée invariante par la dynamique (par exemple l'ensemble microcanonique) et de supposer que le système va rejoindre cette distribution, sous des conditions appropriées d'ergodicité. Dans le cas des granulaires cependant, de l'énergie est perdue lors des collisions (et dissipée dans des degrés de liberté internes), et regagnée par contact avec des sources non thermiques : ni l'ensemble microcanonique, ni aucun autre ensemble simple ne sont invariants par cette dynamique. Ceci pose un sérieux problème pour toute tentative de construire une thermodynamique.

Le concept de température a en fait été largement utilisé dans le contexte des milieux granulaires. La définition la plus simple correspond au cas des granulaires dilués sous forte agitation, ou « gaz granulaires » (voir partie II) : par analogie avec les gaz à l'équilibre, la « température granulaire » est définie en termes de l'énergie cinétique moyenne par particule. Dans les milieux granulaires denses, la situation est plus complexe, en particulier parce qu'il est même difficile de rejoindre un état stationnaire. Ces systèmes présentent du vieillissement [32, 20] et des phénomènes de mémoire [4, 20]. Les analogies avec d'autres systèmes exhibant du vieillissement, comme les verres, ont mené à la définition de températures dynamiques à partir de la violation du théorème Fluctuation-Dissipation [33], ce que ce chapitre présente.

### C.1 Théorème Fluctuation-Dissipation et généralisations

Pour un gaz ou un liquide à l'équilibre en contact avec un thermostat à température  $T$ , une des versions du théorème fluctuation-dissipation (FD) relie la diffusion aléatoire et la mobilité d'une particule donnée du système selon la relation d'Einstein  $\langle [r(t) - r(t')]^2 \rangle = 2dT \frac{\delta \langle r(t) - r(t') \rangle}{\delta f}$ , où  $r$  est la position de la particule et  $\delta f$  est une petite perturbation constante (la notation  $\langle \dots \rangle$  correspond à une moyenne sur diverses réalisations).

Rien ne garantit la validité d'une telle relation dans des systèmes hors d'équilibre. C'est encore plus vrai dans des systèmes comme les granulaires, pour lesquels on ne sait pas quelle quantité devrait jouer le rôle de la température. Des développements récents dans la théorie des verres, et en particulier au sujet de leur dynamique hors d'équilibre, ont montré que dans des systèmes évoluant lentement, *vieillissant*, la relation FD est modifiée d'une façon très intéressante (voir [34] pour un article de revue récent). Pour une certaine classe de modèles de champ moyen, qui contient de façon schématique l'essentiel de la phénoménologie des systèmes vitreux [35], la dynamique hors d'équilibre a été résolue analytiquement [36], ce qui a permis de révéler l'existence d'une température *dynamique*  $T_{dyn}$  pour tous les degrés de liberté lents correspondants aux réarrangements structuraux [37, 38]. Cette température dynamique remplace en fait la température du bain thermique dans la relation d'Einstein ; bien que différente de la température externe, elle a les bonnes propriétés définissant une température [37]. En particulier, sa mesure peut être faite en utilisant n'importe laquelle des relations FD reliant la corrélation et la réponse d'une observable [39]. La relation FD est ainsi devenue un outil très étudié dans le contexte de la dynamique vitreuse [40, 34].

Les analogies entre les systèmes vitreux thermaux et athermaux [41] ont stimulé les études portant sur l'existence de températures dynamiques ou effectives à partir de relations FD dans les milieux athermaux. En particulier, l'étude de relations de type relation d'Einstein dans les milieux granulaires denses en compaction lente a montré l'apparition de températures dynamiques [22, 23, 42] en relation avec la construction thermodynamique proposée par S.F. Edwards mentionnée en introduction. D'autres travaux se sont par ailleurs concentrés sur une autre relation FD, qui relie les fluctuations d'énergie et la chaleur spécifique, avec le même type de résultats [8, 9, 24].

Notons que jusqu'ici la plupart des travaux dans ce domaine sont théoriques et que peu d'expériences ont mesuré des relations FD dans les milieux granulaires. La dernière partie de ce chapitre présente brièvement un exemple récent d'expérience allant dans cette direction, concernant un milieu granulaire dense, mais dans un régime de type « liquide » [43].

## C.2 L'approche d'Edwards

Comme expliqué au chapitre A, S.F. Edwards et ses collaborateurs ont proposé pour les milieux granulaires denses un équivalent à l'ensemble microcanonique [21, 44, 45] : l'idée est de reproduire les observables obtenues dynamiquement à temps longs en mesurant tout d'abord la densité du système, puis en calculant la valeur des observables dans un ensemble formé par toutes les « configurations bloquées » à la densité en question. Les configurations bloquées sont définies comme celles pour lesquelles aucun grain ne peut bouger.

Cet « ensemble d'Edwards » mène naturellement à la définition d'une entropie  $S_{Edw}$ , donnée par le logarithme du nombre de configurations bloquées à volume ou densité donné, et de sa densité  $s_{Edw} \equiv S_{Edw}/N$  (où  $N$  est le nombre de particules).

Le fait que les configurations bloquées soient importantes dans un granulaire en compaction est assez intuitif. L'hypothèse forte cependant consiste à dire que les configurations rejointes dynamiquement sont vraiment les configurations bloquées typiques à cette énergie ou densité. Si l'ensemble statistique retenu était formé en contraignant toutes les observables macroscopiques à leur valeur mesurée dynamiquement, la construction serait triviale. Le fait qu'il suffise de contraindre la densité pour obtenir la valeur d'autres observables (même s'il s'agit peut-être seulement d'une approximation) est hautement non-trivial.

Les progrès récents en théorie des systèmes vitreux mentionnés ci-dessus (section C.1) ont permis de clarifier et de soutenir cette hypothèse. En effet, la température dynamique qui apparaît dans la relation d'Einstein correspond exactement aux idées d'Edwards pour les modèles de champ moyen : on peut en effet y identifier les minima d'énergie (qui correspondent aux configurations bloquées), et calculer  $1/T_{Edw}$  comme la dérivée de leur entropie par rapport à l'énergie. Un calcul explicite montre alors que  $T_{Edw}$  est égal à  $T_{dyn}$  obtenue à partir de la dynamique hors d'équilibre du modèle en contact avec un thermostat à température quasi-nulle[46]. D'autre part, étant donnée l'énergie atteinte à temps longs  $E(t)$ , la valeur de n'importe quelle observable est également donnée par une moyenne plate sur tous les configurations bloquées d'énergie  $E(t)$ . On peut traiter au même niveau d'approximation des systèmes ayant d'autres types d'injection d'énergie, sans changer les résultats, même en l'absence de température d'un bain thermique [47].

Le scénario à la Edwards est donc réalisé au niveau du champ moyen et pour des faibles injections d'énergie. Nous nous sommes donc intéressés à la question de savoir si ces résultats s'étendent à des modèles plus réalistes. Nous avons pour cela développé une méthodologie pour analyser des modèles reproduisant la phénoménologie de la compaction granulaire.

### C.2.1 Stratégie générale

Notons qu'une première interprétation de l'hypothèse d'Edwards consisterait à proposer que les configurations rejointes dynamiquement ont les propriétés macroscopiques des configurations bloquées typiques. Ceci impliquerait que le système se bloque à la densité pour laquelle le nombre de configurations bloquées est maximal. En fait, on s'aperçoit rapidement que ces configurations, en grande majorité, sont beaucoup moins compactes que celles obtenues dynamiquement. On doit donc renoncer à prédire la densité rejointe et se contenter de la mesurer lors de l'évolution dynamique. La stratégie est donc d'amener le système dans une situation de très faible injection d'énergie, dans laquelle il continue à se compacter très lentement. La mesure d'Edwards est alors construite comme une mesure uniforme sur les configurations bloquées à la densité rejointe par la dynamique.

Afin de vérifier l'hypothèse d'Edwards, nous avons montré comment construire la mesure d'Edwards de façon systématique dans des modèles en dimension finie (donc au-delà du champ moyen). On peut ainsi calculer l'entropie et d'autres observables et les comparer avec les observables obtenues par la dynamique. La construction est illustrée par le cas du modèle de Kob-Andersen (KA) mentionné au chapitre A, qui considère des particules sur un réseau en trois dimensions, avec au plus une particule par site et des contraintes purement cinétiques : une particule peut bouger d'un site à un site voisin si elle a strictement moins que  $m$  voisins dans sa position initiale et dans sa position finale. A noter que nous avons obtenu des résultats équivalents en utilisant le modèle Tetris présenté au chapitre précédent, et que J. Kurchan et H. Makse ont également présenté des résultats similaires dans un modèle de sphères dures sous cisaillement [42].

### C.2.2 Equilibre

Dans le cas du modèle KA, la règle d'évolution dynamique implique que la distribution d'équilibre est simple : toutes les configurations d'une densité donnée (qui respectent la règle d'une particule au plus par site) sont équiprobables (le Hamiltonien est 0 puisqu'aucune interaction statique n'existe). La densité et le potentiel chimique sont alors reliés par

$\rho = 1/(1 + \exp(-\beta\mu))$ , et l'entropie d'équilibre par particule vaut :

$$s_{equil}(\rho) = -\rho \ln \rho - (1 - \rho) \ln(1 - \rho) \rightarrow \frac{ds_{equil}}{d\rho} = -\beta\mu. \quad (C.1)$$

Notons que dans ce modèle, la température  $1/\beta$  apparaît seulement en facteur du potentiel chimique. On peut donc la fixer arbitrairement à 1. Notons aussi que le facteur de structure est une simple constante  $g_{equil}(r) = \rho^2$  : aucune corrélation n'existe puisque les particules sont mises au hasard sur le réseau. Ceci permettra de comparer plus facilement avec les facteurs de structure obtenus dynamiquement.

### C.2.3 La mesure d'Edwards

Afin de construire et d'échantillonner la mesure d'Edwards, qui considère l'ensemble des configurations bloquées, le pas crucial consiste en l'introduction d'un *modèle auxiliaire* [22] : l'énergie auxiliaire  $E_{aux}$  est définie comme le *nombre de particules mobiles* (une particule est considérée comme mobile si elle peut se déplacer en respectant la règle dynamique du modèle d'origine). La mesure d'Edwards est alors construite comme l'ensemble des états fondamentaux ( $E_{aux} = 0$ ) du modèle auxiliaire, qui peut s'obtenir par une procédure Monte-Carlo de « refroidissement », à densité fixée, de la température auxiliaire  $T_{aux}$  (avec  $\beta_{aux} = 1/T_{aux}$ ). Il est essentiel de noter que la dynamique Monte-Carlo du modèle auxiliaire ne doit pas forcément respecter les règles dynamiques du modèle d'origine, ce qui permet un échantillonnage efficient même à haute densité grâce par exemple à des mouvements Monte-Carlo non-locaux.

A partir de la mesure de l'énergie auxiliaire pendant le « refroidissement » à densité donnée  $\rho$ ,  $E_{aux}(\beta_{aux}, \rho)$ , (et de la densité d'énergie  $e_{aux}(\beta_{aux}, \rho)$ ), on peut calculer l'entropie d'Edwards définie comme :

$$s_{Edw}(\rho) \equiv s_{aux}(\beta_{aux} = \infty, \rho) = s_{equil}(\rho) - \int_0^\infty e_{aux}(\beta_{aux}, \rho) d\beta_{aux} \quad (C.2)$$

où  $s_{equil}(\rho) = s_{aux}(\beta_{aux} = 0, \rho)$ . La figure C.1 montre le résultat obtenu pour  $s_{Edw}(\rho)$  à partir de cette formule, comparé avec  $s_{equil}(\rho)$ .

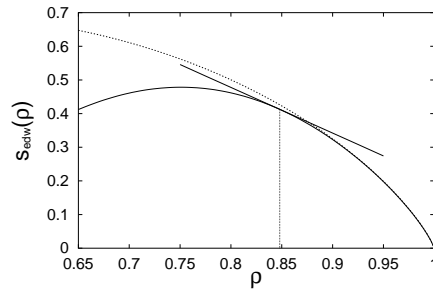


FIG. C.1 – Densité d'entropie d'Edwards  $s_{Edw}(\rho)$  (trait plein) et d'entropie d'équilibre  $s_{equil}(\rho)$  (courbe pointillée) pour le modèle Kob-Andersen.

La pente de la tangente à  $s_{Edw}(\rho)$  permet d'obtenir la « température d'Edwards »  $T_{Edw}(\rho)$ .

$$T_{Edw}^{-1} = -\frac{1}{\mu} \frac{ds_{Edw}(\rho)}{d\rho} = \frac{ds_{Edw}(\rho)}{d\rho} / \frac{ds_{equil}(\rho)}{d\rho}. \quad (C.3)$$



De façon similaire, le facteur de structure dans la mesure d'Edwards est obtenu comme la limite du facteur de structure du modèle auxiliaire quand la température auxiliaire tend vers 0 :

$$g_{Edw}(r) = \lim_{\beta_{aux} \rightarrow \infty} g_{aux}(r, \beta_{aux}). \quad (\text{C.4})$$

### C.2.4 Dynamique de compaction

La dynamique de compaction est obtenue en essayant d'augmenter la densité du système, à partir d'une situation de basse densité pour laquelle le système peut être considéré comme à l'équilibre. Pour le modèle KA, on augmente lentement le potentiel chimique imposé ; lorsque ce potentiel chimique devient suffisamment grand, les contraintes dynamiques empêchent le système d'atteindre la densité voulue : la dynamique résultante est une compaction très lente hors d'équilibre.

Au cours de cette compaction, on enregistre la densité  $\rho(t)$  ainsi que la densité de particules mobiles  $\rho_m(t)$  : celle-ci devient systématiquement plus faible que la densité de particules mobiles des configurations d'équilibre à la même densité moyenne. Ceci suggère déjà que par exemple les facteurs de structure seront différents à l'équilibre et dans les configurations typiques obtenues par compaction lente.

L'existence d'une relation d'Einstein est testée en mesurant la mobilité des particules

$$\chi(t_w, t_w + t) = \frac{1}{dN} \sum_a \sum_{k=1}^N \frac{\delta \langle (r_k^a(t_w + t) - r_k^a(t_w)) \rangle}{\delta f}, \quad (\text{C.5})$$

obtenue par l'application de forces aléatoires sur les particules entre les temps  $t_w$  et  $t_w + t$ , ainsi que leur déplacement quadratique moyen

$$B(t_w, t_w + t) = \frac{1}{dN} \sum_a \sum_{k=1}^N \langle (r_k^a(t_w + t) - r_k^a(t_w))^2 \rangle, \quad (\text{C.6})$$

( $N$  est le nombre de particules ;  $a = 1, \dots, d$  désigne les dimensions d'espace :  $d = 3$  pour le KA ;  $r_k^a$  est la position de la particule  $k$  sur le réseau). En effet, à l'équilibre, les quantités  $\chi(t_w, t_w + t)$  et  $B(t_w, t_w + t)$  (qui ne dépendent alors que de  $t$ ) sont reliées par

$$2\chi(t) = \frac{X}{T_{eq}} B(t), \quad (\text{C.7})$$

où  $X$  est le rapport Fluctuation-Dissipation, égal à 1 à l'équilibre. Toute déviation de cette loi correspond à une violation du théorème Fluctuation-Dissipation. Dans de nombreux systèmes en dynamique vitreuse, et en particulier pour le modèle KA [16], les violations consistent en l'apparition de deux régimes : un régime de quasi-équilibre avec  $X = 1$  pour  $t \ll t_w$ , et un régime de vieillissement avec  $X \leq 1$  à  $t$  grand devant  $t_w$ . Cette deuxième pente est souvent associée à une température dynamique, avec  $T_{dyn} \geq T_{eq}$  et  $X = X_{dyn} = T_{eq}/T_{dyn}$  [37].

### C.2.5 Comparaison des mesures

A ce stade, on peut comparer les résultats obtenus en utilisant la mesure d'équilibre, la mesure d'Edwards et la dynamique lente hors d'équilibre. La figure C.2 montre la déviation des facteurs de structure par rapport à l'absence de corrélations ( $\rho^2$ ). En particulier, les valeurs de

$\langle(g_{dyn}(r) - \rho^2)\rangle$  obtenues lors de la dynamique de compaction irréversible montrent l'apparition de corrélations absentes à l'équilibre, qui sont correctement reproduites par la même observable mesurée en échantillonnant la mesure d'Edwards à la densité rejointe dynamiquement.

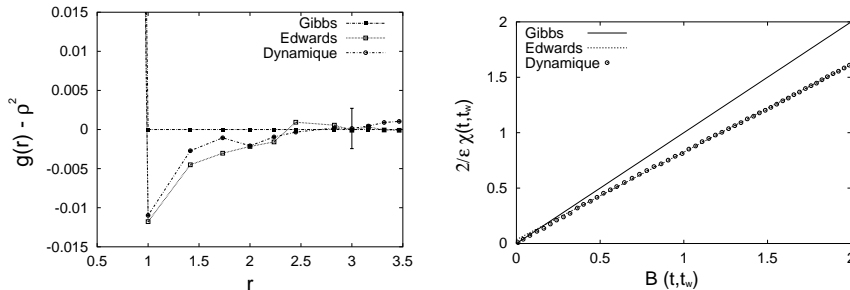


FIG. C.2 – **Figure de gauche** : Facteur de structure du modèle KA, obtenue dans une compaction lente, ainsi que dans la mesure d'Edwards à la densité rejointe dynamiquement ( $\rho \approx 0.848$ ). **Figure de droite** : relation d'Einstein dans le modèle KA. La mobilité  $\chi(t, t_w)$  et le déplacement quadratique moyen  $B(t, t_w)$  sont reliés linéairement (symboles). La pente de la ligne pleine correspond à l'équilibre, tandis que la pente de la ligne pointillée confondue avec les symboles est donnée par la température d'Edwards à la densité atteinte à  $t_w$ ,  $\rho(t_w) = 0.848$ .

D'autre part, à temps longs dans la dynamique de compaction, la mobilité  $\chi(t, t_w)$  et le déplacement quadratique moyen  $B(t, t_w)$  sont reliés linéairement, ce qui permet de définir une température dynamique  $T_{dyn}$  [16]. La figure C.2 montre que cette température dynamique est en fait égale à la température d'Edwards  $T_{edw}$  obtenue à partir de l'entropie des configurations bloquées à la densité rejointe dynamiquement.

### C.2.6 Conclusions de l'étude

En somme, durant la dynamique de compaction irréversible, les contraintes cinétiques conduisent le système hors d'équilibre à haute densité ; la mesure d'équilibre n'est alors plus pertinente, tandis que la mesure d'Edwards, obtenue par un échantillonnage uniforme des configurations bloquées à la densité atteinte par le système, semble à même de reproduire certaines observables comme les fonctions de corrélation spatiales ou la relation d'Einstein.

En addition aux travaux résumés ici, plusieurs approches ont permis d'approfondir et de clarifier partiellement le problème de la validité de la construction due à S.F. Edwards. De tels travaux ont considéré des modèles de particules ou de spins en dimension 1 [8, 9, 26], le modèle dit du « parking » [28], des simulations de dynamique moléculaire en dimension 3 [42], des verres de spin dilués et des sphères dures sur réseau [24], etc... Bien qu'il ait en fait été démontré dans un cas particulier que la construction d'une mesure uniforme sur les configurations bloquées n'est pas rigoureusement exacte [25], c'est-à-dire ne reproduit pas exactement les observables obtenues dynamiquement, les conclusions de tous ces travaux tendent à la validité au moins approximative d'une telle approche. De plus, des généralisations ont été proposées, en contraignant non seulement la densité mais éventuellement d'autres observables à leur valeur mesurée par la dynamique. Ces généralisations permettent d'obtenir de meilleures prédictions pour les observables qui ne sont pas contraintes « à la main » [27, 23]. Il se pose alors la question du nombre d'observables à imposer pour pouvoir prédire les autres de façon fiable.

Bien que de tels aspects théoriques restent pour l’instant ouverts, le problème le plus crucial concerne maintenant l’éventualité de vérifications expérimentales. En particulier, la mesure de la diffusion et de la mobilité de particules marquées dans un milieu granulaire dense sous faible agitation pourrait confirmer ou infirmer l’existence de températures dynamiques. De telles expériences sont actuellement envisagées par plusieurs groupes, et des premiers résultats sur la diffusion ont été publiés dans [29, 30], tandis que des mesures de relation fluctuation-dissipation dans un granulaire dense sous vibration assez fortes ont déjà montré la possibilité de mesurer des températures dynamiques dans des milieux granulaires « liquides » [43]. La section suivante donne un aperçu de ces expériences.

### C.3 Indications expérimentales dans le cas d’un « liquide » granulaire

#### C.3.1 L’expérience

L’idée de l’expérience consiste à reproduire à une échelle bien différente l’expérience du mouvement brownien. Le milieu granulaire, constitué de billes de verre millimétriques contenue dans une boîte cylindrique, est agité par des vibrations de manière à le rendre assez fluide. Le rôle de la particule brownienne est joué par un pendule de torsion plongé dans le granulaire, et dont les mouvements sont mesurés très précisément (voir figure C.3). L’intensité des vibrations est mesurée par un accéléromètre et quantifiée par un paramètre noté  $\Gamma$ . D’autre part, un couple de torsion peut être appliqué au pendule, afin de mesurer une susceptibilité.

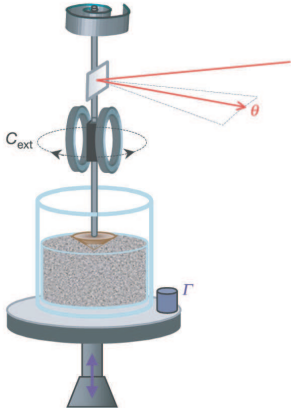


FIG. C.3 – Schéma de l’expérience. Le milieu granulaire est constitué de billes de verre de diamètre  $1.1 \pm 0.05$  mm dans un cylindre de hauteur 60 mm et diamètre 94 mm.

#### C.3.2 La relation FD pour un oscillateur brownien

Considérons un pendule de torsion de moment d’inertie  $I$  et de constante élastique  $G$ , à l’équilibre en contact avec un bain thermique, dont la position angulaire  $\theta$  obéit à l’équation de Langevin

$$I\ddot{\theta}(t) + \alpha\dot{\theta}(t) + G\theta(t) = \xi(t) + C_{ext}(t) \tag{C.8}$$

où  $\alpha$  est un coefficient de frottement,  $\xi(t)$  décrit le bruit thermique (bruit blanc Gaussien de moyenne nulle et de variance  $q$ ) et  $C_{ext}$  est un éventuel forçage externe.

On peut résoudre l'équation précédente en passant en transformée de Fourier, et obtenir aussi bien le spectre de puissance  $S$  en l'absence de forçage (défini comme le double de la transformée de Fourier de la fonction de corrélation  $\langle \theta(t)\theta(t') \rangle$ ) que la susceptibilité  $\chi$ . On obtient

$$S(\omega) = \frac{2q}{I^2(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \alpha^2\omega^2}, \quad (\text{C.9})$$

où  $\omega_0 = \sqrt{G/I}$  est la fréquence propre de l'oscillateur, et

$$\chi(\omega) = \frac{\theta(\omega)}{C_{ext}(\omega)} = \frac{1}{I(\omega_0^2 - \omega^2) + i\alpha\omega}. \quad (\text{C.10})$$

Dans un système à l'équilibre, la variance du bruit thermique est reliée à la température par  $q = 2\alpha k_B T$ , ce qui permet d'écrire la relation FD comme :

$$\frac{S(\omega)\omega}{\chi''(\omega)} = 4k_B T. \quad (\text{C.11})$$

La description de l'équation de Langevin, pas plus que la relation FD, n'ont a priori de raison d'être valables dans un milieu granulaire soumis à des vibrations.

### C.3.3 Résultats

Les mesures expérimentales de  $\theta(t)$  permettent d'accéder aussi bien au spectre de puissance qu'à la susceptibilité pour différentes valeurs de l'agitation  $\Gamma$ . On obtient d'une part que les courbes de  $S(\omega)$  et celles de  $|\chi(\omega)|$  peuvent être fittées par les formes fonctionnelles correspondant au formalisme de l'équation de Langevin. L'agitation mécanique est donc transformée par le granulaire en un bruit blanc effectif qui agit sur l'oscillateur, au moins dans la gamme de fréquences étudiée. D'autre part, les rapports FD  $S(\omega)\omega/(4\chi''(\omega))$ , montré en figure C.4a, bien que non rigoureusement indépendants de  $\omega$ , sont à peu près « plats », surtout si on les compare aux résultats obtenus dans d'autres systèmes hors d'équilibre comme le glycérol [48] ou la laponite [49].

Ces rapports permettent donc de définir une température effective  $T_{eff}$ . La figure C.4b montre que cette température effective croît avec l'agitation imposée  $\Gamma$ , comme on pourrait s'y attendre intuitivement.

L'ordre de grandeur de la température effective ainsi mesurée correspond à celui de températures granulaires typiques définies comme l'énergie cinétique moyenne par particule. Il se pourrait donc que la température effective mesurée à partir des rapports FD dans un granulaire « liquide » soit en fait reliée à la température granulaire habituellement définie dans les gaz granulaires ; cette constatation est particulièrement intéressante eu égard à des résultats numériques récents qui relient en effet, dans les gaz granulaires, température granulaire et rapport de type FD [50, 51, 52].

Quelques précautions sont de rigueur à ce stade. Tout d'abord, ces expériences ont un caractère préliminaire. Des investigations plus poussées semblent indiquer une dépendance du rapport FD en fonction de certains paramètres de l'expérience, en particulier la nature de l'interaction entre le pendule de torsion et le milieu granulaire semble jouer un rôle important. D'autres complications sont liées à l'hétérogénéité du milieu et à l'anisotropie. Des études

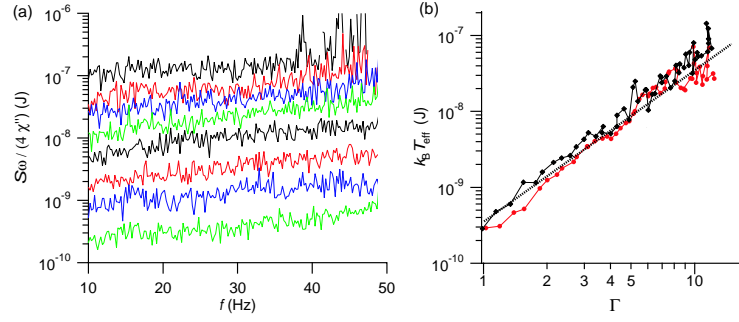


FIG. C.4 – (a) Rapports Fluctuation-Dissipation  $S(\omega)\omega/(4\chi''(\omega))$  pour différentes intensités de la vibration imposée. (b) Température effective en fonction de  $\Gamma$ . La ligne pointillée est un fit de la forme  $k_B T_{eff} = 3.5 \times 10^{-10} \Gamma^2$ .

systematiques sont en cours. D'autre part, le lien entre la température dynamique mesurée ici et la température d'Edwards n'est pas complètement clair. De premières indications indiquent que des tendances observées numériquement pour la température d'Edwards [42] existent en effet dans l'expérience. On peut espérer que de nouvelles expériences comme celles de [30, 29] aideront à éclaircir ce point.

## Références bibliographiques

- [1] H.M. Jaeger, S.R. Nagel, *Science* **255**, 1523 (1992) ; *Granular Matter : An Interdisciplinary Approach*, A. Mehta, Ed. (Springer-Verlag, New York, 1994) ; H.M. Jaeger, S.R. Nagel, et R.P. Behringer, *Rev. Mod. Phys* **68**, 1259 (1996) ; Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on *Physics of Dry Granular Media*, Eds. H. J. Herrmann *et al*, Kluwer Academic Publishers, Netherlands (1998) ; "Unifying Concepts in Granular Media and Glasses", (Elsevier Amsterdam, 2004), eds. A. Coniglio, A. Fierro, H.J. Herrmann et M. Nicodemi.
- [2] Knight, J. B., Fandrich, C. G., Lau, C. N., Jaeger, H. M. et Nagel, S. R. *Phys. Rev. E* **51**, 3957 (1995) ; Nowak, E. R., Knight, J. B., Povinelli, M., Jaeger, H. M. et Nagel, S. R., *Powder Technol.* **94**, 79-83 (1997) ; Nowak, E. R., Knight, J. B., Ben-Naim, E., Jaeger, H. M. et Nagel, S. R., *Phys. Rev. E* **57**, 1971-1982 (1998) ; Jaeger, H. M. in *Physics of Dry Granular Media* (eds. Herrmann, H. J., Hovi, J.-P. et Luding, S.) 553-583 (Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1998).
- [3] P. Philippe et D. Bideau, *Europhys* **60**, 677 (2002) ; *Phys. Rev. Lett.* **91**, 104302 (2003).
- [4] C. Josserand, A. Tkachenko, D.M. Mueth et H.M. Jaeger, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3632 (2000).
- [5] S. Luding, M. Nicolas et O. Pouliquen, in *Compaction of Soils, Granulates and Powders*, D. Kolymbas et W. Fellin eds., A. A. Balkema, Rotterdam (2000) 241 ; M. Nicolas, P. Duru et O. Pouliquen, *Eur. Phys. J. E* **3**, 309 (2000).
- [6] A. Mehta, *Physica A* **186**, 121 (1992) ; G.C. Barker et A. Mehta, *Phys. Rev. E* **47**, 184 (1993).
- [7] P.L. Krapivsky et E. Ben-Naim, *J. Chem. Phys.* **100**, 6678 (1994) ; X. Jin, G. Tarjus et J. Talbot, *J. Phys. A* **27**, L195 (1994) ; J. Talbot, G. Tarjus et P. Viot, *Phys. Rev. E* **61**, 5429 (2000).
- [8] J.J. Brey, A. Prados et B. Sanchez-Rey, *Physica A* **275** (2000) ; A. Prados, J. Javier Brey, *Physical Review E* **66**, 041308 (2002) ; *Europhysics Letters* **64**, 29 (2003).
- [9] D. S. Dean, A. Lefèvre, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5639 (2001) ; *Phys. Rev. Lett.* **90**, 198301 (2003). A. Lefèvre, D. S. Dean *J. Phys A* **34** L213 (2001) ; *Phys. Rev. B* **65**, 220403 (2002).
- [10] A. Lefèvre, *Etats métastables dans les systèmes désordonnés : des verres de spins aux milieux granulaires*, Thèse de doctorat, Laboratoire de Physique Théorique, université P. Sabatier, Toulouse (2003) ; disponible à l'adresse [http://tel.ccsd.cnrs.fr/documents/archives0/00/00/33/21/indexi\\_fr.html](http://tel.ccsd.cnrs.fr/documents/archives0/00/00/33/21/indexi_fr.html) .
- [11] J. Berg, A. Mehta, *Europhys. Lett.* **56**, 784 (2001)
- [12] M. Nicodemi, A. Coniglio et H.J. Herrmann, *Phys. Rev. E* **55**, 3962 (1997).
- [13] W. Kob et H.C. Andersen, *Phys. Rev. E* **48**, 4364 (1993).
- [14] C. Toninelli, G. Biroli, D. S.Fisher. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 185504 (2004), et cond-mat/0410647.
- [15] J. Kurchan, L. Peliti, M. Sellitto, *Europhys. Lett.* **39**, 365 (1997).
- [16] M. Sellitto, *Euro. J. Phys. B* **4**, 135 (1998).
- [17] M. Sellitto et J.J. Arenzon, *Phys. Rev. E* **62**, 7793 (2000).
- [18] E. Caglioti, V. Loreto, H.J. Herrmann et M. Nicodemi, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1575 (1997).

- [19] E. Caglioti, S. Krishnamurthy et V. Loreto, *Random Tetris Model* (1999).
- [20] A. Barrat et V. Loreto, *J. Phys. A* **33**, 4401 (2000), et *Europhys. Lett.* **53** (2001) 297.
- [21] S.F. Edwards, in *Current Trends in the Physics of Materials*, (Italian Physical Society et North Holland, Amsterdam, 1990) ; S.F. Edwards, in : *Granular Matter : An Interdisciplinary Approach*, A. Mehta, Ed. (Springer-Verlag, New York, 1994).
- [22] A. Barrat, J. Kurchan, V. Loreto, M. Sellitto, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 5034, et *Phys. Rev. E* **63** (2001) 051301.
- [23] V. Colizza, A. Barrat et V. Loreto, *Phys. Rev. E* **65** (2001) 050301 ; A. Barrat, V. Colizza et V. Loreto, *Phys. Rev. E* **66** (2002) 011310.
- [24] A. Fierro, M. Nicodemi, A. Coniglio, *Europhys. Lett.* **59**, 642 (2002) et *Phys. Rev. E* **66** 061301 (2002).
- [25] G. De Smedt, C. Godrèche et J.M. Luck *Eur. Phys. J. B* **27**, 363 (2002).
- [26] J. Berg, S. Franz, et M. Sellitto *Eur. Phys. J. B* **26**, 349 (2002).
- [27] A. Lefèvre, *J. Phys. A* **35**, 9037 (2002).
- [28] G. Tarjus, P. Viot, *Phys. Rev. E* **69**, 011307 (2004).
- [29] G. Caballero, A. Lindner, G. Ovarlez, G. Reydellet, J. Lanuza, E. Clément, Contribution au volume "Unifying Concepts in Granular Media and Glasses", ed.s A. Coniglio, A. Fierro, H.J. Herrmann et M. Nicodemi ; cond-mat/0403603.
- [30] G. Marty, O. Dauchot, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 015701 (2005).
- [31] Voir par exemple E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.-P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, in *Spin Glasses and Random Field* ed. A. P. Young, (World Scientific, 1997).
- [32] M. Nicodemi, A. Coniglio, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 916 (1999).
- [33] M.C. Wang, G.E. Uhlenbeck, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 323-342 (1945) ; R. Kubo, M. Toda et H. Hashitsume, *Statistical Physics II : Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer, Berlin, 1991).
- [34] A. Crisanti, F. Ritort, *J. Phys. A* **36**, R181 (2003).
- [35] T.R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, *Phys. Rev. B* **36**, 5388 (1987) ; T.R. Kirkpatrick, P.G. Wolynes, *Phys. Rev. A* **35**, 3072 (1987).
- [36] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 173 (1993), *J. Phys. A* **27**, 5749 (1994).
- [37] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, L. Peliti, *Phys. Rev. E* **55**, 3898 (1997).
- [38] J.-P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan et M. Mézard, in *Spin-glasses and random fields*, A. P. Young, Ed. (World Scientific, Singapore, 1997).
- [39] L. Berthier, J.L. Barrat, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 095702 (2002)).
- [40] L. Cugliandolo, *Dynamics of glassy systems*, Lecture notes, Les Houches, July 2002, cond-mat/0210312.
- [41] A.J. Liu, S.R. Nagel, *Nature* **396**, 21 (1998).
- [42] H. Makse, J. Kurchan, *Nature* **415**, 614 (2002).
- [43] G. D'Anna, P. Mayor, A. Barrat, V. Loreto et F. Nori, *Nature* **424**, 909-912 (2003).
- [44] A. Mehta, R.J. Needs, S. Dattagupta, *J. Stat. Phys.* **68**, 1131 (1992).
- [45] R. Monasson, O. Pouliquen, *Physica A* **236**, 395 (1997).

- [46] R. Monasson, Phys. Rev. Lett. **75**, 2847 (1995); J. Kurchan, in *Jamming and Rheology : Constrained Dynamics on Microscopic and Macroscopic Scales* (1997), <http://www.itp.ucsb.edu/online/jamming2/>, Edwards, S.F., Liu, A. and Nagel, S.R. Eds., et cond-mat/9812347; Th.M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. E **61**, 267 (2000); S. Franz, M.A. Virasoro, J. Phys. A **33**, 891 (2000); A. Crisanti, F. Ritort, Europhys. Lett. **52**, 640 (2000); G. Biroli, J. Kurchan, Phys. Rev. E **64**, 016101 (2001).
- [47] J. Kurchan, J. Phys. Condensed Matter **12**, 6611 (2000).
- [48] T. S. Grigera, N. F. Israeloff, Phys. Rev. Lett. **83**, 5038-5041 (1999).
- [49] L. Bellon, S. Ciliberto et C. Laroche, Europhys. Lett. **53**, 511-517 (2001).
- [50] A. Puglisi, A. Baldassarri and V. Loreto *Phys. Rev. E* **66**, 061305 (2002).
- [51] A. Barrat, V. Loreto and A. Puglisi, *Physica A* **334**, 513 (2004).
- [52] V. Garzó, *Physica A* **343**, 105 (2004).



Deuxième partie

**Gaz granulaires**



# Chapitre A

## Introduction

### A.1 Expériences

L'expérience typique permettant de créer un gaz granulaire peut être facilement réalisée. Il suffit de mettre des billes de verre, d'acier, du sable... dans un récipient fermé, et de le secouer vigoureusement. L'énergie ainsi fournie permet aux billes de se comporter essentiellement comme les molécules d'un gaz, et de suivre des trajectoires balistiques entre collisions (pour des revues récentes, voir [1]). Toutefois, ces collisions font perdre de l'énergie au système, qui se retrouve donc rapidement au repos si l'agitation cesse. La partie délicate de l'expérience réside dans la mesure de différentes quantités (densité locale, vitesses des billes...), qui exige l'utilisation de moyens de détection sophistiqués : caméras ultrarapides, imagerie par résonance magnétique, localisation de particule par émission de positrons, etc...

Les dispositifs expérimentaux les plus fréquemment adoptés mettent en jeu soit des récipients cylindriques [2], ce qui peut poser des problèmes de visualisation, soit des cages de faible épaisseur avec parois transparentes, qui rendent le système étudié quasi bidimensionnel [3]. D'autres configurations comme des billes roulant sur des plans inclinés ont également été utilisées [4]. Afin d'obtenir des résultats fiables et reproductibles, des billes sphériques typiquement millimétriques, et monodisperses (c'est-à-dire quasiment de même taille) sont utilisées. Il s'agit donc de « granulaires » très particuliers. D'autre part, nous nous intéresserons aux milieux granulaires fluidisés par une excitation violente (e.g. un piston vibrant à la base de l'échantillon). L'énergie injectée en surface (et dissipée en volume) est alors suffisamment importante pour que l'on puisse négliger la force de gravité (cela suppose de surcroît que le gaz soit confiné verticalement).

### A.2 Modélisation et approches théoriques

#### A.2.1 Sphères dures inélastiques

Dans la modélisation des gaz granulaires, deux aspects fondamentaux sont généralement retenus : l'aspect « volume exclu » (cœur dur) d'une part, et d'autre part, le caractère dissipatif des collisions. Nous obtenons ainsi le modèle des sphères dures inélastiques, qui s'est imposé comme un paradigme. Dans cette approche, des grains sphériques n'interagissant pas à distance

subissent des collisions instantanées<sup>1</sup> (les événements impliquant plus de deux corps pouvant donc être négligés), qui modifient les vitesses  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  des partenaires supposés ici de même masse et de même diamètre  $\sigma$  suivant

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_1 - \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \mathbf{v}'_2 &= \mathbf{v}_2 + \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

où  $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ ,  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  est le vecteur unitaire centre à centre (orienté indifféremment 1-2 ou 2-1), et  $\alpha$  le coefficient de restitution ( $0 \leq \alpha \leq 1$ , et  $\alpha = 1$  pour une collision élastique). La quantité de mouvement totale est ainsi conservée tandis que la composante normale de la vitesse relative se voit réduite par rapport au cas élastique<sup>2</sup> :

$$\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \alpha [\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}]_{\text{élastique}} = -\alpha \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (\text{A.2})$$

ce qui implique une dissipation d'énergie.

Par souci de simplicité,  $\alpha$  est en général pris constant pour un type de billes donné, c'est-à-dire indépendant de la vitesse relative ou de l'angle d'impact. Peu d'études expérimentales de ce coefficient ont été réalisées même si l'on sait qu'il dépend des paramètres de la collision [6, 7]. Pour autant, le modèle simplifié à coefficient constant est largement utilisé, car il permet de reproduire la riche phénoménologie observée expérimentalement tout en autorisant certaines études analytiques.

L'étude de ce modèle utilise des méthodes allant de la théorie cinétique (description microscopique), à l'hydrodynamique (au sens d'une description de type milieu continu, à plus grande échelle, dont le but est de relier les différentes densités locales, de particules, de quantité de mouvement, d'énergie cinétique etc...).

## A.2.2 Traitement du modèle

Dans l'hypothèse d'homogénéité spatiale, l'équation d'évolution de la distribution à une particule  $f_1$  s'écrit

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_1(\mathbf{v}; t)}{\partial t} &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) f_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2; t) \\ &\quad [\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_1) + \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}'_2) - \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1) - \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_2)]\end{aligned}\quad (\text{A.3})$$

où  $d$  est la dimension de l'espace et  $\sigma$  le diamètre des particules, et où  $\mathbf{v}'_1$  et  $\mathbf{v}'_2$  sont reliées à  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  par la loi de collision (A.1). Cette écriture n'est pas la plus compacte, mais souligne la structure gain/perte de l'intégrale de collision (gain lorsque une paire 1-2 conduit à  $\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}$  ou  $\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}$  après collision, et perte lorsqu'un grain de vitesse  $\mathbf{v}$  est impliqué dans une collision avec un partenaire quelconque, i.e.  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}$  ou  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}$ ).

L'équation (A.3) n'est pas fermée ; elle fait intervenir la distribution à deux corps au contact  $f_2$ . L'approche la plus commune consiste alors à supposer que les vitesses juste avant collision ne sont pas corrélées, et à écrire donc pour les particules *au contact* :

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2; t) = f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; t) f_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2; t). \quad (\text{A.4})$$

<sup>1</sup>ceci correspond à négliger la (faible) déformation des grains lors du contact hertzien, qui entraîne des collisions de durée finie [5]

<sup>2</sup>dans cette modélisation, la composante tangentielle (perpendiculaire à  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ ) n'est pas affectée par la collision, comme dans le cas élastique ; si l'on cherche une description plus réaliste, on peut également prendre en compte la friction coulombienne, introduire un coefficient de restitution tangentiel, etc.

Cette propriété de chaos moléculaire, l'une des seules fermetures opérationnelles de l'équation de Boltzmann (A.3), constitue le point de départ d'un nombre conséquent de travaux ; ses limitations ont donc été étudiées en détail [8, 9, 10].

L'évolution décrite par l'équation A.3 correspond au déclin libre : les particules subissent des collisions inélastiques et ne reçoivent pas d'énergie. La « température granulaire », ou énergie cinétique moyenne <sup>3</sup>  $T = m\langle \mathbf{v}^2 \rangle / d$ , tend donc vers 0.

Les gaz granulaires étudiés expérimentalement sont par contre soumis à un forçage qui injecte de l'énergie et leur permet de rejoindre un état stationnaire de température constante. Afin de représenter cette injection d'énergie, un des modèles les plus simples de forçage est le « thermostat stochastique » défini comme suit : une force aléatoire (bruit blanc) agit sur chaque particule, et compense la perte d'énergie due aux collisions inélastiques. L'équation du mouvement d'une particule s'écrit alors

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m} + \boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (\text{A.5})$$

où la force aléatoire de chauffage  $\boldsymbol{\xi}$  est de moyenne nulle et de corrélation

$$\overline{\boldsymbol{\xi}_i(t)\boldsymbol{\xi}_j(t')} = \xi_0^2 \delta_{ij} \delta(t - t') \mathbf{I}. \quad (\text{A.6})$$

La valeur moyenne  $\overline{(\dots)}$  porte sur les différentes réalisations du bruit, et  $\mathbf{I}$  est la matrice identité (de dimension  $d \times d$ ). Un terme de diffusion dans l'espace des vitesses traduit alors le forçage dans le terme de droite de l'équation (A.3) :  $\xi_0^2 (\partial/\partial \mathbf{v})^2 f_1(\mathbf{v}; t)$ .

Bien que l'équation de Boltzmann ne soit pas soluble analytiquement, un certain nombre de prédictions analytiques peuvent en général être faites, en particulier sur le comportement de  $f_1$  pour les grandes vitesses, ou pour un développement de  $f_1$  autour de la gaussienne. De plus, la technique dite « DSMC » (pour « *Direct Simulation Monte Carlo* ») autorise une résolution numérique très précise, qui permet de tester les prédictions analytiques. Cette technique, introduite par Graeme Bird en 1963 [11], s'est rapidement imposée comme outil numérique dominant en théorie cinétique. Elle consiste à interpréter l'équation de Boltzmann comme un processus stochastique. L'idée est de construire une chaîne de Markov pour un ensemble de  $N_0$  particules (avec  $N_0$  le plus grand possible, typiquement de  $10^4$  à  $10^8$ ), dont l'équation maîtresse soit précisément l'équation de Boltzmann que l'on cherche à résoudre. On obtient ainsi la solution exacte de (A.3-A.4).

D'autre part, des simulations de *dynamique moléculaire*, malgré de possibles effets de taille finie, permettent d'obtenir les propriétés du modèle étudié sans faire d'hypothèses d'homogénéité ou d'absence de corrélations *a priori* : les équations du mouvement sont intégrées dans une boîte (en dimension 2 ou 3) avec en général des conditions aux limites périodiques. On peut ainsi par exemple tester le bien fondé d'une description à la Boltzmann : les deux techniques sont ainsi complémentaires.

Dans le cadre des simulations de dynamique moléculaire, il est également possible d'utiliser des types de forçage plus réalistes, comme l'injection d'énergie par des parois vibrantes, de façon plus similaire aux conditions expérimentales.

Dans les chapitres suivants, nous verrons comment nous avons utilisé ces deux méthodes de manière complémentaire pour étudier les problèmes posés sous différentes approches. Nous

---

<sup>3</sup> $T$  est défini de manière purement cinétique pour les gaz granulaires ; l'appellation « température » vient de l'analogie avec les gaz moléculaires et ne présuppose aucun sens thermodynamique à  $T$ . On utilise souvent par abus de langage le terme « température » au lieu de « température granulaire ».

nous intéresserons ainsi d'abord aux distributions de vitesses de gaz granulaires, puis au problème de la non-équiartition de l'énergie dans les mélanges. Enfin, nous décrirons le phénomène du « Démon de Maxwell », qui peut librement exister dans les gaz granulaires sans violer les lois de la thermodynamique, puisque ces gaz sont par définition hors d'équilibre.

# Chapitre B

## Distributions de vitesse

### B.1 Problématique

Une importante caractéristique des gaz moléculaires réside dans la distribution  $f_1(\mathbf{v})$  des vitesses des molécules : le caractère conservatif des collisions impose qu'il s'agisse d'une maxwellienne (loi gaussienne). On peut légitimement anticiper que cette propriété soit mise en défaut pour un gaz granulaire. Les premières mesures de cette distribution, peu précises, n'ont toutefois pas montré de déviation particulière à la gaussienne [12], et ce n'est que récemment que le perfectionnement des techniques expérimentales a permis de mettre en évidence des différences (plus fortes aux vitesses élevées, correspondant à de faibles probabilités d'observation). En particulier, plusieurs études expérimentales ont établi que  $f_1(\mathbf{v})$  était surpeuplée par rapport à la maxwellienne à la fois pour les faibles et les fortes vitesses (d'où une sous-population aux vitesses intermédiaires, pour assurer la normalisation). La question naturelle qui se pose est alors la suivante : la distribution de vitesse est-elle universelle, de même que la gaussienne est universelle pour les gaz à l'équilibre ?

Diverses expériences ont été réalisées dans des conditions différentes, donnant des résultats divers : typiquement, des exponentielles étirées sont obtenues ( $f_1(\mathbf{v}) \approx \exp(-Av^B)$ ), avec diverses valeurs pour l'exposant  $B$ . La diversité des conditions expérimentales (différents effets de bord en particulier) ne permettait pas de conclure sur l'universalité. Dans cette situation, une étude réalisée à l'Université du Massachusetts a suscité un certain écho [3]. D'une part, elle semblait indiquer une distribution de vitesse indépendante des détails de l'expérience, comme l'intensité du forçage, ou la densité de grains. D'autre part, la forme trouvée, proche d'une loi en  $\exp(-v^{3/2})$ , semblait en accord avec les prédictions de la théorie cinétique [13], obtenues dans le cadre très simplifié du thermostat stochastique présenté dans le chapitre précédent, c'est-à-dire pour un système homogène avec forçage effectif en volume via un bruit blanc : cet accord apparent était surprenant car, dans la réalité, le forçage a lieu en surface, et la densité ou la température varient avec le point considéré. En fait, l'accord théorie/expérience ne résiste pas à une analyse plus poussée. Dans le cadre de la théorie cinétique, le régime en  $\exp(-Av^{3/2})$  prédit n'est atteint que pour des vitesses de très loin supérieures à celles qui sont accessibles expérimentalement [i.e. vitesses telles que  $f_1(v) < 10^{-6}f_1(0)$ ]. La figure B.1 illustre ce résultat. Il ne s'agit pas là d'un échec de la théorie cinétique, mais de l'insuffisance d'une modélisation trop crue (le problème de trouver un bruit de forçage effectif raisonnable est délicat).

La section suivante aborde le problème de l'universalité sous un angle différent, en intro-

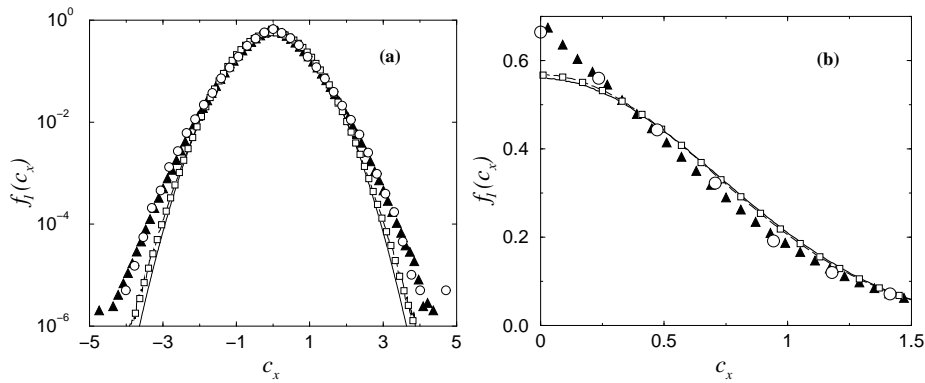


FIG. B.1 – Distribution de vitesse horizontale adimensionnée (toutes les distributions tracées sont de variance  $1/2$ ), en échelle semi-logarithmique (a) et linéaire (b). Les cercles représentent les mesures expérimentales [3] et les carrés montrent la distribution de vitesse obtenue avec le thermostat stochastique, et un coefficient de restitution exagérément faible ( $\alpha = 0.6$ ); si  $\alpha > 0.6$  (une valeur expérimentalement pertinente serait 0.8 ou 0.9),  $f_1(c_x)$  est indiscernable de la gaussienne représentée par le trait continu. La ligne pointillée correspond à un raffinement du modèle des sphères dures inélastiques incluant trois paramètres pour tenir compte des frottements et des degrés de liberté de rotation [6, 14, 15]. Les triangles correspondent à un forçage aléatoire multiplicatif qui, au prix de l'introduction d'un nouveau paramètre, peut être ajusté pour reproduire les données expérimentales [16]. Les résultats numériques ont été obtenus par simulations de Monte Carlo Directes (DSMC) dont le principe a été présenté dans le chapitre A.

duisant le modèle des sphères dures inélastiques à coefficient de restitution aléatoire. Dans ce chapitre, nous considérerons également un cas très particulier, à savoir la dimension 1 : des comportements très intéressants sont alors obtenus et soulignent que la comparaison théorie-expérience doit être faite avec prudence.

## B.2 Un modèle effectif : Dynamique projetée et coefficients de restitution aléatoires

Un certain nombre de tentatives ont été faites pour modifier et adapter le modèle du thermostat stochastique. Il est alors possible de reproduire fidèlement la distribution expérimentale (cf [17, 16], et figure B.1), en payant le coût de l'introduction pas forcément justifiée de paramètres supplémentaires. Notre approche a été en quelque sorte complémentaire à ces modélisations [18, 17]. Elle part de la constatation simple suivante : dans les expériences typiques, les distributions mesurées concernent les vitesses horizontales alors que l'énergie est injectée dans les degrés de liberté verticaux. La mesure est en général effectuée dans une partie du récipient où les gradients de densité et de température sont faibles. L'énergie est redistribuée dans les degrés de liberté horizontaux lors des collisions entre grains (et non entre les collisions par l'opération d'un bruit, comme c'est le cas avec le thermostat stochastique). Pour étudier les degrés de liberté horizontaux, on peut donc se restreindre à une dynamique projetée où les particules subissent des collisions inélastiques, qui peuvent aussi bien injecter de l'énergie qu'en dissiper (figure B.2). De cette projection suivant la direction du forçage résulte le ca-



ractère aléatoire du coefficient de restitution effectif  $\alpha_{\text{eff}}$  des collisions projetées. Si l'expérience initiale est en trois dimensions, le modèle effectif sera en deux dimensions, tandis que pour des expériences quasi-2D comme celle de la référence [3] (grains vibrés de diamètre  $\sigma$  confinés entre deux plaques verticales et parallèles espacées d'une distance légèrement supérieure à  $\sigma$ ), le modèle effectif devient unidimensionnel.

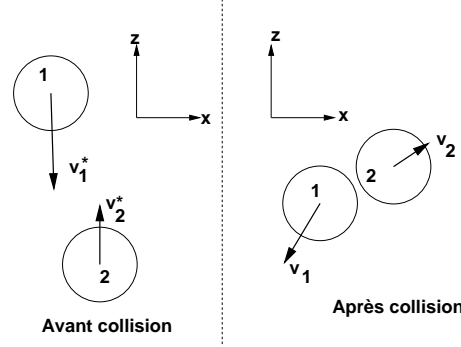


FIG. B.2 – Exemple d'une collision globalement dissipative qui injecte de l'énergie dans les degrés de liberté horizontaux.

Une première approche consiste à traiter le modèle effectif au niveau de l'équation de Boltzmann, en dimension 1 ou 2, avec diverses lois de probabilité du coefficient de restitution effectif  $\mu(\alpha_{\text{eff}})$ , et en négligeant les corrélations entre  $\alpha_{\text{eff}}$  et les vitesses relatives des particules lors de la collision. On peut alors déterminer analytiquement le premier terme d'un développement de  $f_1$  autour de la gaussienne. D'autre part, des simulations DSMC montrent que  $f_1$  dépend sensiblement de la forme de  $\mu(\alpha_{\text{eff}})$  [18]. En dimension 2, on obtient typiquement des exponentielles étirées si  $\mu(\alpha_{\text{eff}})$  est bornée ou décroît suffisamment rapidement à grand  $\alpha_{\text{eff}}$ . La distribution  $\mu_{\text{exp}}$  des coefficients de restitution effectifs a été mesurée expérimentalement par K. Feitosa et N. Menon [19], pour le système correspondant aux résultats publiés dans la référence [3]. Les distributions de vitesse obtenues en injectant  $\mu_{\text{exp}}$  sont alors en loi de puissance; de plus, en dimension 1, des lois de puissance sont présentes même pour des  $\mu(\alpha_{\text{eff}})$  bornées, en contradiction nette avec tous les résultats expérimentaux..

Ces résultats montrent que les corrélations qui ont été négligées sont en réalité cruciales pour une description correcte. En effet, la définition de  $\alpha_{\text{eff}}$  :

$$\alpha_{\text{eff}} = \frac{(v'_{12})_x}{(v_{12})_x}, \quad (\text{B.1})$$

qui est donc le rapport des vitesses relatives horizontales post- et pré-collisionnelles, montre que typiquement les faibles  $(v_{12})_x$  sont associées aux grandes valeurs de  $\alpha_{\text{eff}}$ , et que  $\alpha_{\text{eff}}$  doit présenter une coupure au delà de  $1/(v_{12})_x$  (figure B.3). Pour prendre en compte ces corrélations, on doit introduire la densité  $\mu(\alpha_{\text{eff}}|(v_{12})_x)$ , conditionnée à une vitesse pré-collisionnelle (projetée) donnée.

Nous avons réalisé des simulations numériques de dynamique moléculaire dans lesquelles des disques inélastiques sont confinés entre deux parois vibrantes : il est alors possible de mesurer  $\mu(\alpha_{\text{eff}}|(v_{12})_x)$  (les données expérimentales n'étant pas suffisantes pour en obtenir une forme précise). L'injection de cette loi conditionnelle, tirée du recoupement entre mesures expérimentales et simulations numériques [20], dans le modèle à coefficient de restitution

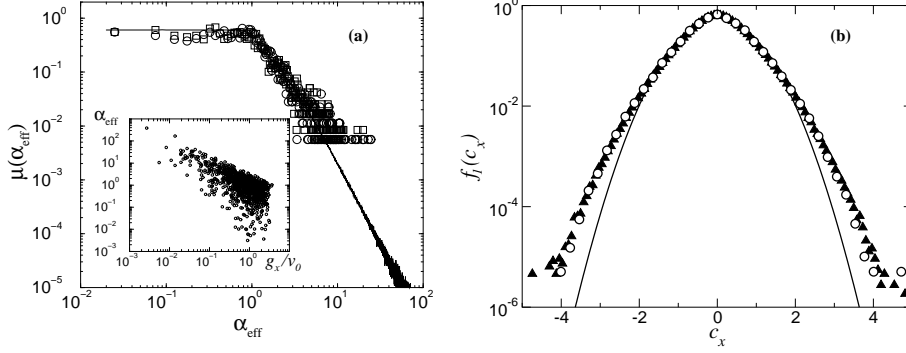


FIG. B.3 – (a) : Histogramme expérimental de  $\alpha_{\text{eff}}$  pour des billes d’acier (cercles) et de verre (carrés). Ligne :  $\mu(\alpha)$  obtenu dans le modèle à coefficient de restitution aléatoire. L’insert montre les mesures expérimentales de  $\alpha_{\text{eff}}$  en fonction des vitesses horizontales relatives  $g_x = (v_{12})_x$  avant collision pour des billes de verre. Les données sont issues de [3] et [19]. (b) : Distribution de vitesse horizontale adimensionnée, en échelle semi-logarithmique. Les cercles représentent les données expérimentales pour des billes d’acier [3] ; les triangles correspondent au modèle proposé, simulé par la méthode DSMC, en incluant les corrélations entre vitesses pré-collisionnelles et  $\alpha_{\text{eff}}$ .

aléatoire, au niveau simplifié de l’équation de Boltzmann homogène, donne alors une distribution de vitesse en excellent accord avec son pendant expérimental (figure B.3). Cela montre l’autocohérence du modèle avec coefficient de restitution aléatoire.

Notons que ce modèle ne permet pas d’obtenir une prédiction analytique pour  $f_1$  : les données expérimentales et/ou numériques pour  $\mu$  sont indispensables pour tester la cohérence de l’approche effective, qui perd de ce fait toute vertu prédictive. Le but n’était d’ailleurs pas ici de remettre en cause une approche de type thermostat stochastique (une équation de Langevin au bruit *ad hoc* fournit une description effective correcte de la dynamique du système [16, 17]) mais plutôt de proposer une alternative –qui peut être compatible– conduisant à l’identification de quantités expérimentalement pertinentes, et complémentaires de la distribution de vitesse. Les distributions  $\mu(\alpha_{\text{eff}})$  et  $\mu(\alpha_{\text{eff}}|v)$  sont des signatures sensibles de la dynamique du système. Par conséquent, leur mesure expérimentale précise pourrait mettre en évidence une influence du type de matériau utilisé, ce qui permettrait de discuter l’universalité de la distribution de vitesse avec des éléments nouveaux.

### B.3 Un cas particulier : la dimension 1

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons au cas particulier du gaz granulaire en dimension 1, aussi bien maintenu dans un état stationnaire par le thermostat stochastique, qu’en déclin libre. L’intérêt réside dans la possibilité d’un traitement analytique et numérique d’une très grande précision.

Le travail analytique a été effectué dans le cadre de l’équation de Boltzmann homogène [i.e. (A.3) avec factorisation de  $f_2$ ] dans le but d’obtenir un comportement de référence pour la distribution de vitesse, comportement auquel comparer les résultats de simulations. Par ailleurs, la richesse mathématique de l’équation cinétique en question est elle-même digne d’intérêt [21, 22].

La limite de grande vitesse de  $f_1$  pour le gaz soumis au thermostat stochastique a été analysée par Van Noije et Ernst [13] : dans l'équation (A.3), le terme de perte dans l'intégrale de collision est compensé par le forçage, ce qui donne

$$\frac{\partial}{\partial v} \left( v^{d-1} \frac{\partial f_1}{\partial v} \right) \sim v^d f_1(v) \quad \text{pour } v \rightarrow \infty, \quad (\text{B.2})$$

d'où on tire  $f_1(v) \propto_{v \rightarrow \infty} a_0 \exp(-Av^{3/2})$  [13]. La distribution de vitesse est surpeuplée par rapport à la maxwellienne. Ce résultat est valable pour toutes les valeurs du coefficient de restitution  $0 \leq \alpha < 1$ , et en n'importe quelle dimension.

D'autre part, dans la limite quasi-élastique ( $\alpha \rightarrow 1^-$ ) et en dimension 1, il a été montré rigoureusement par des mathématiciens [21] que  $\ln f_1$  se comporte comme  $-v^3$  aux grandes vitesses, d'où une sous-population par rapport à la maxwellienne<sup>1</sup>.

Les comportements considérés ci-dessus, de sur- et sous-population, ne sont en fait pas incompatibles : la non commutativité des limites de quasi-élasticité et de grande vitesse réconcilie ces deux prédictions [23] :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1^-} \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{\log f_1(v)}{v^{3/2}} = \text{cste} \quad (\text{B.3})$$

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \lim_{\alpha \rightarrow 1^-} \frac{\log f_1(v)}{v^3} = \text{cste}. \quad (\text{B.4})$$

Les simulations habituelles de DSMC donnent en général une précision de 7 à 9 ordres de grandeur pour  $f_1$ . Afin de résoudre en détail le passage du comportement en  $\exp(-v^3)$  à celui en  $\exp(-v^{3/2})$ , nous avons mis en œuvre une méthode numérique itérative plus précise, décrite dans la référence [23], qui donne une précision de 25 à 35 ordres de grandeur. La figure B.4 montre deux distributions, dans les limites de quasi-élasticité, et de forte inélasticité. On obtient bien que pour tout  $\alpha < 1$ ,  $f_1(v) \propto \exp(-v^{3/2})$  aux vitesses suffisamment grandes. Lorsque  $\alpha$  se rapproche de 1, une gamme de vitesse intermédiaire apparaît, sur laquelle  $f_1(v) \propto \exp(-v^3)$ , et le comportement en  $\exp(-v^{3/2})$  est repoussé au delà d'une certaine coupure  $\mathcal{C}(\alpha)$ . Cette gamme s'étend vers les vitesses de plus en plus élevées lorsque  $\alpha \rightarrow 1^-$  : la coupure  $\mathcal{C}$  tend vers l'infini, ainsi que la zone de  $f_1$  qui se comporte en  $\exp(-v^{3/2})$ . La figure B.4 montre que pour  $\alpha = 0.999$ , le régime en  $\exp(-v^{3/2})$  ne peut exister que pour les densités de probabilité inférieures à  $10^{-30} f_1(0)$ .

Le comportement précédent est propre à la dimension 1. En dimension supérieure, la limite quasi-élastique n'est plus singulière, et l'on retrouve une maxwellienne lorsque  $\alpha \rightarrow 1$ . La singularité de la situation unidimensionnelle est vraisemblablement une conséquence de l'impossibilité de thermaliser le gaz élastique.

Les corrélations spatiales –négligées jusqu'à présent et étudiées dans la référence [23]– ne changent qualitativement pas les conclusions précédentes.

Nous nous sommes également intéressés au régime du déclin libre où la limite quasi-élastique est particulièrement curieuse : comme attendu,  $f_1(v; t) \rightarrow \delta(v)$  aux temps longs (puisque l'énergie cinétique du système tend vers 0), mais ce pic de Dirac est constitué de deux sous-pics centrés en  $\pm \langle v^2 \rangle^{1/2}$ , pics d'autant plus fins que  $\alpha$  est proche de 1 ; en d'autres

---

<sup>1</sup>lorsque  $\alpha \rightarrow 1^-$  sans que  $\xi_0 \rightarrow 0$ , la température  $\langle v^2 \rangle$  diverge ; on considère donc systématiquement la distribution de vitesse adimensionnée  $c = v/\langle v^2 \rangle^{1/2}$  qui est indépendante de  $\xi_0$  et régulière quand  $\alpha \rightarrow 1^-$ . Le comportement pour  $\alpha = 1$  est quant à lui nécessairement différent puisqu'un gaz 1D élastique de particules identiques ne se thermalise pas (la distribution de vitesse initiale n'est pas affectée par les collisions).

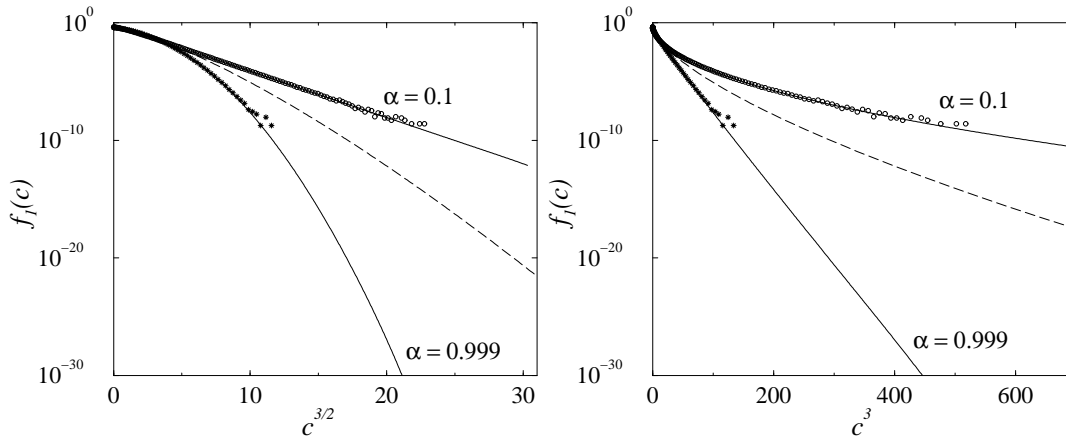


FIG. B.4 – Distribution de vitesse adimensionnée  $c = v/\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ , pour deux valeurs du paramètre de restitution  $\alpha$ . La ligne pointillée représente la loi gaussienne (moyenne nulle, variance 1), et les lignes continues les résultats de la méthode itérative. Pour comparaison, les distributions obtenues par DSMC sont représentées par les symboles  $\circ$  et  $\star$ .

termes, la distribution de vitesse adimensionnée tend vers  $[\delta(c+1) + \delta(c-1)]/2$  lorsque  $\alpha \rightarrow 1^-$  (voir figure B.5, et [23]), ce qui a même été montré de façon rigoureuse par des mathématiciens [24].

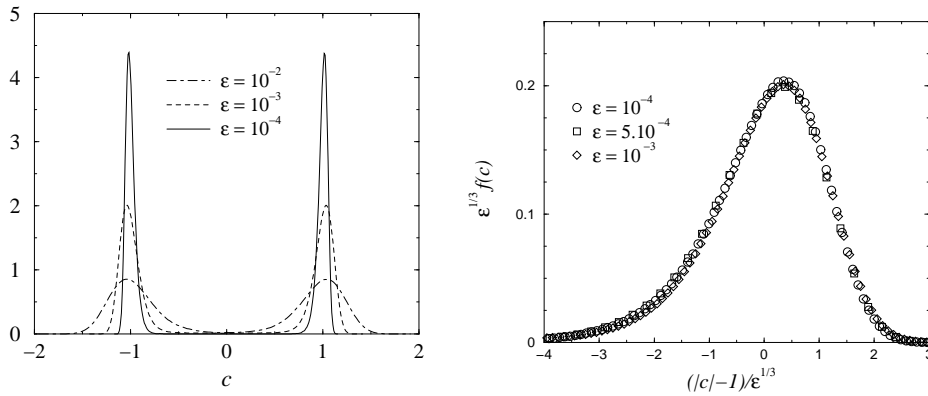


FIG. B.5 – Distributions de vitesse pour le déclin libre en dimension 1, dans la limite quasi-élastique. Figure de gauche : Distributions de vitesse adimensionnée pour  $\alpha = 1 - \epsilon$  avec  $\epsilon = 10^{-2}$ ,  $10^{-3}$  et  $10^{-4}$ , obtenues par simulations DSMC. Figure de droite : collapse des distributions.

D'autre part, nous avons également mis en évidence que l'évolution de la distribution de  $c$  comporte une structure auto-similaire, la largeur des pics décroissant en  $\epsilon^{1/3}$  ( $\epsilon = 1 - \alpha$ ). La figure B.5 montre en effet le collapse de trois distributions sur une courbe maîtresse, dont nous avons élucidé les caractéristiques principales grâce à un développement en puissances de  $\epsilon$  (voir [23]).

## B.4 Conclusion

Le panorama esquissé dans ce chapitre peut laisser insatisfait : aucune universalité ne semble émerger pour les distributions de vitesse. Un certain nombre d'informations peuvent cependant être retenues.

Tout d'abord, les prédictions analytiques à partir de l'équation de Boltzmann concernent en général des limites de « grandes vitesses ». Il s'avère que ces limites sont en pratique souvent inobservables pour des inélasticités réalistes. La comparaison en particulier avec l'expérience doit donc être faite avec précaution, et la résolution numérique par DSMC s'avère un complément essentiel des approches analytiques. Dans ce cadre, la mesure de coefficients de restitution effectifs pour les collisions projetées peut représenter une piste intéressante.

Différents groupes, dont le nôtre, ont effectué des simulations numériques de dynamique moléculaire avec injection d'énergie par des parois vibrantes [25, 26, 20, 27, 28] : les résultats obtenus, compatibles avec les mesures expérimentales, sont néanmoins plus précis que ces dernières. Ils indiquent de manière concordante qu'aux grandes vitesses, les distributions sont génériquement surpeuplées par rapport à la gaussienne. En revanche, les détails fins de la distribution de vitesse dépendent de tous les paramètres (densité, inélasticité, mode d'injection de l'énergie), et même de la position à laquelle on la mesure dans l'échantillon. La valeur 1.5 obtenue dans la référence [3] pour le paramètre de l'exponentielle étirée n'a donc probablement pas de signification particulière, et son apparente robustesse pourrait être due à la difficulté de faire varier les paramètres de l'expérience sur une large gamme de valeurs.

Le fait que les études expérimentales aient donné des résultats contradictoires n'est peut-être alors pas surprenant. Les distributions de vitesse ne sont pas gaussiennes, mais aucun caractère universel ne semble émerger. Différentes conditions expérimentales, différents moyens d'injecter l'énergie conduisent à des distributions de vitesses différentes. Bien sûr, cette conclusion se fonde sur l'étude de modèles numériques simplifiés, si bien que l'on peut encore considérer la question de l'universalité comme ouverte du point de vue expérimental. Un seul trait commun peut être dégagé : la surpopulation des distributions par rapport à la gaussienne, surpopulation observée aux grandes vitesses. Cependant, aucun argument simple ne semble exister pour expliquer ce phénomène.

D'autre part, la manipulation de l'équation de Boltzmann, même si elle s'opère à un niveau encore plus simplifié que les simulations de dynamique moléculaire, nous donne d'autres indications. Nous avons en effet considéré différents types de thermostats ainsi que différentes modifications de l'équation de Boltzmann. Dans ce travail encore en cours (collaboration avec M. Ernst à Utrecht et E. Trizac à Orsay), nous avons montré aussi bien analytiquement que numériquement que les distributions de vitesse obtenues ont un comportement à grandes vitesses génériquement en exponentielles étirées, l'exposant dépendant de la forme précise du thermostat ; si le thermostat injecte trop d'énergie ou pas assez, l'état stationnaire devient instable ; à la limite de stabilité, des lois de puissance apparaissent pour  $f_1$ . D'autre part, toute une zoologie de comportements est obtenue dans la limite quasi-élastique en dimension 1 : en particulier, des pics  $\delta$  apparaissent comme dans la section B.3, avec éventuellement une partie continue de la distribution.



## Chapitre C

# Mélanges : Non-équipartition de l'énergie

Considérons un mélange de deux gaz moléculaires (1) et (2), à l'équilibre. Leurs deux températures sont égales ( $T_1 = T_2$ ) et l'énergie cinétique moyenne d'une molécule du gaz (1) est égale à celle d'une molécule du gaz (2). On peut alors se demander si cette équipartition est encore valable dans un mélange binaire de grains maintenus dans un état de type gazeux par des vibrations fortes, et donc hors d'équilibre.

### C.1 Résultats expérimentaux

Récemment, deux groupes d'expérimentateurs se sont donc intéressés au problème de l'(in)-équipartition d'énergie cinétique dans un mélange binaire de grains, soit quasi-bidimensionnel [29] (étudié par visualisation directe), soit à trois dimensions [30]<sup>1</sup>. Dans les deux cas, les expériences ont clairement montré que les deux composants étaient caractérisés par deux températures granulaires différentes. Il est à noter que cette violation de l'équipartition de l'énergie n'est en fait pas surprenante dans un système hors d'équilibre : les températures en question sont dénuées de fondement thermodynamique et n'ont qu'un statut cinétique.

Les principaux résultats expérimentaux sont les suivants : (i) bien que les températures des deux espèces dépendent de la position dans la boîte (de la distance à la paroi où l'énergie est injectée), leur rapport est constant dans une grande partie de la cellule, voisinage des bords vibrants excepté ; (ii) les particules les plus lourdes sont plus énergétiques ( $\gamma = T_1/T_2 < 1$  où l'indice 1 désigne l'espèce la plus légère), avec des valeurs typiques de ce rapport comprises entre 0.6 et 0.8 [29, 30] ; (iii) le rapport des températures  $\gamma$  semble peu dépendre de la densité totale moyenne, et ne varie que faiblement avec la composition relative du mélange.

Comme il est impossible dans les expériences de faire varier à loisir les différents paramètres du problème<sup>2</sup>, il est naturel d'aborder cette question d'un point de vue théorique, ce qui a été fait par divers groupes [31]. Nous avons considéré deux approches complémentaires : simulations numériques « réalistes » d'une part [20], et théorie cinétique d'autre part [32],

---

<sup>1</sup>la technique de mesure est alors plus compliquée : on suit, par une technique d'émission de positron, une unique particule marquée ; moyennant une hypothèse d'ergodicité, le suivi de cette unique particule permet d'accéder au comportement d'ensemble.

<sup>2</sup>*a priori* le rapport des masses, des tailles, et des densités des deux espèces en présence, ainsi que leurs inélasticités.

avec l'objectif d'obtenir des prédictions aussi explicites que possible pour  $\gamma$ .

## C.2 Généralités

Considérons un mélange composé de billes d'espèces 1 et 2, de masses  $m_1$  et  $m_2$ . La généralisation de la loi de collision (A.1) pour la situation où les partenaires  $i$  et  $j$  n'ont pas même masse s'écrit :

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - \frac{m_j}{m_i + m_j} (1 + \alpha_{ij}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (\text{C.1})$$

Différents coefficients de restitution sont ainsi associés aux collisions 1-1, 1-2 et 2-2, avec toutefois la contrainte  $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$  pour assurer la conservation de la quantité de mouvement totale.

Il est important à ce stade de noter que la mesure expérimentale de ces quantités est entachée d'une certaine imprécision (voir aussi chapitre sur la distribution des vitesses), et concerne en général uniquement les coefficients associés à des collisions entre billes de la même espèce ( $\alpha_{ii}$ ). De plus, la modélisation par coefficient de restitution constant est en fait trop simple : ce paramètre dépend de la vitesse relative, les collisions devenant quasi-élastiques aux faibles vitesses d'impact. Ces restrictions impliquent que nous nous intéresserons essentiellement à des tendances, et non au détail fin des valeurs numériques.

## C.3 Théorie cinétique

Nous nous sommes tout d'abord placés au niveau d'un système homogène décrit par la théorie cinétique d'Enskog-Boltzmann. Les distributions de vitesse dans l'état homogène ( $f_1(\mathbf{v}, t)$ ,  $f_2(\mathbf{v}, t)$ ) obéissent alors aux équations suivantes :

$$\partial_t f_i(\mathbf{v}_1, t) = \sum_j J_{ij}[\mathbf{v}_1 | f_i, f_j] + \mathcal{F} f_i \quad (\text{C.2})$$

où les  $J_{ij}$  décrivent l'effet des interactions dissipatives entre particules et  $\mathcal{F} f_i$  représente un forçage externe qui permet au système de rejoindre un état stationnaire. En dimension  $d$ , on peut écrire les noyaux de collisions  $J_{ij}$  pour les collisions entre une particule de type  $i$  et une particule de type  $j$  comme

$$J_{ij}[\mathbf{v}_1 | f_i, f_j] = \chi_{ij} \sigma_{ij}^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \left( \frac{1}{\alpha_{ij}^2} f_i(\mathbf{v}'_1) f_j(\mathbf{v}'_2) - f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) \right). \quad (\text{C.3})$$

où les  $\chi_{ij}$  sont les fonctions de distribution de paire au contact, *a priori* inconnues, bien que des approximations fiables existent dans le cas élastique. Comme les systèmes que nous étudions sont dilués, il est suffisant de les remplacer par leur limite de basse densité ( $\chi_{ij} = 1$ ).  $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$  est la moyenne des diamètres des particules, et  $\int'$  représente  $\int \Theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12})$ .

On obtient finalement, dans l'état stationnaire, la série d'équations suivante pour les températures granulaires partielles définies par  $\frac{n_i d}{2} T_i(t) = \int d\mathbf{v} \frac{m_i v^2}{2} f_i(\mathbf{v}, t)$  ( $n_i$  est le nombre relatif de particules d'espèce  $i$ ) :

$$\begin{aligned} \frac{d\Gamma(d/2)}{m_i \pi^{(d-1)/2}} \mathcal{F} T_i &= \chi_{ii} \sigma_{ii}^{d-1} n_i \frac{2(1 - \alpha_{ii}^2)}{m_i^{3/2}} T_i^{3/2} + \chi_{ij} \sigma_{ij}^{d-1} n_j \mu_{ji} \\ &\left[ \mu_{ji} (1 - \alpha_{ij}^2) \left( \frac{2T_i}{m_i} + \frac{2T_j}{m_j} \right) + 4(1 + \alpha_{ij}) \frac{T_i - T_j}{m_1 + m_2} \right] \left( \frac{2T_i}{m_i} + \frac{2T_j}{m_j} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$



où  $\Gamma$  est la fonction d'Euler,  $\mathcal{F}T_i$  traduit l'effet du forçage sur la température de l'espèce  $i$  (terme source), et  $\mu_{ij} = m_i/(m_i + m_j)$ .

La définition précise du forçage permet ensuite de résoudre ces équations et d'obtenir  $\gamma = T_1/T_2$ . Nous avons en particulier étudié le cas du thermostat stochastique : le forçage est un bruit blanc de sorte que les particules obéissent à l'équation de Langevin (A.5)

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} + \boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (\text{C.5})$$

Le terme de forçage apparaissant dans (C.4) devient  $\mathcal{F}T_i = m_i \xi_0^2$  et l'on obtient ainsi un modèle d'ordre 0 auquel confronter les résultats expérimentaux. Les températures s'obtiennent analytiquement dans quelques cas limites [32], et le cas échéant par simple recherche numérique des solutions de (C.4). Bien que le modèle soit en l'état assez cru, les valeurs de  $\gamma = T_1/T_2$  qu'il fournit sont en bon accord avec les résultats expérimentaux (et indépendantes de l'amplitude du bruit  $\xi_0$ , comme il se doit). Les tendances observées dans les expériences sont ainsi confirmées et affinées : les particules les plus massives sont génériquement (mais pas systématiquement) les plus énergétiques, la violation d'équipartition est d'autant plus prononcée que le rapport des masses est élevé alors que les rapports des rayons et des densités ne jouent qu'un rôle mineur (cf la référence [32]). Quelques exemples de comportement de  $\gamma$  sont donnés en figure C.1.

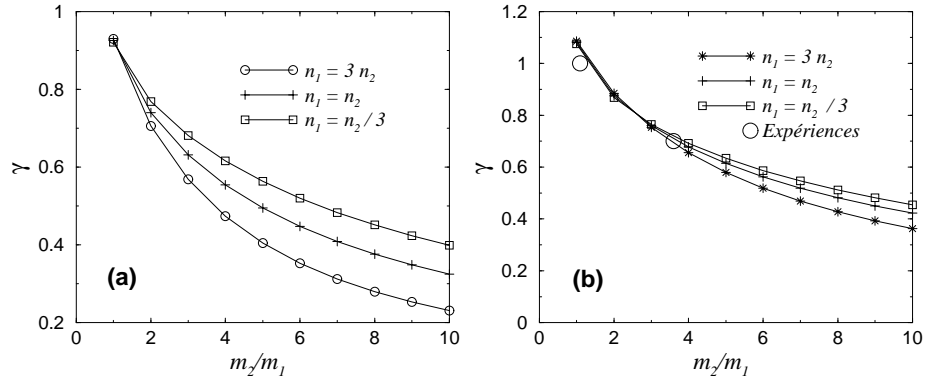


FIG. C.1 – (a) :  $\gamma = T_1/T_2$  en fonction du rapport des masses, pour  $\alpha_{11} = 0.7$ ,  $\alpha_{12} = 0.8$ ,  $\alpha_{22} = 0.9$  et  $\sigma_1 = \sigma_2$ , et divers rapports de densités  $n_1/n_2$ . (b) : même figure mais pour des inélasticités « inversées » ( $\alpha_{11} = 0.9$ ,  $\alpha_{12} = 0.8$  et  $\alpha_{22} = 0.7$ ), ainsi que les valeurs expérimentales de [29], correspondant à des valeurs similaires des paramètres.

## C.4 Simulations de dynamique moléculaire

Afin de tester dans un cadre plus « réaliste » l'influence des différents paramètres, nous avons également réalisé des simulations de dynamique moléculaire, avec injection d'énergie par des parois vibrantes et dissipation en volume [20].

Les principaux résultats sont résumés dans la figure C.2, qui montre un exemple représentatif de profils de densité et de température pour les deux constituants d'un mélange. Exactement comme pour un granulaire monodisperse, la température baisse et la densité augmente lorsque l'on s'éloigne des bords vibrants situés en  $y = 0$  et  $y = L$ , qui injectent l'énergie : en effet,

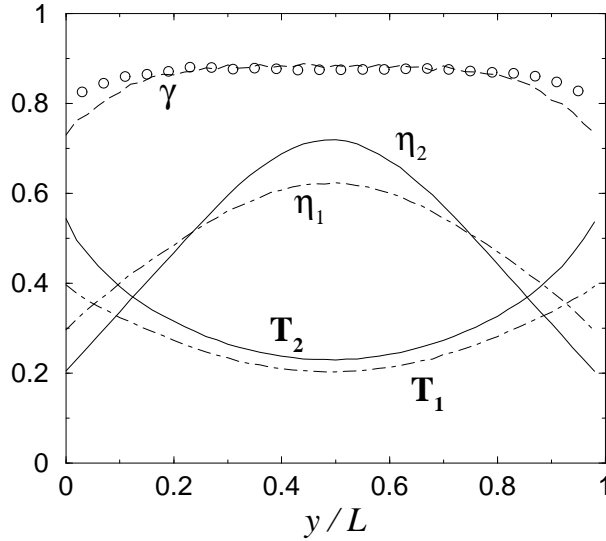


FIG. C.2 – Profils verticaux pour un mélange binaire avec  $m_2 = 3m_1$ ,  $\alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{22} = 0.85$ . La fraction d'empilement moyenne est  $\eta_0 = 0.015$ , les fractions moyennes partielles sont égales ( $\eta_{1,0} = \eta_{2,0}$ ) et le mélange équimolaire comporte  $N = 500$  particules. Les deux constituants étant de même taille, les fractions d'empilement  $\eta_1$  et  $\eta_2$  sont directement proportionnelles aux densités locales. Les courbes indexées  $\eta_i$  représentent  $\eta_i(y)/\eta_{i,0}$ . Dans la partie supérieure du graphe, la courbe pointillée montre le rapport de température  $\gamma = T_1/T_2$ ; les cercles représentent la même quantité, pour un mélange non équimolaire (cas d'une dissymétrie assez forte, où  $\eta_{2,0} = 8\eta_{1,0}$ ).

l'énergie injectée est dissipée par les collisions inélastiques et l'énergie cinétique des grains diminue donc.

L'étude du rapport entre les températures des deux espèces,  $\gamma = T_1/T_2$ , fait ressortir deux points importants : d'une part,  $\gamma$  présente un profil beaucoup plus homogène que les températures elles-mêmes ; d'autre part, la proximité entre les deux courbes de la partie supérieure de la figure montre que la composition relative a peu d'influence sur le rapport  $\gamma$ . Ces résultats sont proches des observations expérimentales.

D'une manière générale, on constate un très bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux. Cet accord concerne non seulement les valeurs de  $\gamma$ , et surtout leur évolution en fonction des paramètres du problème (rapport des masses, inélasticités, densités relatives...), mais également ce qui relève d'une observation plus détaillée, comme l'anisotropie de la température<sup>3</sup>, ou même des tendances fines comme des profils non monotones de  $\gamma$  en fonction de la distance aux parois vibrantes, aux densités plus élevées que celles de la figure C.2...cf [20]. Ces dernières comparaisons font appel à des données expérimentales non publiées, communiquées par K. Feitosa et N. Menon de l'Université du Massachusetts.

En résumé, des simulations numériques de dynamique moléculaire du modèle de sphères dures inélastiques permettent de reproduire assez fidèlement les résultats expérimentaux, malgré la simplicité du modèle et l'« oubli » d'un certain nombre de caractéristiques des

<sup>3</sup>on peut définir des températures horizontales et verticales par la variance des composantes concernées de la vitesse.

billes réelles. Ces simulations permettent donc en particulier d'explorer plus facilement l'espace des paramètres accessible.

## C.5 Obtention et test de l'équation d'état du mélange

Nous nous sommes de plus demandés si, dans un mélange de gaz granulaires, hors d'équilibre et donc hors du domaine d'application des relations thermodynamiques, il était possible de définir une équation d'état qui soit compatible avec les données observées dans les simulations numériques.

Nous avons choisi de calculer une pression purement cinétique à partir du théorème du viriel :

$$PV = \frac{1}{d} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{f}_i \right\rangle_t. \quad (\text{C.6})$$

Dans cette expression,  $d$  est la dimension d'espace,  $\mathbf{r}_i$  la position de la particule  $i$  (d'une espèce quelconque) sur laquelle s'exerce une force  $\mathbf{f}_i$ ; les crochets désignent une moyenne temporelle. Dans le modèle des sphères dures inélastiques, les particules ne subissent des interactions que lors des collisions. La moyenne temporelle devient alors une moyenne collisionnelle du transfert de quantité de mouvement. Dans le cadre de la théorie cinétique d'Enskog-Boltzmann, il est possible d'évaluer cette moyenne (cf. appendice de la publication [20]), et d'obtenir

$$P = \sum_i \rho_i T_i + \rho \eta 2^{d-1} \sum_{i,j} x_i x_j \frac{m_j}{m_i + m_j} (1 + \alpha_{ij}) T_i \frac{\sigma_{ij}^d}{\langle \sigma^d \rangle} \chi_{ij}, \quad (\text{C.7})$$

où l'indice  $i$  (ou  $j$ ) porte sur les différentes espèces (masse  $m_i$ , densité  $\rho_i$ , diamètre  $\sigma_i$  et fraction relative  $x_i$ , avec  $\sum_i x_i = 1$ ). La valeur moyenne sur la distribution de taille est notée  $\langle \dots \rangle$ ,  $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$ , et les  $\chi_{ij}$  désignent les fonctions de corrélation de paire au contact, que nous remplaçons comme précédemment par leur limite de basse densité ( $\chi_{ij} = 1$ ). La relation (C.7) se réduit dans le cas élastique à l'expression exacte de la pression d'un mélange de sphères dures (on a alors équipartition  $T_i = T$ ). A notre connaissance aucune expression de  $P$  n'avait jusqu'ici été proposée dans la littérature, tenant compte à la fois de l'inélasticité et de la violation d'équipartition; il est à noter que l'étude de la violation de l'équipartition est assez récente, et que les mélanges binaires de granulaires ont longtemps été considérés comme ayant une unique température. Enfin, notons que l'expression (C.7) a été obtenue indépendamment de la forme de la distribution des vitesses  $f_1(\mathbf{v})$ ; en particulier, aucune hypothèse de type gaussienne n'a été invoquée.

Nous avons testé l'équation d'état proposée en utilisant les simulations de dynamique moléculaire décrites ci-dessus. Ces simulations permettent en effet d'échantillonner une large gamme de paramètres (densité, température) en une unique configuration, grâce aux hétérogénéités mises en évidence (figure C.2). Dans nos simulations, ni ségrégation totale, ni convection (pas d'écoulement à grande échelle) ne sont observées. Les équations bilan de l'hydrodynamique impliquent alors, en régime stationnaire, que le tenseur des pressions est de divergence nulle; s'il y a invariance par translation dans la direction  $x$  transverse au forçage, on obtient  $\partial_y P_{yy} = 0$ . Ainsi, en remplaçant les  $T_i$  par les valeurs mesurées dans la simulation pour la variance  $T_i^{yy}$  des vitesses verticales en un point donné, on devrait obtenir une valeur pour  $P$  indépendante de l'altitude  $y$  (les densités locales  $\rho_i$  et les fractions relatives sont également mesurées dans la simulation). C'est en effet ce que l'on obtient, avec une très bonne précision :  $P_{yy}$  est constant

dans toute la cellule, y compris au voisinage immédiat des bords vibrants. Il s'agit là d'un test indirect de la validité de l'équation (C.7). Notons finalement que des simulations numériques récentes [28] ont montré l'impossibilité de définir une équation d'état de forme simple (i.e. sous une forme telle que  $P/(\rho T)$  est une fonction de la densité seule) lorsque l'inélasticité des particules devient trop importante.

## Chapitre D

# Une expérience de « Démon de Maxwell »

### D.1 Le phénomène

En 1871, James Clerk Maxwell imaginait un démon qui soit capable de séparer molécules lentes et rapides dans un gaz, afin de créer un compartiment « chaud » et un compartiment « froid ». Plusieurs physiciens parmi lesquels Léon Brillouin ont contribué à exorciser ce démon : dans un gaz à l'équilibre, une telle séparation spontanée est bien sûr impossible. En revanche, comme souligné en introduction, un « gaz granulaire » ne constitue pas un système à l'équilibre : il est maintenu dans son état « gazeux » par un apport continu d'énergie. Plusieurs groupes ont montré qu'une séparation spontanée similaire à celle imaginée par Maxwell est alors possible [33, 34].

Le dispositif expérimental est étonnamment simple : on utilise une boîte divisée en deux compartiments communiquant par une ouverture (voir figure D.1). Cette boîte contient des billes qui peuvent éventuellement passer d'un compartiment à l'autre. Le gaz granulaire obtenu en agitant fortement le récipient se répartit symétriquement dans les deux compartiments ; si on diminue lentement l'agitation, la situation reste symétrique jusqu'à un seuil critique en dessous duquel la symétrie se brise spontanément entre les deux compartiments. L'un des deux devient plus peuplé, la dissymétrie augmentant encore si l'on abaisse l'amplitude d'agitation. Dans le compartiment le plus peuplé, les billes subissent plus de collisions, dissipent plus d'énergie d'où une énergie cinétique moyenne plus faible.

L'identification communément utilisée dans les gaz granulaires entre énergie cinétique moyenne des billes et « température » amène donc à considérer qu'on obtient un compartiment plus dense et plus « froid », en contact avec un compartiment plus dilué et plus « chaud ». Ce résultat explique l'utilisation du nom « démon de Maxwell » pour ce type d'expériences. Le second principe de la thermodynamique n'est bien sûr pas remis en question, puisque le gaz granulaire est continuellement hors d'équilibre.

L'instabilité droite/gauche peut être expliquée relativement simplement. A cause de l'inélasticité, une région plus dense, dans laquelle se produisent donc plus de collisions, a une énergie moyenne plus basse. Considérons alors une fluctuation qui rend un des compartiments légèrement plus peuplé que l'autre. L'énergie moyenne dans ce compartiment diminue, et par suite, les particules s'en échappent moins facilement. A l'inverse, l'énergie moyenne dans l'autre compartiment augmente un peu et les particules peuvent d'autant mieux s'échapper.

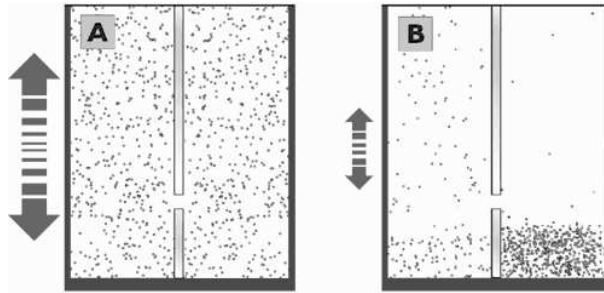


FIG. D.1 – Schéma expérimental : un matériau granulaire se trouve dans un récipient constitué de deux compartiments communiquant par une ouverture de petite taille. Une excitation périodique maintient l'ensemble dans un état gazeux. (A) pour les fortes amplitudes de vibration, la répartition des grains est symétrique droite/gauche. (B) en diminuant progressivement l'amplitude de forçage, on observe que les grains peuplent majoritairement un compartiment, qui devient plus « froid » que l'autre.

La fluctuation se trouve amplifiée. Si la vibration de la base est suffisamment forte, l'apport d'énergie peut l'annihiler. Si au contraire cet apport est trop faible, une brisure de symétrie se produit.

Des approches phénoménologiques ont été proposées pour affiner l'argument, mais aucune description rigoureuse –avec un point de départ microscopique– n'a été élaborée à ce jour. Il en va autrement lorsque l'ouverture entre les deux compartiments est de grande taille (par exemple lorsqu'elle permet le libre passage sur une moitié de la hauteur totale, dans la partie inférieure du récipient) et que l'agitation fournie est suffisamment forte pour pouvoir négliger la force de pesanteur. En maintenant l'agitation constante, la brisure de symétrie apparaît alors lorsque l'on augmente le nombre de billes  $N$  au-delà d'une valeur critique. L'état stationnaire symétrique, dans lequel le nombre moyen de particules dans chaque compartiment vaut  $N/2$ , est alors instable. L'un des compartiments devient plus dense et donc plus « froid » que l'autre. Remarquablement, cette brisure de symétrie apparaît au niveau d'une description hydrodynamique simplifiée [35], dont les prédictions sont par ailleurs en excellent accord avec les simulations numériques mettant en jeu les sphères dures inélastiques.

## D.2 Cas d'un mélange binaire

En considérant les résultats décrits au chapitre précédent C pour les mélanges binaires, nous nous sommes demandés si le processus du « démon de Maxwell » pouvait être mis à profit pour séparer les constituants d'un mélange granulaire : les particules plus légères ayant une plus faible température granulaire, il semble possible que la brisure de symétrie entre compartiment « chaud » et « froid » mène à une ségrégation. Nous avons étudié cette question par simulations de dynamique moléculaire en dimension 2, en utilisant des disques bidisperses (de type 1 et 2, nombres  $N_1$  et  $N_2$ , masses  $m_1$  et  $m_2$ ) ayant différents rapports de masses et coefficients d'inélasticité, dans une boîte de simulation séparée en deux compartiments, avec une ouverture de grande taille [36]. Une des parois communes aux deux compartiments permet d'injecter de l'énergie au système (comme dans les simulations du chapitre C). Par souci de simplicité, nous nous sommes limités au cas où  $N_1 = N_2$ .

A faible nombre total de particules, le système reste symétrique en moyenne, avec autant de particules de chaque type dans les deux compartiments. Lorsque le nombre de particules augmente, une brisure de symétrie droite/gauche apparaît, avec un compartiment plus peuplé, où les températures granulaires sont plus faibles, et un compartiment plus dilué et plus « chaud ».

### D.2.1 Paramètre d'ordre pour la transition

Les premières études de la brisure de symétrie utilisaient la différence  $\Delta N = N^{gauche} - N^{droite}$  entre le nombre de particules présentes dans le compartiment de droite et celles présentes à gauche. Cependant, sur un temps suffisamment long, les configurations droite/gauche les plus dissymétriques finissent par s'inverser, et la moyenne de  $\Delta N$  finit par s'annuler. A faible nombre de particules, le système fluctue autour d'une situation symétrique. Lorsque le nombre de particules augmente, on s'aperçoit clairement que la situation symétrique n'est plus stable : le système passe d'une configuration dissymétrique à une autre, avec un temps typique de plus en plus grand, et  $\Delta N$  moyenné va rester nul. A très grand nombre de particules, le système va rester dans une des configurations dissymétriques pendant presque toute la simulation, et la moyenne de  $\Delta N$  sur la durée de la simulation sera non-nulle. On voit cependant bien que cette mesure va dépendre du temps accessible à la simulation (figure D.2).

Il est donc essentiel de considérer l'histogramme des valeurs prises par  $\Delta N$  : cet histogramme passe d'un pic centré en 0 au-dessous de la transition à une forme caractéristique à deux bosses lorsque l'état symétrique devient instable. Ce comportement rappelle celui de l'histogramme de l'aimantation pour un modèle d'Ising lors de la transition de l'état paramagnétique à l'état ferromagnétique. Dans notre cas, la transition sera donc localisée par l'évolution de la valeur la plus probable de  $\Delta N$  en fonction du nombre de particules.

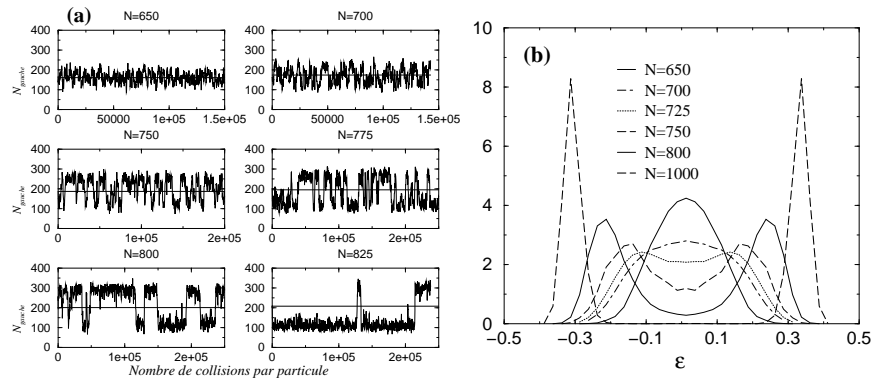


FIG. D.2 – (a) évolution temporelle du nombre de particules de type 2 dans le compartiment de gauche, en fonction du temps, pour diverses valeurs de  $N$ , et  $m_1/m_2 = 3$ . La ligne horizontale correspond à la symétrie droite-gauche. (b) Distribution de probabilité de  $\epsilon = (N^{gauche} - N^{droite})/(2N)$  pour  $m_1/m_2 = 3$ .

### D.2.2 Résultats pour un mélange binaire

Les simulations d'un mélange bidisperse montrent, comme dans le cas monodisperse, une importante brisure de symétrie droite/gauche lorsque le nombre total de particules est suffisam-

ment grand ; l'un des compartiments devient plus peuplé, avec des températures granulaires plus basses. La brisure de symétrie est plus forte pour l'espèce lourde, qui est donc majoritaire dans le compartiment « froid » ; de plus, lorsque le rapport  $m_1/m_2$  augmente, la brisure de symétrie augmente pour l'espèce 1 et diminue pour l'espèce 2<sup>1</sup>. Toutefois, la densité de l'espèce légère dans le compartiment « froid » (où elle est minoritaire) est nettement supérieure à sa valeur dans le compartiment « chaud » où elle est l'espèce dominante. Il apparaît ainsi que la ségrégation lourd/léger n'est que partielle, et en définitive qualitativement comparable à celle de la situation à un seul compartiment (cf par exemple la figure C.2).

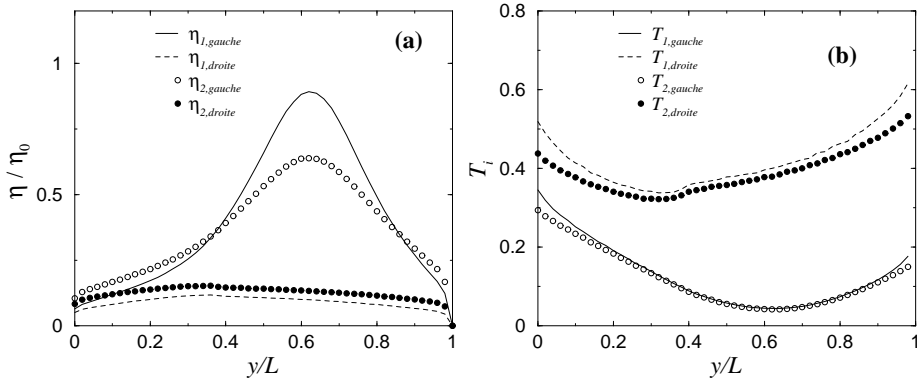


FIG. D.3 – Profils de densité (a) et de température (b) dans les compartiments droite et gauche, pour un mélange de 500 particules lourdes (label 1), et 500 particules légères (label 2). Le rapport des masses est  $m_1/m_2 = 2$  ; les coefficients de restitution partiels valent 0.9 ; la coordonnée verticale est notée  $y$ , et  $\eta_0$  désigne la densité moyenne dans le récipient. L'énergie est injectée par une paroi vibrante à  $y = 0$ . La séparation entre les compartiments se trouve aux altitudes  $y$  comprises entre  $0.4L$  et  $L$ , où  $L$  est la hauteur du récipient.

En résumé, le dispositif expérimental en compartiments étudié ici ne semble pas réaliser une séparation efficace entre les constituants d'un mélange. L'intérêt des simulations est néanmoins de mettre en évidence l'existence de fluctuations temporelles de densité particulièrement marquées au voisinage du point où la solution symétrique droite/gauche devient instable [36]. Ces fluctuations invalident les approches hydrodynamiques usuelles et le recours à l'hydrodynamique fluctuante semble une question à approfondir pour tenter une description correcte du système. Il est intéressant de noter qu'un phénomène similaire a été observé de manière indépendante et simultanée dans une autre brisure de symétrie d'un gaz granulaire : près de la transition prédite au niveau hydrodynamique, le système exhibe de grandes fluctuations qui le font passer très rapidement d'un état dissymétrique à un autre [37].

<sup>1</sup>Nous avons étudié différentes valeurs des coefficients de restitutions des deux espèces : la situation qualitative reste inchangée



## Références bibliographiques

- [1] T. Pöschel and S. Luding (eds.), *Granular Gases*, Lecture Notes in Physics, Vol. 564 (Springer, Berlin, 2001) ; T. Pöschel and N. V. Brilliantov (eds.), *Granular Gas Dynamics*, Lecture Notes in Physics, Vol. 624 (Springer, Berlin, 2003).
- [2] R. D. Wildman, J. M. Huntley et D. J. Parker, *Phys. Rev. E* **63**, 061311 (2001).
- [3] F. Rouyer et N. Menon, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3676 (2000).
- [4] D.L. Blair et A. Kudrolli, *Phys. Rev. E* **67**, 041301 (2003).
- [5] S. Luding, H.J. Herrmann et A. Blumen, *Phys Rev E* **50**, 3100 (1994).
- [6] S.F. Foerster, M.Y. Louge, H. Chang et K. Allia, *Phys. Fluids* **6**, 1108 (1994).
- [7] L. Labous, A.D. Rosato et R.N. Dave, *Phys. Rev. E* **56**, 5717 (1997). M.Y. Louge et M.E. Adams, *Phys. Rev. E* **65**, 021303 (2002). H. King, R. White, I. Maxwell et N. Menon, cond-mat/0209490.
- [8] R. Soto, J. Piasecki et M. Mareschal, *Phys. Rev. E* **64**, 031306 (2001).
- [9] J. Lutsko, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3344 (2001).
- [10] I. Pagonabarraga, E. Trizac, T.P.C. van Noije et M.H. Ernst, *Phys. Rev. E* **65**, 011303 (2002).
- [11] G.A. Bird, *Phys. Fluids*, **6** 1518 (1963). Pour un exposé plus complet, on peut consulter « Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas flows » (Clarendon Press, Oxford, 1994), du même auteur.
- [12] S. Warr, J. M. Huntley, et G. T. H. Jacques, *Phys. Rev. E* **52**, 5583 (1995).
- [13] T.P.C. van Noije et M. Ernst, *Gran. Matter* **1**, 57 (1998).
- [14] O.R. Walton et R.L. Braun, *J. Rheol.* **30**, 949 (1986).
- [15] S. Luding, *Phys. Rev. E* **52**, 4442 (1995).
- [16] R. Cafiero, S. Luding, H.J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6014 (2000).
- [17] A. Barrat et E. Trizac, *Eur. Phys. J. E* **11**, 99 (2003).
- [18] A. Barrat, E. Trizac et J.N. Fuchs, *Eur. Phys. J. E* **5**, 161 (2001).
- [19] K. Feitosa et N. Menon, 2D granular gases confined in a vertical cage as in [3], non publié.
- [20] A. Barrat et E. Trizac, *Phys. Rev. E* **66**, 051303 (2002).
- [21] D. Benedetto, E. Caglioti, J.A. Carrillo et M. Pulvirenti, *J. Stat. Phys.* **91**, 979 (1998).
- [22] C. Villani, *A Review of Mathematical Topics in Collisional Kinetic Theory Handbook of mathematical fluid mechanics*, Susan Friedlander et Denis Serre editors, publié par North-Holland 2002, Volume I.
- [23] A. Barrat, T. Biben, Z. Rácz, E. Trizac et F. van Wijland, *J. Phys. A* **35**, 463 (2002).
- [24] D. Benedetto, E. Caglioti et M. Pulvirenti, *Math. Mod. and Num. An.* **31**, 615 (1997).
- [25] J.J. Brey, M.J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **67**, 021307 (2003).
- [26] D. Paolotti, C. Cattuto, U. Marini Bettolo Marconi, A. Puglisi, *Granular Matter* **5**, 75 (2003).
- [27] J.S. van Zon, F.C. MacKintosh, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 038001 (2004).
- [28] O. Herbst, P. Mller, M. Otto, A. Zippelius, *Phys. Rev. E* (2004).

- [29] K. Feitosa et N. Menon, Phys. Rev. Lett. **88**, 198301 (2002).
- [30] R.D. Wildman et D.J. Parker, Phys. Rev. Lett. **88**, 064301 (2002).
- [31] Y. Limon Duparcmeur, Thèse de l'université de Rennes I (1996) ; V. Garzó et J. Dufty, Phys. Rev. E **60** 5706 (1999). J. M. Montanero et V. Garzó, Gran. Matter **4**, 17 (2002). R. Clelland et C. M. Hrenya, Phys. Rev. E **65**, 031301 (2002). J. M. Montanero et V. Garzó, Phys. Rev. E **67**, 021308 (2003). T. Biben, Ph. A. Martin et J. Piasecki, Physica A, **310**, 308 (2002). U. Marini Bettolo Marconi et A. Puglisi, Phys. Rev. E **65**, 051305(2002) et Phys. Rev. E **66**, 011301 (2002). Ph. A. Martin et J. Piasecki, Europhys. Lett. **46**, 613 (1999).
- [32] A. Barrat et E. Trizac, Granular Matter **4**, 57 (2002).
- [33] H.J. Schlichting et V. Nordmeier, Math. Naturwiss. Unterr. **49**, 323 (1996).
- [34] K. van der Weele, D. van der Meer, M. Versluis et D. Lohse, Europhys. Lett. **53**, 328 (2001). Ce travail établit le résultat intéressant que la brisure de symétrie en question peut se voir comme une transition de phase du premier ordre lorsque le récipient est constitué de trois compartiments, et comme une transition du second ordre dans le cas avec deux compartiments.
- [35] J. Brey, F. Moreno, R. Garcia-Rojo, M. Ruiz-Montero, Phys. Rev. E **65**, 011305 (2001).
- [36] A. Barrat et E. Trizac, Mol. Phys. **101**, 1713 (2003).
- [37] B. Meerson, T. Pöschel, P.V. Sasorov and T. Schwager, Phys. Rev. E **69**, 021302 (2004).

Troisième partie

**Réseaux complexes**



# Chapitre A

## Introduction

Depuis un peu plus d'une décennie, la communauté des physiciens statisticiens porte une attention sans cesse croissante à des systèmes en dehors de son champ d'application traditionnel. La physique statistique possède une longue tradition dans l'étude des comportements collectifs des systèmes à plusieurs corps et elle a pour cela développé des outils mathématiques et des concepts très puissants qui ont permis la compréhension des transitions de phases et des systèmes critiques. Ces phénomènes sont des exemples emblématiques de systèmes complexes possédant des propriétés émergentes et il était naturel pour ces physiciens d'envisager l'application de ces méthodes à de nouveaux problèmes provenant de disciplines différentes. L'exemple le plus récent de cette démarche concerne le domaine actuellement très actif de la structure et des fonctions des réseaux complexes. Ces réseaux qui possèdent en général un grand nombre de constituants ne présentent pas d'ordre facile à mettre en évidence et constituent donc un terrain privilégié d'étude pour la physique statistique [1, 2, 3].

Des travaux récents ont montré que l'étude des réseaux est par nature interdisciplinaire car ceux-ci jouent un rôle central dans la compréhension de nombreux systèmes dans des domaines scientifiques aussi variés que la physique, la biologie, l'informatique ou bien les technologies de l'information. Les exemples de réseaux vont de la structure de l'Internet ou de la Toile jusqu'aux interconnexions d'agents financiers ou bien aux réseaux trophiques des écosystèmes. On peut aussi citer les grandes infrastructures critiques telles que le réseau électrique ou le réseau des transports aériens, dont dépendent de manière cruciale nos sociétés modernes. Enfin, la cellule, constituant élémentaire des êtres vivants, n'est pas une exception et son organisation ainsi que ses fonctions sont aussi le résultat d'un réseau compliqué d'interactions entre gènes, protéines et autres molécules.

Pendant longtemps, on a considéré que tous ces systèmes pouvaient être décrits par un ensemble de points reliés aléatoirement, suivant le prototype du graphe aléatoire proposé par les mathématiciens Erdős et Rényi dans les années 60 [4]. De tels graphes sont homogènes, dans le sens que la distribution de probabilité  $P(k)$  du nombre de voisins ou connectivité  $k$  est centrée autour de la valeur moyenne  $\langle k \rangle$ , avec des fluctuations limitées, c'est-à-dire que  $\langle k^2 \rangle$  est fini, et  $P(k)$  décroît exponentiellement rapidement à grand  $k$  (figure A.1). L'apparition ces dernières années de grandes bases de données, l'augmentation de la taille de la mémoire et des capacités de calcul des ordinateurs ont radicalement modifié cette vision. En particulier, les projets de cartographie de la Toile et de l'Internet ont offert une première chance d'étudier la topologie des grands réseaux complexes. Graduellement, d'autres « cartes » sont apparues et ont permis la description de nombreux réseaux intervenant dans les sciences sociales, les

infrastructures critiques et la biologie. Les chercheurs de ce domaine ont alors commencé à étudier de manière systématique ces grands ensembles de données et ont mis en évidence des ordres cachés et des motifs qui peuvent être considérés comme la manifestation de lois sous-jacentes gouvernant l'évolution de ces systèmes complexes. En effet, lors de l'étude de la structure des réseaux complexes, on observe qu'en dépit de leur apparente complexité et de leur caractère aléatoire, des motifs et des régularités statistiques apparaissent et peuvent être facilement traduits dans le langage des mathématiques.

Plus spécifiquement, nombre de ces systèmes sont des « petits-mondes », ce qui traduit le fait que la distance topologique moyenne dans le réseau (qui mesure le nombre moyen de sauts pour aller d'un site à un autre) varie très lentement avec le nombre total de sites (typiquement comme un logarithme). Une autre découverte particulièrement importante est le fait que de nombreux réseaux sont caractérisés par une abondance statistique de « hubs », c'est-à-dire des sites qui ont un très grand nombre de connexions avec d'autres éléments du réseau. Cette caractéristique ressort clairement lors de l'observation de la fréquence d'apparition de sites avec  $k$  voisins, qui est décrite par une loi de puissance, i.e.  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  avec typiquement  $\gamma \in [2; 3]$ , indiquant ainsi l'absence de toute échelle caractéristique (figure A.1). En d'autres termes, pour ces réseaux, la notion de moyenne ou de site représentatif (ou typique) a peu de sens car les fluctuations de la connectivité d'un site à un autre sont gigantesques (en particulier si  $\gamma < 3$ ,  $\langle k^2 \rangle$  diverge avec la taille du système). Ce résultat a permis l'identification d'une nouvelle catégorie de réseaux dits « sans-échelle » dont les propriétés topologiques sont cruciales pour un grand nombre de propriétés physiques du système global telles que sa résistance à l'endommagement, sa vulnérabilité face à une attaque ou bien encore la propagation d'épidémies.

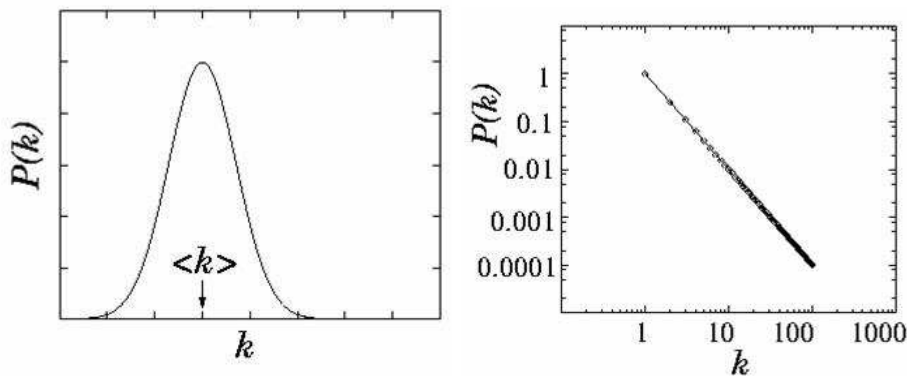


FIG. A.1 – Exemples schématiques de distributions de connectivité : à gauche, distribution décroissant exponentiellement à grand  $k$ , typique de réseaux homogènes ; à droite, distribution en loi de puissance caractéristique de réseaux hétérogènes sans-échelle. Une bonne visualisation requiert une échelle linéaire à gauche, et logarithmique à droite.

Les tentatives de modélisation et de compréhension de l'origine des propriétés topologiques observées ont mené à un changement radical de perspective en passant des graphes statiques reproduisant le réseau à un instant donné à une vision dynamique qui tente de reproduire l'évolution des réseaux. Cette nouvelle approche provient de l'observation du fait que la plupart des réseaux résultent d'un processus de croissance. Le nouveau paradigme est représenté par le modèle de Barabási et Albert (BA), dont la construction combine la croissance du réseau et un ingrédient connu sous le nom d'attachement préférentiel [5] : en effet, les nouveaux sites

introduits dans le réseau n'établissent pas leurs connexions complètement au hasard, mais vont plutôt se lier à des sites ayant déjà de nombreux voisins (et donc « connus », ou « importants »). La règle de construction est donc la suivante : on part d'un certain nombre  $N_0$  de sites, liés entre eux ; à chaque pas de temps, un nouveau site est introduit ; ce site  $n$  choisit  $m$  sites préexistants avec une probabilité proportionnelle à leur connectivité (la probabilité de choisir un site  $i$  est donc  $k_i / \sum_j k_j$  où  $k_i$  est le nombre de voisins du site  $i$ ), et établit des liens vers ces sites ; le processus est ensuite renouvelé par l'arrivée d'un nouveau site, jusqu'à l'obtention de la taille désirée du réseau. Ces règles simples permettent d'obtenir un réseau sans-échelle, caractérisé par une distribution de connectivités en loi de puissance avec  $\gamma = 3$ . De nombreuses variations de ce modèle ont été proposées et étudiées par la suite : les réseaux complexes sont maintenant typiquement décrits comme des systèmes dynamiques qui évoluent par addition (ou soustraction) de liens et de nœuds. L'ensemble des règles dynamiques qui définit ces processus résume la théorie dynamique nécessaire à la compréhension des propriétés macroscopiques des réseaux.

La recherche dans ce domaine a un caractère hautement interdisciplinaire, mais la physique statistique y a énormément contribué dans la mesure où les réseaux sont constitués d'un grand nombre de composantes dont les interactions donnent lieu à des comportements collectifs émergents et des propriétés topologiques non-triviales. C'est dans ce contexte que la physique statistique s'applique naturellement à ces systèmes et se propose de relier les diverses propriétés à grande échelle aux interactions locales qui gouvernent l'évolution des éléments constitutifs du système. Ce n'est donc pas par hasard que de nombreux articles fondateurs de ce domaine ont été publiés par des physiciens et ont eu un grand impact sur d'autres disciplines. Cependant, une approche véritablement interdisciplinaire est nécessaire afin de comprendre les spécificités de réseaux particuliers. Cette interdisciplinarité a conduit à l'émergence d'un nouveau domaine de recherche parfois défini comme la « science des réseaux » [1, 2, 3].

Dans ce cadre, notre activité récente s'est en particulier concentrée sur plusieurs aspects pour lesquels l'introduction d'éléments dynamiques apparaît comme essentielle pour une compréhension plus profonde du réseau et de son comportement.

Nous nous sommes d'une part intéressés à la caractérisation des réseaux complexes au-delà de la topologie : la plupart de ces réseaux présentent en effet une grande diversité dans l'intensité des liens présents, qui doit être analysée dans le contexte des réseaux pondérés (chapitre B).

D'autre part, nous avons étudié le problème de la découverte par des méthodes de cartographie de réseaux d'informations à grande échelle comme Internet, dont la topologie reste en grande partie inconnue (chapitre C). Une approche analytique de type champ moyen, alliée à des simulations numériques, nous a permis de mieux comprendre différents aspects essentiels de cette problématique.





## Chapitre B

# Réseaux pondérés : Caractérisation et modélisation

Comme souligné en introduction, l'étude de nombreux réseaux réels ne saurait être complète sans une caractérisation de la diversité des liens entre les nœuds du réseau, et des éventuelles corrélations entre la topologie et les intensités des liens, ou le trafic prenant place sur ces liens. Par exemple, dans le réseau Internet, certaines connexions offrent une bande passante bien supérieure à d'autres ; dans les réseaux sociaux, certains liens entre personnes ou entités sociales sont nettement plus forts que d'autres ; dans les réseaux de nature biologique également, certaines réactions chimiques (par exemple) portent des flux énormes tandis que d'autres sont marginales.

Dans ce chapitre, nous présentons quelques outils essentiels à la caractérisation empirique des réseaux pondérés, avant d'étudier plus en détail un réseau de type social et un réseau d'infrastructure, et de proposer un modèle simple de réseau pour lequel l'évolution de la topologie et celle des intensités des liens sont étroitement couplées.

### B.1 Outils

– *Poids*

Les propriétés d'un graphe sont encodées dans la matrice d'adjacence  $a_{ij}$ , dont les éléments valent 1 s'il existe un lien connectant le site  $i$  au site  $j$ , et 0 sinon (avec  $i, j = 1, \dots, N$  où  $N$  est la taille du réseau). Les réseaux pondérés sont de même décrits par une matrice de poids  $w_{ij}$  qui spécifie les poids des liens (avec  $w_{ij} = 0$  si  $i$  et  $j$  ne sont pas connectés). Dans ce chapitre on considérera seulement le cas de poids symétriques et positifs  $w_{ij} = w_{ji} \geq 0$ .

– *Distributions de connectivité et de poids*

La caractérisation habituelle d'un réseau est obtenue par l'analyse de la distribution de probabilité  $P(k)$  qu'un site a  $k$  voisins. Les réseaux complexes exhibent souvent une distribution en loi de puissance  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  avec  $2 \leq \gamma \leq 3$ , en fort contraste avec les graphes aléatoires pour lesquels  $P(k)$  décroît exponentiellement. De façon similaire, une première caractérisation des poids des liens est obtenue par leur distribution de probabilité  $P(w)$ .

– *Connectivité pondérée*

Un site donné  $i$  est tout d'abord caractérisé par son nombre de voisins  $k_i$ . Certains voisins

peuvent cependant être plus importants que d'autres, ce pourquoi il est nécessaire de considérer la connectivité pondérée définie par [6, 7]

$$s_i = \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} w_{ij} , \quad (\text{B.1})$$

où la somme porte sur l'ensemble  $\mathcal{V}(i)$  des voisins de  $i$ . Cette quantité concentre l'information à la fois sur la connectivité et sur l'importance des poids des liens du site  $i$  : c'est la généralisation naturelle de la connectivité. Dans le cas où les poids et la topologie sont indépendants, on obtient pour la connectivité pondérée des sommets de degré  $k$  :  $s(k) \approx \langle w \rangle k$  où  $\langle w \rangle$  est le poids moyen. En présence de corrélations on peut s'attendre à  $s(k) \approx Ak^\beta$  avec  $\beta > 1$  ou  $\beta = 1$  mais  $A \neq \langle w \rangle$ .

– « *Clustering* » et *clustering pondéré*

Le coefficient de clustering  $c_i$  mesure la densité locale de liens : il est défini pour chaque sommet  $i$  comme la fraction de voisins de  $i$  qui sont connectés entre eux [8]. Le coefficient de clustering moyen  $C = N^{-1} \sum_i c_i$  quantifie donc l'aspect cohésif du réseau, en donnant la densité moyenne de triplets interconnectés. Des informations plus détaillées sont obtenues par l'étude du coefficient  $C(k)$  moyenné sur les sommets de degré  $k$ . Cette caractérisation purement topologique ne tient cependant pas compte du fait que certains voisins peuvent être plus importants que d'autres. Nous avons donc introduit un coefficient de clustering pondéré, qui combine les informations sur la topologie et sur les poids :

$$c_i^w = \frac{1}{s_i(k_i - 1)} \sum_{j,h} \frac{(w_{ij} + w_{ih})}{2} a_{ij} a_{ih} a_{jh} . \quad (\text{B.2})$$

Pour chaque triangle formé dans le voisinage d'un sommet  $i$ ,  $c_i^w$  compte donc le poids des deux liens issus de  $i$ . Ainsi, on ne considère pas seulement le nombre de triangles auxquels participe  $i$  mais aussi leur poids total par rapport à la connectivité pondérée du sommet  $i$ . Le facteur de normalisation  $s_i(k_i - 1)$  assure que  $0 \leq c_i^w \leq 1$ . On définit également  $C^w$  et  $C^w(k)$  comme le coefficient de clustering pondéré moyenné sur tout le réseau ou sur la classe de sommets de degré  $k$ . Dans le cas soit de poids homogènes  $w_{ij} = \text{const}$  soit de poids aléatoires sans corrélations avec la topologie, on retrouve  $C^w = C$  et  $C^w(k) = C(k)$ . Dans des réseaux réels cependant, on peut avoir *a priori* des cas différents : si  $C^w > C$ , les triangles sont plutôt formés par des liens avec des grands poids ; dans le cas contraire, le clustering topologique est en fait généré par des liens peu importants et l'existence de triangles a une importance moindre dans l'organisation du réseau puisque les poids les plus importants sont répartis sur d'autres liens.

– « *Assortativité* » et *assortativité pondérée : affinité*

Une autre quantité importante dans la caractérisation des réseaux est le degré moyen des voisins d'un sommet  $i$ ,

$$k_{nn,i} = \frac{1}{k_i} \sum_{j=1}^N a_{ij} k_j . \quad (\text{B.3})$$

A partir de cette quantité, une mesure commode des corrélations entre les degrés est obtenue par le degré moyen des voisins des sommets de degré  $k$ ,  $k_{nn}(k)$  [9]. Le comportement de cette fonction de  $k$  définit deux grandes classes de réseaux : on parle d'« assortativité » lorsque  $k_{nn}(k)$  croît avec  $k$ , et de « disassortativité » si  $k_{nn}(k)$  décroît [10]. L'assortativité, présente par exemple dans les réseaux sociaux, correspond au fait que des

sommets de fort degré sont préférentiellement liés à d'autres sommets de fort degré. Le cas contraire se rencontre dans des réseaux hiérarchiques pour lesquels les « hubs » sont connectés à de nombreux sommets de faible degré.

Pour les réseaux pondérés, la généralisation de  $k_{nn}$  est obtenue par la moyenne pondérée des degrés des voisins :

$$k_{nn,i}^w = \frac{1}{s_i} \sum_{j=1}^N a_{ij} w_{ij} k_j. \quad (\text{B.4})$$

Cette définition implique que  $k_{nn,i}^w > k_{nn,i}$  si les liens avec les plus grands poids pointent vers les voisins de grand degré, et  $k_{nn,i}^w < k_{nn,i}$  dans le cas contraire. La fonction  $k_{nn,i}^w$  mesure donc l'affinité effective avec des sommets de faible ou fort degré, en prenant en compte l'intensité des interactions. On étudie de même la fonction  $k_{nn}^w(k)$ , définie comme une moyenne sur les sommets de degré  $k$ .

## B.2 Résultats empiriques

Grâce aux outils précédemment introduits, nous avons analysé deux réseaux pondérés de natures différentes :

- le réseau des collaborations scientifiques est un exemple de réseau social; les sommets du réseau sont les auteurs et les liens représentent l'existence d'une collaboration, matérialisée par des articles cosignés. Le réseau analysé comprend les personnes ayant soumis des manuscrits à l'archive de prépublications de matière condensée <sup>1</sup> entre 1995 et 1998. Il est formé de  $N = 12722$  sommets, avec un degré moyen (nombre moyen de collaborateurs)  $\langle k \rangle \approx 6.28$ , et degré maximum 97. Le poids d'un lien a été défini comme suit [11] : l'intensité d'une collaboration entre deux auteurs  $i$  et  $j$  est  $w_{ij} = \sum_p \delta_i^p \delta_j^p / (n_p - 1)$ , où  $p$  désigne les articles,  $n_p$  est le nombre d'auteurs de l'article  $p$ , et  $\delta_i^p$  est 1 si l'auteur  $i$  a signé le papier  $p$ , et 0 sinon. Cette définition semble assez objective : elle donne un poids qui augmente avec le nombre d'articles cosignés, mais la contribution d'un article donné est inversement proportionnelle au nombre de ses auteurs.
- le réseau des connexions aériennes est par contre un exemple de grand réseau d'infrastructure. Il comprend  $N = 3880$  aéroports et les liens correspondent aux liaisons aériennes directes<sup>2</sup>. Le degré moyen est  $\langle k \rangle \approx 9.7$ , et le degré maximum 318. L'intensité d'une connexion est donnée par le nombre de places disponibles sur cette connexion sur une année.

L'analyse des propriétés topologiques de ces réseaux a montré l'existence de lois larges pour les distributions de connectivité [12] (figure B.1). Il s'agit donc clairement de deux réseaux hétérogènes. De plus, la distribution des connectivités pondérées présente également des queues larges, ce qui n'est pas très surprenant puisque  $s_i$  croît avec  $k_i$ .

D'autre part, nous avons étudié les corrélations entre topologie et poids des liens : la figure B.2 montre le comportement obtenu aussi bien pour les vrais réseaux que pour une version « aléatoire » dans laquelle les intensités des connexions sont redistribuées au hasard. Pour le réseau des collaborations, on obtient dans les deux cas  $s(k) \approx \langle w \rangle k$ . Par contre, pour le réseau du transport aérien, un exposant « anormal »  $\beta = 1.5$  est obtenu : la connectivité pondérée

<sup>1</sup><http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat>

<sup>2</sup>Ces données viennent de la base de données IATA (International Air Transportation Association <http://www.iata.org>)

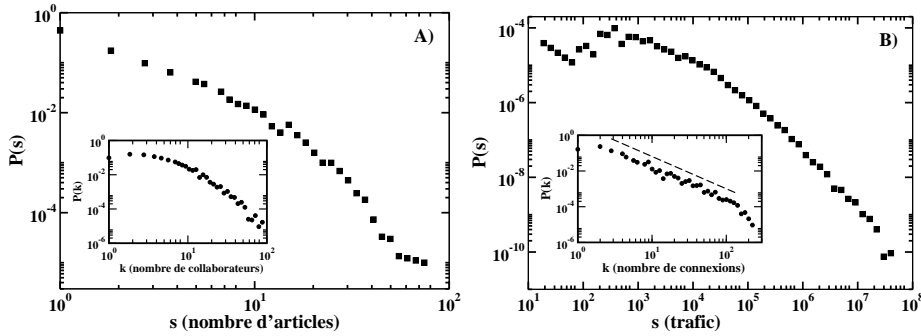


FIG. B.1 – Distributions de connectivité  $k$  (inserts) et de connectivité pondérée  $s$ . A) Pour les collaborations scientifiques  $k$  représente le nombre de co-auteurs, et  $s$  le nombre de publications. B) Pour le réseau des connexions aériennes  $k$  est le nombre de connexions vers d'autres aéroports tandis que  $s$  correspond au nombre total de passagers passant par un aéroport.

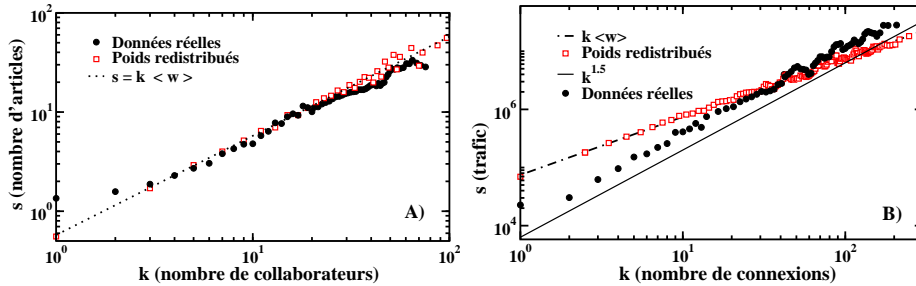


FIG. B.2 – Connectivité pondérée moyenne  $s(k)$  en fonction du degré  $k$ . A) Pour le réseau des collaborations scientifiques les données sont similaires au cas du réseau avec poids aléatoirement redistribués. B) Pour le réseau des connexions aériennes  $s(k)$  est en loi de puissance avec exposant  $\beta \approx 1.5$ , ce qui montre l'existence de corrélations fortes entre topologie et trafic.

croît donc plus vite que la connectivité, ce qui signifie que les intensités des liens appartenant aux sommets les plus connectés sont plus grandes que ce qui serait obtenu avec des poids aléatoires. On observe donc une très forte corrélation entre topologie et trafic dans ce réseau.

Les corrélations topologiques et pondérées des deux réseaux étudiés sont mesurées par les coefficients de clustering et le degré moyen des voisins. Ces quantités sont présentées en figures B.3 et B.4. On constate dans tous les cas que les quantités pondérées peuvent différer fortement des quantités purement topologiques, et donnent des informations supplémentaires sur la structure des réseaux.

#### – Collaborations scientifiques

Le spectre de clustering  $C(k)$  présente une décroissance monotone. Cette structure montre que les auteurs ayant peu de collaborateurs (faible degré) font habituellement partie d'un groupe de recherche bien défini dans lequel tous les chercheurs travaillent ensemble. Par contre, les auteurs à grand degré collaborent avec différents groupes ou communautés qui n'ont que peu de collaborations, d'où un plus faible nombre de triangles. L'inspection de  $C^w(k)$  montre cependant que pour  $k \geq 10$  le clustering pondéré est nettement supérieur au clustering topologique. Ceci implique que les auteurs ayant de

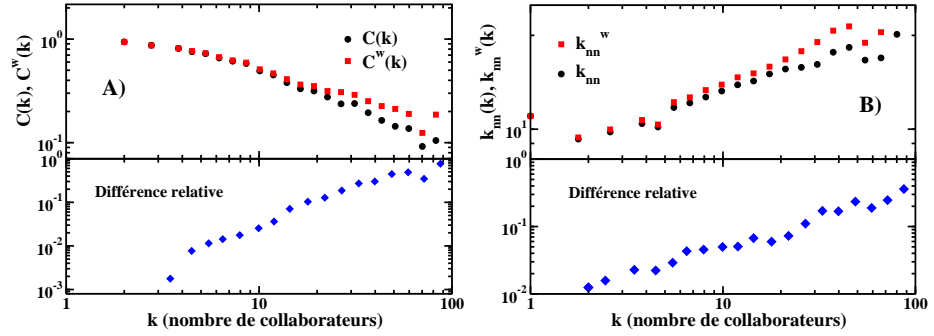


FIG. B.3 – Comparaison des corrélations topologiques et pondérées pour le réseau des collaborations scientifiques. A) Le clustering pondéré est supérieur au clustering pour  $k \geq 10$ . B) Le caractère assortatif, habituel dans les réseaux sociaux, est encore plus marqué si on considère le poids des interactions. La différence relative peut atteindre 100%.

nombreuses collaborations ont tendance à publier plus d’articles avec des « cliques » interconnectées, et constitue donc un signe que les chercheurs ayant beaucoup d’influence forment des groupes de recherche stables où se situe la plus grande part de leur production. D’autre part, le comportement assortatif obtenu, caractéristique des réseaux sociaux, est confirmé par l’analyse de  $k_{nn}^w$ .

– *Réseau de transport aérien*

Dans ce cas, l’analyse des corrélations pondérées nous offre un complément important d’informations. En effet, la décroissance du clustering topologique  $C(k)$ , conséquence du rôle des grands aéroports qui fournissent des connexions vers des destinations lointaines qui ne sont pas directement connectées entre elles, est beaucoup plus prononcée que celle du clustering pondéré. Ceci montre que les aéroports de fort degré ont une tendance à former des groupes interconnectés avec un fort trafic. De plus, tandis que  $k_{nn}$  est essentiellement plat pour  $k \geq 10$ , le comportement de  $k_{nn}^w$  montre une nette croissance, c’est-à-dire une assortativité effective : les aéroports ayant de nombreuses connexions ont une plus grande affinité pour les autres grands aéroports, et la plus grande part du trafic réside sur ces liens.

### B.3 Modélisation

La plupart des approches précédentes pour la modélisation des réseaux complexes pondérés se sont concentrées sur des topologies de réseaux croissants pour lesquels les intensités étaient assignées une fois pour toutes aux liens [6, 13]. Ces mécanismes ne tenaient pas en compte l’importance des corrélations entre topologie et intensité des liens que l’étude empirique révèle, ni l’évolution dynamique des intensités. Par exemple, si un nouvel aéroport est créé, il va générer du trafic supplémentaire vers un certain nombre d’aéroports, dont les connexions déjà existantes vont en partie bénéficier : on s’attend à un renforcement des intensités de liens préexistants.

Nous avons donc proposé un modèle [14] qui tient compte de ce mécanisme en couplant croissance de la topologie du réseau et évolution de l’intensité des liens. Nous nous sommes volontairement restreints à un cas simple et analytiquement soluble, tout en analysant quelques variations possibles : ce modèle représente une illustration du mécanisme de couplage et peut

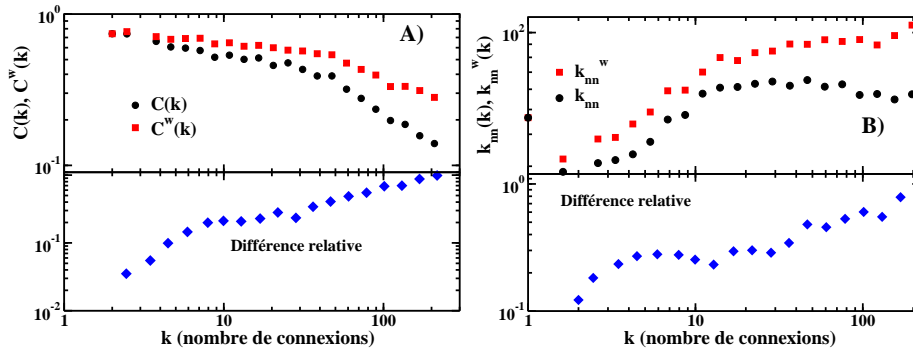


FIG. B.4 – Comparaison des corrélations topologiques et pondérées pour le réseau des connexions aériennes. A) Le clustering pondéré est nettement supérieur au clustering. B) A grand  $k$ ,  $k_{nn}$  est plat tandis que la prise en compte des intensités des connexions montre un caractère assortatif effectif plus prononcé.

servir de base à d'autres modèles plus détaillés et plus réalistes.

La dynamique du modèle est définie comme suit : à partir d'une source initiale de  $N_0$  sites, avec des liens de poids  $w_0$ , un nouveau sommet  $n$  est attaché à chaque pas de temps à  $m$  sites choisis selon la probabilité

$$\Pi_{n \rightarrow i} = \frac{s_i}{\sum_j s_j}, \quad (\text{B.5})$$

i.e. proportionnellement à la connectivité pondérée du site. Le poids du lien  $(n, i)$  créé est  $w_0$ . Cette loi relaxe la règle de l'attachement préférentiel selon le degré et pourrait s'appeler « les actifs deviennent encore plus actifs » ou « l'activité va à qui est actif » : de nouveaux sites se connectent préférentiellement aux sites ayant plus de poids. Ce mécanisme est vraisemblable dans de nombreux réseaux comme par exemple l'Internet (un nouveau fournisseur d'accès cherchera à se connecter à un fournisseur d'accès existant capable de gérer un important trafic), le réseau aérien, la Toile... Dans un réseau social également un nouvel arrivant cherchera à avoir des liens avec des personnes ayant une forte activité.

L'introduction du nouveau lien  $(n, i)$  va provoquer des variations des poids préexistants dans le réseau. Pour simplifier, nous considérons simplement l'évolution des poids entre  $i$  et ses voisins  $j \in \mathcal{V}(i)$ , selon la loi

$$w_{ij} \rightarrow w_{ij} + \Delta w_{ij} \quad (\text{B.6})$$

avec

$$\Delta w_{ij} = \delta_i \frac{w_{ij}}{s_i}. \quad (\text{B.7})$$

Cette règle, illustrée en figure B.5, considère donc que le nouveau lien de poids  $w_0$  induit une augmentation totale  $\delta_i$  du poids des liens  $(i, j)$ , de façon proportionnelle aux poids préexistants. L'augmentation totale de la connectivité pondérée de  $i$  vaut donc  $\delta_i + w_0$  (NB : on peut prendre  $w_0 = 1$  sans perte de généralité). Nous avons considéré aussi bien le cas d'augmentations fixées  $\delta_i = \delta = \text{const}$  que d'hétérogénéités entre les sites (e.g.  $\delta_i$  variables aléatoires). Il est également possible d'introduire des  $\delta_i$  dépendant des caractéristiques du site ( $k_i$  ou  $s_i$ ). Finalement, lorsque les poids ont été mis à jour, un nouveau site est introduit et le processus se répète.

Ce modèle dépend uniquement du paramètre  $\delta$ , c'est-à-dire de la capacité des sites à redistribuer le nouveau trafic introduit à chaque pas de temps. Pour  $\delta \approx 1$ , le nouveau trafic est

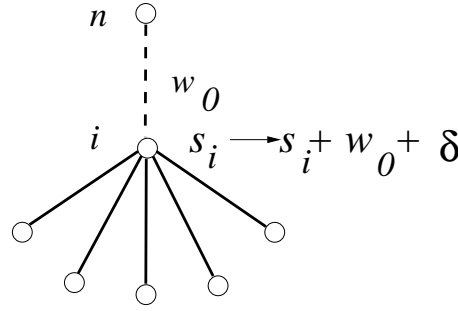


FIG. B.5 – Illustration du mécanisme de renforcement : un nouveau site  $n$  se connecte à  $i$  avec un poids  $w_0$ . Le poids total sur les liens préexistants est augmenté de  $\delta$ .

entièrement redistribué sur les liens préexistants. On peut penser que c'est typiquement le cas pour un réseau de type aérien, où le trafic en transit est important. Pour  $\delta < 1$ , les nouveaux liens influencent peu les anciens : ce peut être le cas par exemple de réseaux sociaux. Enfin, le cas extrême  $\delta > 1$  donne une sorte d'effet multiplicatif de forte augmentation des intensités.

Nous avons étudié ce modèle aussi bien analytiquement (par des techniques de champ moyen qui permettent d'écrire les équations d'évolution des différentes quantités) que numériquement (jusqu'à des tailles  $N = 10^5$ ). On montre par exemple que la connectivité et la connectivité pondérée d'un site  $i$  sont reliées à temps longs par

$$s_i \approx (2\delta + 1)k_i . \quad (\text{B.8})$$

Cette relation linéaire ( $\beta = 1$ ), de préfacteur différent de  $\langle w \rangle$ , montre l'existence de corrélations entre topologie et poids. Elle montre de plus que le mécanisme proposé permet de retrouver un attachement préférentiel dépendant du degré de manière effective : ceci souligne un mécanisme microscopique alternatif reproduisant l'attachement préférentiel.

Il est également possible de montrer que les distributions des intensités  $w_{ij}$ , des connectivités et des connectivités pondérées se comportent en loi de puissance (cf figure B.6) :

$$P(k) \sim k^{-\gamma} , P(s) \sim s^{-\gamma} ; \gamma = \frac{4\delta + 3}{2\delta + 1} \quad (\text{B.9})$$

$$P(w) \sim w^{-\alpha} ; \alpha = 2 + \frac{1}{\delta} . \quad (\text{B.10})$$

Le réseau obtenu est donc sans échelle, avec un exposant  $\gamma \in [2, 3]$  qui dépend du paramètre  $\delta$  : pour  $\delta = 0$  les liens ne sont pas affectés par l'introduction de nouveaux sites et on retrouve le modèle de Barabási-Albert. Pour de plus grandes valeurs de  $\delta$  la distribution devient plus large, avec  $\gamma \rightarrow 2$  lorsque  $\delta \rightarrow \infty$ . Le couplage de la croissance topologique aux poids génère des réseaux sans-échelle avec des exposants non-universels variant dans la gamme observée empiriquement dans de nombreux réseaux, et procure ainsi un mécanisme général d'obtention de diverses lois de puissance sans qu'il soit nécessaire de modifier de manière ad-hoc le mécanisme d'attachement préférentiel habituel.

## B.4 Conclusions et perspectives

La prise en compte de l'intensité des interactions entre les sites constituant les réseaux complexes permet d'en donner une vision plus complète. Ces interactions présentent elles-

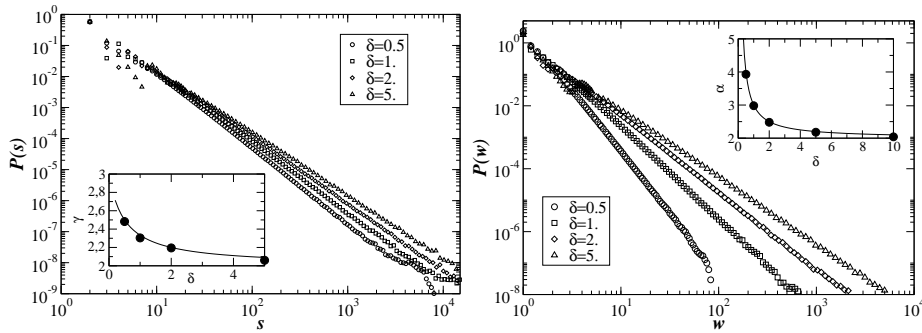


FIG. B.6 – Distributions de connectivité pondérée  $P(s)$  et des poids des liens  $P(w)$  pour le modèle présenté, pour différentes valeurs du paramètre  $\delta$ . Les inserts montrent l'accord entre l'exposant mesuré (symboles) et la prédiction théorique (lignes).

mêmes des comportements statistiques complexes, avec émergence de lois de puissance et de corrélations non-triviales avec la topologie. Ces corrélations peuvent être quantifiées par la définition de quantités adaptées comme le clustering pondéré. L'analyse de réseaux réels montre la nécessité, pour une modélisation adéquate, de la prise en compte des poids et du couplage entre topologie et poids. Nous avons donc introduit un modèle simple de réseau en croissance, pour lequel l'adjonction de nouveaux sites et liens détermine un renforcement des liens préexistants. Ce modèle reproduit un certain nombre de caractéristiques des réseaux réels et peut servir de base pour des modélisations plus fines et détaillées, en incluant des règles éventuellement plus compliquées [15, 16, 17], l'existence d'un caractère spatial du réseau [18], etc...



## Chapitre C

# Cartographie de réseaux complexes

### C.1 Introduction

C'est en grande partie grâce aux premières cartes du réseau Internet que s'est ouvert le champ d'étude des réseaux complexes : en effet, la mesure de la distribution de connectivités  $P(k)$  a montré que le paradigme habituel des graphes aléatoires n'était plus adapté, provoquant une explosion d'activité pour la modélisation et l'étude de réseaux hétérogènes [1, 2, 3].

#### C.1.1 Problématique

L'obtention de données fiables et précises concernant la topologie des grands réseaux d'informations (Internet, la Toile) reste un défi technique. Ceci est dû en particulier à leur nature dynamique et à l'absence d'un contrôle centralisé de leur évolution. Internet peut être représenté comme un graphe ayant pour nœuds les routeurs et pour liens les connexions physiques (câbles) entre ces routeurs. Pour obtenir des informations sur la topologie de ce graphe, la stratégie habituelle consiste à construire des cartes partielles à partir de différents points de vue, et à les combiner en une carte globale. Les cartes partielles sont obtenues par l'évaluation de chemins à partir de sites « sources » vers des sites « cibles », en utilisant des outils comme « `traceroute` ». Un certain nombre de groupes de recherche ont ainsi produit des cartes d'Internet [19] qui ont été utilisées pour une caractérisation statistique des propriétés du graphe  $\mathcal{G} = (V, E)$  obtenu (avec  $N = |V|$  sommets et  $|E|$  liens) :

- Internet est un graphe *dilué*, c'est-à-dire que le nombre de liens est très petit par rapport à celui d'un graphe complet ( $|E| \ll N(N-1)/2$ ) ;
- d'autre part, la distance moyenne entre deux sommets est très petite (propriété « petit-monde »), ce qui est essentiel pour un bon fonctionnement des communications dans un tel réseau ;
- la propriété la plus surprenante concerne la distribution des connectivités, qui suit approximativement une loi de puissance  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  avec  $2 \leq \gamma \leq 2.5$  [20], i.e. est une loi large. Cette caractéristique a généré une activité intense de modélisation [21, 22, 2, 23, 3].

Les cartes obtenues par l'utilisation d'outils comme `traceroute` sont incomplètes : en effet, les sondages sont effectués à partir d'un petit nombre de sources, ce qui implique que de nombreux liens ne sont pas explorés. Ainsi, des biais incontrôlés dus à l'échantillonnage peuvent être introduits et compromettre l'étude des propriétés d'Internet : le graphe échantillonné peut avoir *a priori* une topologie fortement différente de celle du graphe réel. En particulier, des distributions de connectivité larges peuvent même être obtenues dans des cas particuliers

d'échantillonnage de graphes aléatoires de type Erdős-Rényi [24, 25]. Ceci jette un doute sur la pertinence des propriétés observées d'Internet et motive une étude systématique de ce genre de problèmes à partir de graphes synthétiques : l'idée est de modéliser le processus de cartographie sur des réseaux dont on connaît la topologie, et de comparer les réseaux partiels obtenus par cartographie avec le graphe originel. On peut ainsi quantifier l'influence des biais introduits par la mesure. Nous avons réalisé une étude analytique au niveau champ-moyen de processus de type `traceroute`, complétée par une étude numérique dans le cas de réseaux homogènes et hétérogènes, ce qui nous a permis de relier la pertinence et l'exactitude des graphes échantillonnés à des propriétés topologiques fondamentales du graphe initial.

### C.1.2 Un modèle pour l'outil `traceroute`

Le dispositif utilisé typiquement consiste en un ensemble de sources actives qui lancent des commandes `traceroute` vers un ensemble de destinations ou cibles. Chaque `traceroute` envoie des paquets de données vers une cible et récolte des informations sur les sites traversés dans le chemin suivi, ce qui permet une découverte partielle du réseau. Le chemin exact suivi dépend de nombreux facteurs comme les politiques de routage et les accords commerciaux entre les fournisseurs d'accès Internet. En première approximation cependant, on peut considérer que `traceroute` permet de découvrir le chemin le plus court sur le graphe entre source et cible (figure C.1) <sup>1</sup>.

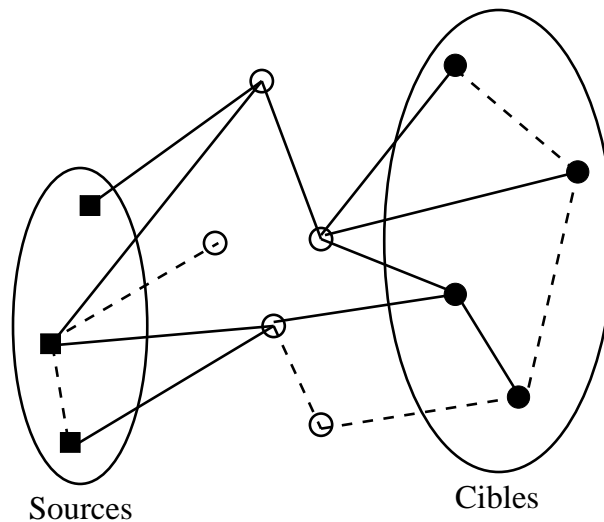


FIG. C.1 – Exemple schématique de la découverte partielle d'un graphe par l'outil `traceroute` : les carrés représentent les sources, les disques noirs les destinations. Les cercles sont les autres sites du réseau. Les liens montrés en traits pleins sont découverts, ceux en pointillés sont ignorés par le processus de cartographie qui parcourt les plus courts chemins entre sources et destinations.

Plus formellement, la découverte partielle simulée du réseau procède de la façon suivante : on considère un graphe dilué quelconque  $G = (V, E)$  de sommets  $V = \{1, 2 \dots, N\}$  et de liens  $E = \{i, j\}$ , sur lequel sont placés au hasard  $N_S$  sources et  $N_T$  destinations. Pour chaque

<sup>1</sup>Cette supposition n'est en fait pas tout à fait suffisante car il peut exister plusieurs plus courts chemins. On se placera alors dans le cas de la découverte d'un seul de ces chemins.

positionnement des sources et destinations, les plus courts chemins connectant chaque source à chaque destination sont calculés. Le graphe échantillonné  $\mathcal{G} = (V^*, E^*)$  est alors défini comme l'ensemble des sommets  $V^*$  ( $N^* = |V^*|$ ) et des liens  $E^*$  obtenus par l'union de ces plus courts chemins. Ce graphe est ainsi l'analogie des cartes d'Internet obtenues par l'échantillonnage `traceroute`.

Les cartographies d'Internet sont effectuées à partir d'un petit nombre de sources vers un grand nombre de destinations. De ce fait, les paramètres du modèle sont le *nombre* de sources  $N_S$  (densité  $\rho_S = N_S/N$ ), et la *densité* de cibles  $\rho_T = N_T/N$ . Une quantité pertinente est également

$$\epsilon = \frac{N_S N_T}{N} = \rho_T N_S, \quad (\text{C.1})$$

qui mesure la densité de sondes `traceroute` lancées dans le réseau, c'est-à-dire le trafic imposé au système par l'effort de cartographie.

## C.2 Analyse de champ moyen du processus de cartographie

L'analyse consiste à écrire pour chaque placement des sources et destinations, et pour chaque lien  $i - j$  du graphe réel, une fonction qui vaut 1 si ce lien fait partie de l'ensemble des chemins les plus courts entre sources et cibles, et 0 sinon. On peut ensuite moyenniser cette fonction sur l'ensemble des placements aléatoires des sources et cibles. Le pas crucial consiste en une approximation de champ moyen qui néglige les corrélations entre les différents chemins. Ceci permet d'arriver à une expression approchée pour la probabilité moyenne de découverte d'un lien lors du processus de cartographie :

$$\langle \pi_{i,j} \rangle \simeq 1 - \exp(-\rho_T \rho_S b_{i,j}), \quad (\text{C.2})$$

où  $\langle \dots \rangle$  effectue la moyenne sur les positions des sources et cibles, et  $b_{i,j}$  est la *centralité* (« betweenness centrality ») [26, 27], très étudiée dans les réseaux complexes. Sans entrer dans les détails, elle correspond au nombre de plus courts chemins dans le réseau passant par le lien  $i - j$ , lorsque l'on considère tous les plus courts chemins entre paires de sommets. Si chaque sommet envoie un message à tous les autres,  $b_{i,j}$  (qui varie entre 2 et  $N(N - 1)$ ) quantifie en fait le trafic passant par  $i - j$ .

La probabilité de découverte d'un lien dépend donc fortement de sa centralité. Par exemple, pour des liens de centralité minimale  $b_{i,j} = 2$ , on obtient  $\langle \pi_{i,j} \rangle \simeq 2\rho_T \rho_S$ , ce qui correspond au fait que ces liens ne seront découverts que si l'une des extrémités est une source et l'autre une destination. Pour des densités  $\rho_T$  et  $\rho_S$  finies, tous les liens auront donc une probabilité non négligeable d'être découverts. Ce n'est plus le cas pour un échantillonnage plus réaliste avec  $\rho_T$  fini mais un nombre de sources non extensif ( $N_S = \mathcal{O}(1)$ ) : on peut alors exprimer  $\langle \pi_{i,j} \rangle$  sous la forme

$$\langle \pi_{i,j} \rangle \simeq 1 - \exp(-\epsilon \overline{b_{i,j}}), \quad (\text{C.3})$$

où  $\overline{b_{i,j}} = N^{-1} b_{i,j}$  est limitée à l'intervalle  $[2N^{-1}, N - 1]$ . Dans la limite de grands réseaux  $N \rightarrow \infty$ , les liens à faible centralité ont une probabilité très faible d'être découverts  $\langle \pi_{i,j} \rangle \sim \mathcal{O}(N^{-1})$  pour tout  $\epsilon$  fini.

Cette analyse implique donc que dans des situations réalistes, le processus de découverte sera loin d'être complet, une grande part des liens de faible centralité étant ignorée. D'autre part, l'échantillonnage s'améliore bien sûr lorsque l'effort  $\epsilon$  est augmenté.

Une analyse similaire pour la probabilité de découverte des sommets, au même degré d'approximation, donne

$$\langle \pi_i \rangle \simeq 1 - (1 - \rho_S - \rho_T) \exp(-\rho_T \rho_S b_i), \quad (\text{C.4})$$

où  $b_i$  est la centralité du sommet  $i$ , avec  $b_i \in [0, N(N-1)]$  [26, 27] (et on notera  $\bar{b}_i = b_i/N$ ) : on a  $b_i = 0$  pour les feuilles du graphe (i.e. les sommets ayant un seul voisin), auquel cas on trouve  $\langle \pi_i \rangle \simeq \rho_S + \rho_T$  (ce genre de sommet ne peut être découvert que s'il s'agit d'une source ou d'une destination). On peut également donner une approximation simple pour le degré effectif découvert, noté  $k_i^*$ , d'un sommet  $i$  : chaque lien partant de  $i$  participe à ce degré proportionnellement à sa probabilité de découverte, d'où

$$\langle k_i^* \rangle = \sum_j (1 - \exp(-\epsilon \bar{b}_{i,j})) \simeq \epsilon \sum_j \bar{b}_{i,j}. \quad (\text{C.5})$$

Pour des liens de centralité petite,  $\epsilon \bar{b}_{i,j} \ll 1$ , et en utilisant la relation  $\sum_j b_{i,j} = 2(b_i + N - 1)$ , on en déduit

$$\langle k_i^* \rangle \simeq 2\epsilon + 2\epsilon \bar{b}_i. \quad (\text{C.6})$$

L'analyse effectuée montre que les propriétés effectivement mesurées du graphe dépendent fortement des paramètres de l'exploration et surtout de la topologie du graphe réel. La quantité la plus importante est la centralité, une quantité topologique non locale dont les caractéristiques dépendent fortement du type de graphe considéré. Des graphes de topologie très différentes seront donc échantillonnés de manières très différentes.

### C.3 Exploration numérique de graphes synthétiques

Afin de confirmer l'analyse précédente, nous avons réalisé des simulations numériques de l'exploration de graphes de deux types : i) *Graphes homogènes* (l'exemple typique utilisé est le modèle d'Erdős-Rényi [4]- ER) ; ii) *Graphes sans échelle* pour lesquels  $P(k)$  est une loi large, typiquement une loi de puissance  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  (l'exemple typique est le modèle de Barabási-Albert [5]- BA).

Le caractère « homogène » se réfère ici à l'existence d'une connectivité moyenne bien définie  $\bar{k}$  : les sommets ont tous une connectivité voisine de  $\bar{k}$ . Au contraire, une fraction non négligeable des sommets a une connectivité très grande devant  $\bar{k}$  pour les graphes hétérogènes « sans échelle » (la variance  $\bar{k}^2$ , qui quantifie les fluctuations de connectivité, diverge avec la taille du réseau).

L'analyse du paragraphe précédent, alliée à la connaissance des propriétés de la centralité dans ces deux types de graphes, permet de faire certaines prédictions sur le processus d'échantillonnage. En effet, dans les graphes utilisés, la centralité d'un sommet est fortement corrélée à sa connectivité <sup>2</sup>, et la distribution  $P(b)$  est similaire à la distribution des connectivités : piquée autour de sa valeur moyenne  $\bar{b}$  pour les graphes aléatoires, et large pour les graphes hétérogènes <sup>3</sup>.

<sup>2</sup>c'est assez général également dans les graphes réels, même si, dans des cas particuliers, certains sommets peu connectés peuvent avoir une grande centralité, cf par exemple [12].

<sup>3</sup>Pour les réseaux sans échelle, la centralité typique d'un site est reliée à son degré par  $\bar{b}(k) \sim k^\beta$ , où  $\beta$  dépend du modèle précis [28].

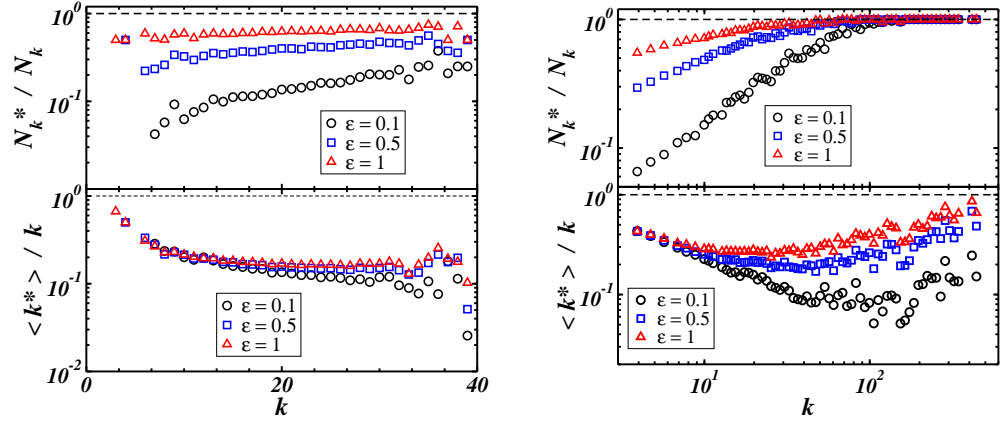


FIG. C.2 – Haut : Fraction  $N_k^*/N_k$  de sommets de degré  $k$  découverts, pour les graphes homogènes (à gauche) et hétérogènes (à droite) ; Bas : connectivité découverte  $\langle k^* \rangle / k$  en fonction de la connectivité réelle. On considère  $N_S = 2$  sources et différentes valeurs de l'effort  $\epsilon = N_S \rho_T$ .

Pour les réseaux homogènes, la plupart des sommets et liens auront une centralité voisine de la valeur moyenne. Un effort d'échantillonnage  $\epsilon \gg \max[\bar{b}^{-1}, \bar{b}_e^{-1}]$  permettra donc une découverte presque complète du réseau. Par contre, pour des valeurs plus petites de  $\epsilon$ , le graphe sera découvert seulement partiellement, et ceci de façon à peu près équivalente pour des sites de petit ou grand degré.

Au contraire, pour des réseaux très hétérogènes, le degré et donc la centralité varient sur plusieurs ordres de grandeur. Même pour des petites valeurs de  $\epsilon$ , les sommets de centralité assez grande seront donc découverts (si  $\overline{b(k)}\epsilon \gg 1$ ).

Ces prédictions sont vérifiées sur la figure C.2, où sont reportés les comportements de la fraction  $N_k^*/N_k$  de sommets de degré  $k$  découverts par le processus de cartographie, en fonction de  $k$ . Cette fraction augmente bien sûr lorsque  $\epsilon$  augmente. De plus, dans le cas de graphes homogènes, elle n'augmente que peu lorsque  $k$  croît, tandis que pour des graphes sans échelle, elle croît fortement pour saturer à un pour les sommets les plus connectés (« hubs »). La figure montre également que la fraction des liens découverts autour des sommets de degré  $k$ ,  $\langle k^* \rangle / k$ , reste uniformément faible pour les graphes homogènes, mais devient proche de 1 pour les hubs des graphes hétérogènes.

Comme déjà mentionné en introduction, une caractéristique importante des graphes échantillonnés réside dans la distribution de connectivité. La figure C.3 montre les distributions cumulées  $P_c(k^* > k)$  obtenues dans le cas de l'échantillonnage de graphes ER et BA, et comparées aux distributions réelles. Dans le cas de graphes homogènes, les distributions échantillonnées sont assez différentes de la vraie distribution, mais sont également loin d'être des lois larges. Il est en fait possible d'obtenir une loi large par échantillonnage d'un graphe homogène [25], mais ce biais important est obtenu seulement dans le cas  $N_S = 1$ , et la loi large comporte de toutes façons une coupure autour de  $\bar{k}$ . Afin d'obtenir une loi large sur plusieurs ordres de grandeur,  $\bar{k}$  doit donc être très grand, ce qui n'est pas réaliste pour les réseaux de type Internet.

Pour des graphes hétérogènes, les résultats précédents montrent que les sites de grande connectivité sont échantillonnés de manière efficace. On s'attend donc à ce que la queue de

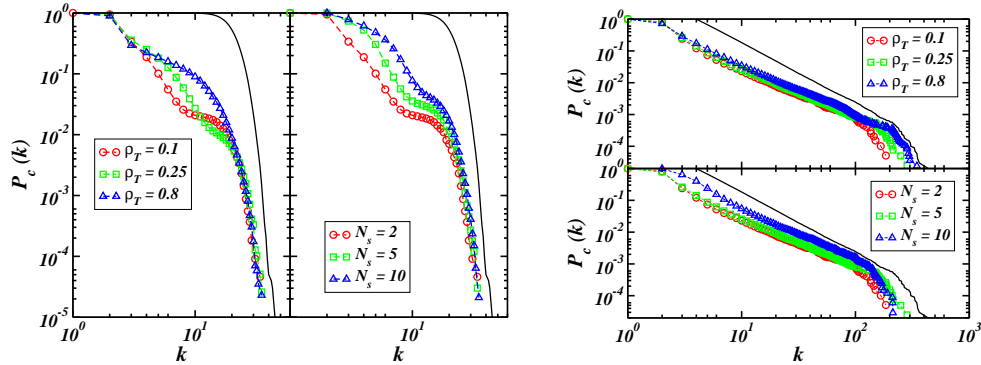


FIG. C.3 – Distribution de connectivité cumulée des graphes échantillonnés, pour des graphes sous-jacents homogènes (graphes de gauche) ou hétérogènes (droite), pour  $N_S = 2$  sources et différentes densités de cibles  $\rho_T$ , ou pour  $\rho_T = 0.1$  et différentes valeurs de  $N_S$ . Les courbes en traits pleins correspondent aux distributions des graphes réels.

la distribution de connectivité soit proche de celle de la distribution réelle, tandis que des déviations importantes peuvent être observées à faible  $k$ . C'est en effet ce qui est observé (figure C.3) : une loi large est obtenue même pour des efforts  $\epsilon$  assez faibles ; la distortion à faible degré peut par contre mener à des imprécisions sur la mesure des exposants [29].

## C.4 Conclusions et perspectives

L'analyse présentée permet de lier les processus de cartographie de réseaux inconnus à leurs propriétés topologiques. Elle montre en particulier que, pour obtenir un graphe échantillonné avec distribution de connectivité sans-échelle sur e.g.  $n$  ordres de grandeur, le graphe réel sous-jacent doit soit être réellement très hétérogène, soit être homogène avec un degré moyen  $\bar{k} \simeq 10^n$ , ce qui n'est pas réaliste. Il est donc très vraisemblable que les distributions larges mesurées pour Internet sont réellement une caractéristique de ce réseau complexe, même si les exposants mesurés peuvent être biaisés par le processus d'exploration. Les réseaux à distribution de connectivité large sont en fait plus « faciles » à découvrir que les réseaux homogènes, dans la mesure où les sites les plus connectés sont très facilement découverts.

Les processus d'exploration de type `traceroute`, bien que permettant donc de distinguer entre topologies homogènes et hétérogènes, donnent une vue très partielle du réseau réel. Il est donc important de comprendre comment optimiser ces mesures, par exemple par un placement non aléatoire des sources et destinations [30]. D'autre part, la contrepartie de la facile découverte des sites les mieux connectés est que le processus de cartographie les « visite » très souvent, générant un trafic indésirable. Nous étudions actuellement cet effet, ainsi que l'influence séparée des nombres de sources et destinations sur les caractéristiques du graphe échantillonné.

## Références bibliographiques

- [1] R. Albert et A.-L. Barabási, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 47 (2002).
- [2] S.N. Dorogovtsev et J.F.F. Mendes, *Evolution of networks : From biological nets to the Internet and WWW*, Oxford University Press, Oxford (2003).
- [3] R. Pastor-Satorras et A. Vespignani, *Evolution and structure of the Internet : A statistical physics approach* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [4] P. Erdős et P. Rényi, « On random graphs I, » *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* **5**, 17 (1960).
- [5] A.-L. Barabási et R. Albert, *Science* **286**, 509 (1999).
- [6] S.H. Yook, H. Jeong, A.-L. Barabási, Y. Tu, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5835 (2001).
- [7] A. Barrat, M. Barthélemy, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* **101** 3747 (2004).
- [8] D.J. Watts et S.H. Strogatz, *Nature* **393**, 440 (1998).
- [9] R. Pastor-Satorras, A. Vázquez et A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 258701 (2001).
- [10] M.E.J. Newman, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 208701 (2002).
- [11] M. E. J. Newman, *Phys. Rev. E* **64**, 016131 (2001) ; M. E. J. Newman, *Phys. Rev. E* **64**, 016132 (2001).
- [12] R. Guimerà , S. Mossa, A. Turtschi, et L.A.N. Amaral, cond-mat/0312535 (2003) ; R. Guimerà et L.A.N. Amaral, *Eur. Phys. J.* **38** 381 (2004).
- [13] D. Zheng, S. Trimper, B. Zheng et P.M. Hui, *Phys. Rev. E* **67**, 040102 (2003).
- [14] A. Barrat, M. Barthélemy, et A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.* **92** 228701 (2004).
- [15] R.V.R. Pandya, cond-mat/0406644 (2004).
- [16] Bo Hu, Xin-Yu Jiang, Jun-Feng Ding, Yan-Bo Xie, Bing-Hong Wang, cond-mat/0408125 (2004).
- [17] A. Barrat, M. Barthélemy, et A. Vespignani, *Lecture Notes in Computer Science* **3243** (2004) 56, et *Phys. Rev. E* (2004), condmat/0406238.
- [18] A. Barrat, M. Barthélemy, et A. Vespignani, en préparation (2004).
- [19] The National Laboratory for Applied Network Research (NLANR), sponsored by the National Science Foundation. (<http://moat.nlanr.net/>). The Cooperative Association for Internet Data Analysis (CAIDA), San Diego Supercomputer Center. (<http://www.caida.org/home/>). Topology project, Electric Engineering and Computer Science Department, University of Michigan (<http://topology.eecs.umich.edu/>). SCAN project, Information Sciences Institute (<http://www.isi.edu/div7/scan/>). Internet mapping project, Lucent Bell Labs (<http://www.cs.bell-labs.com/who/ches/map/>).
- [20] M. Faloutsos, P. Faloutsos, et C. Faloutsos, « On Power-law Relationships of the Internet Topology, » *ACM SIGCOMM '99, Comput. Commun. Rev.* **29**, 251–262 (1999). « Heuristics for Internet Map Discovery, » *Proc. of IEEE Infocom 2000, Volume 3*, 1371–1380, (2000). A. Broido et K. C. Claffy, « Internet topology : connectivity of IP graphs, » *San Diego Proceedings of SPIE International symposium on Convergence of IT and Communication*. Denver, CO. 2001 G. Caldarelli, R. Marchetti, et L. Pietronero, *Europhys. Lett.* **52**, 386 (2000). R. Pastor-Satorras, A. Vázquez, et A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.*

- 87**, 258701 (2001) ; A. Vázquez, R. Pastor-Satorras, et A. Vespignani, *Phys. Rev. E* **.65**, 066130 (2002). Q. Chen, H. Chang, R. Govindan, S. Jamin, S. J. Shenker, et W. Willinger, « The Origin of Power Laws in Internet Topologies Revisited, » Proceedings of IEEE Infocom 2002, New York, USA.
- [21] A. Medina et I. Matta, « BRITE : a flexible generator of Internet topologies, » Tech. Rep. BU-CS-TR-2000-005, Boston University, 2000.
- [22] C. Jin, Q. Chen, et S. Jamin, « INET : Internet topology generators, » Tech. Rep. CSE-TR-433-00, EECS Dept., University of Michigan, 2000.
- [23] P. Baldi, P. Frasca et P. Smyth, *Modeling the Internet and the Web : Probabilistic methods and algorithms*(Wiley, Chichester, 2003).
- [24] A. Lakhina, J. W. Byers, M. Crovella et P. Xie, « Sampling Biases in IP Topology Measurements, » Technical Report BUCS-TR-2002-021, Department of Computer Sciences, Boston University (2002).
- [25] A. Clauset et C. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 018701 (2005).
- [26] L. C. Freeman, *Sociometry* **40**, 35 (1977).
- [27] U. Brandes, *J. Math. Soc.* **25(2)**, 163 (2001).
- [28] M. Barthélemy, *Eur. Phys. J B* **38**, 163 (2004).
- [29] T. Petermann et P. De Los Rios, *Eur. Phys. J B* **38**, 201 (2004).
- [30] J.-L. Guillaume et M. Latapy, « Relevance of Massively Distributed Explorations of the Internet Topology : Simulation Results » , IEEE 24-th INFOCOM'05 (2005).