

M2 Systèmes dynamiques et statistique  
de la matière complexe  
Paris VI

# RAPPORT POUR L'EXAMEN DU COURS SYSTEMES DESORDONNES

## **Article choisi**

Titre : Effective dynamics and steady state of an Ising model submitted to tapping processes.

Auteurs : A. Prados et J. Javier Brey.

Références : Phys. Rev. E 66, 041308 (2002)

Laura MESSIO

Mars-Juin 2007

## Résumé

Dans l'article étudié, une analogie est faite entre la compaction d'un milieu granulaire lors de secousses verticales très espacées dans le temps et un modèle d'Ising 1D avec une dynamique particulière. La thermodynamique d'Edwards est retrouvée analytiquement pour ce modèle, dans la limite des faibles secousses : la probabilité des états suit une loi de type Boltzmann  $p(\alpha) = e^{-\beta H_\alpha}$ , où  $H_\alpha$  correspond au volume vide, et  $\beta$  à l'inverse d'une quantité appelée compactivité, dépendant de la force des chocs.

Des simulations en fortran ont été effectuées, retrouvant les résultats de l'article et les illustrant.

# 1 Introduction

La dynamique des systèmes granulaires est encore mal comprise, car ils ont parfois des propriétés solides, liquides ou gazeuses (voir (3)). Par exemple, la dynamique de la compaction, qui est le sujet de l'article étudié, continue de susciter des questions. Pendant la compaction, une colonne est remplie d'un matériau granulaire, et on lui applique des secousses dans la direction verticale, d'accélération maximale  $a$ , séparées par un moment de relaxation. Une loi phénoménologique d'évolution de la densité  $\rho$  en fonction du nombre de secousses subies  $t$  a été trouvée par Ben-Naim (4) :

$$\rho(\infty) - \rho(t) = A/\log(1 + t/\tau) \quad (1)$$

où  $\rho(\infty)$ ,  $A$  et  $\tau$  dépendent de  $a$ . La densité de l'état final décroît avec  $a$ . Ben-Naim a utilisé une analogie entre les vides et des places de parking... D'autres analogies ont été utilisées, notamment celles avec des systèmes 1D de spins Ising, dont voici deux exemples :

- Le one-dimensional one-spin facilitated model (1SFM) : un champ magnétique est appliqué et les spins excités correspondent aux trous. La secousse correspond à une période où adsorption et désorption sont permises, et la relaxation, à une période où seule l'adsorption est permise, seulement aux endroits où deux spins excités sont côte-à-côte (1).
- Le modèle étudié dans l'article choisi : le tapped-Ising model (TIM), que nous détaillerons dans la suite.

L'échelle d'énergie du problème est  $E = mgd$  ( $d$  est le diamètre d'un grain,  $m$  sa masse et  $g$  la gravité).  $E \ll k_B T$ , donc, les fluctuations thermiques sont trop faibles pour influencer le système. Pendant la relaxation suivant une secousse, son énergie décroît donc jusqu'à ce qu'il soit dans un minimum local (état métastable).

Edwards et son équipe ont supposé que l'on pouvait appliquer une analogie entre la thermodynamique et les systèmes granulaires (voir Tab. 1), ce qui a été vérifié dans la limite des faibles secousses, numériquement pour plusieurs modèles et analytiquement pour le modèle 1SFM (1). L'article étudié ici (6) vérifie analytiquement cette hypothèse dans le modèle TIM, toujours dans le cas de faibles secousses.

Thermodynamique	Milieu granulaire
Energie $E$	Volume (des trous) $V$
Etat	Etat métastable
Etat d'énergie minimale	Etat de volume minimal
Densité d'états de même énergie $g(E)$	Densité d'états métastables de même volume $g(V)$
Température $T = \partial E / \partial S$	Compacité $X = \partial V / \partial S$

TAB. 1 – Analogies entre les milieux granulaires et la statistique de Boltzmann.

Le modèle utilisé sera expliqué dans la section 2, puis nous étudierons la dynamique de la relaxation (section 3) avant d'étudier la dynamique effective du modèle et son état stationnaire (section 4). Quelques simulations ont été réalisées pour illustrer les équations trouvées dans l'article. Enfin, nous concluerons dans la section 5.

## 2 Présentation du modèle TIM

On considère un modèle unidimensionnel de  $N$  spins ( $\sigma = \{\sigma_i = \pm 1, i = 1..N\}$ ), avec des conditions aux limites périodiques ( $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ ), avec une interaction ferromagnétique plus proches voisins :

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (2)$$

Deux spins consécutifs forment un grain s'ils sont alignés, un trou sinon (voir Fig. 1). On associe donc à une configuration de spins  $\sigma$  une configuration de grains/trous  $m = \{m_i\}$  avec  $m_i = 1 - \delta_{\sigma_{i-1}; \sigma_i}$ . Sur un mur de domaine,  $m_i$  prend la valeur 1 (un trou) et ailleurs, la valeur 0 (un grain). L'énergie du système devient alors décomposable en une somme d'énergie  $H_i = -J + 2Jm_i$  ne dépendant plus que d'un site  $m_i$  au lieu de deux sites  $\sigma_i$  :

$$H = -JN + 2J \sum_{i=1}^N m_i = \sum_{i=1}^N H_i \quad (3)$$

On veut étudier la dynamique de ce système soumis à une série de secousses (modélisées par une inversion de chaque spin indépendamment des autres avec une probabilité  $p$ ) entre lesquelles le système a le temps de relaxer dans un état métastable.

Dans la section suivante, nous allons étudier la dynamique de la relaxation choisie, qui est une variante de celle de Glauber (2), à température nulle.

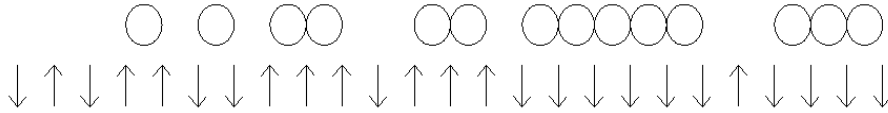


FIG. 1 – Exemple de correspondance entre une configuration de spins et de grains.

### 3 Solution analytique de la dynamique de relaxation

La relaxation mène à un état métastable. Pendant cette période, seuls les mouvements n'impliquant qu'un seul spin et diminuant strictement l'énergie sont autorisés (5). Un spin ne peut donc être retourné que s'il se trouve entre deux spins de sens opposé au sien : un trou ne peut être bouché que s'il touche un autre trou et un grain ne peut pas partir. Soit  $R_i$  la transformation qui change la valeur du site auquel elle s'applique (qui remplit un trou, enlève un grain, ou retourne un spin, selon que  $R_i$  s'applique à  $m$  ou  $\sigma$ ). Soit  $w(R_i\sigma|\sigma)$  le taux de transition de  $\sigma$  vers  $R_i\sigma$  :

$$w(R_i\sigma|\sigma) = \alpha m_i m_{i-1} = w(R_{i-1}R_i m|m) \quad (4)$$

où  $\alpha$  est un taux de transition constant.

Soit  $D_r(t) = \langle m_k \dots m_{k+r} \rangle_t$  le moments d'ordre  $r$  de  $m$ .  $D_0$  est la densité de trous. On cherche à connaître sa valeur quand  $t \rightarrow \infty$  lors d'une relaxation. A partir de l'équation maîtresse pour la probabilité d'être dans l'état  $m$  à l'instant  $t$  :  $p(m, t)$ , on peut déterminer un système d'équations d'évolution des  $D_r$ , qui nous permet de montrer que tous les  $D_r(t)$  tendent vers zéro à l'infini, sauf  $D_0$  qui dépend des conditions initiales :  $\{D_r(t=0), r = 0.. \infty\}$ . On obtient bien un état où tous les trous sont isolés aux grands temps. En effet, si l'on a deux trous côte-à-côte, l'inversion du spin du milieu fait baisser l'énergie : on n'est pas dans un état métastable.

On cherche  $D_0(t = \infty)$  pour un état initial d'équilibre des spins à la température  $T$ . D'après le Hamiltonien (Eq. 3), la probabilité d'avoir une configuration  $m$  avec le site  $i$  dans l'état  $m_i$  est :

$$p(m_i) = \frac{\sum_m |m_i\rangle e^{-\beta H(m)}}{\sum_m e^{-\beta H(m)}} = \frac{e^{-2J\beta m_i}}{1 + e^{-2J\beta}} \quad (5)$$

Soit  $a = \langle m_k \rangle_{T, eq}$  la densité de trous à l'équilibre à la température  $T$ . Si  $T$  est très grand, on a  $a = 1/2$  (état complètement désordonné), si  $T$  est très petit, on a  $a \sim 0$  (presque pas de trous). A partir de  $a$ , on peut calculer que  $D_r(t = 0, T) = a^{r+1}$ , ce qui donne :

$$D_0(\infty) = a e^{-2a} \quad (6)$$

Une simulation en fortran pour différents  $a$  redonne bien ce résultat (Fig. 2)

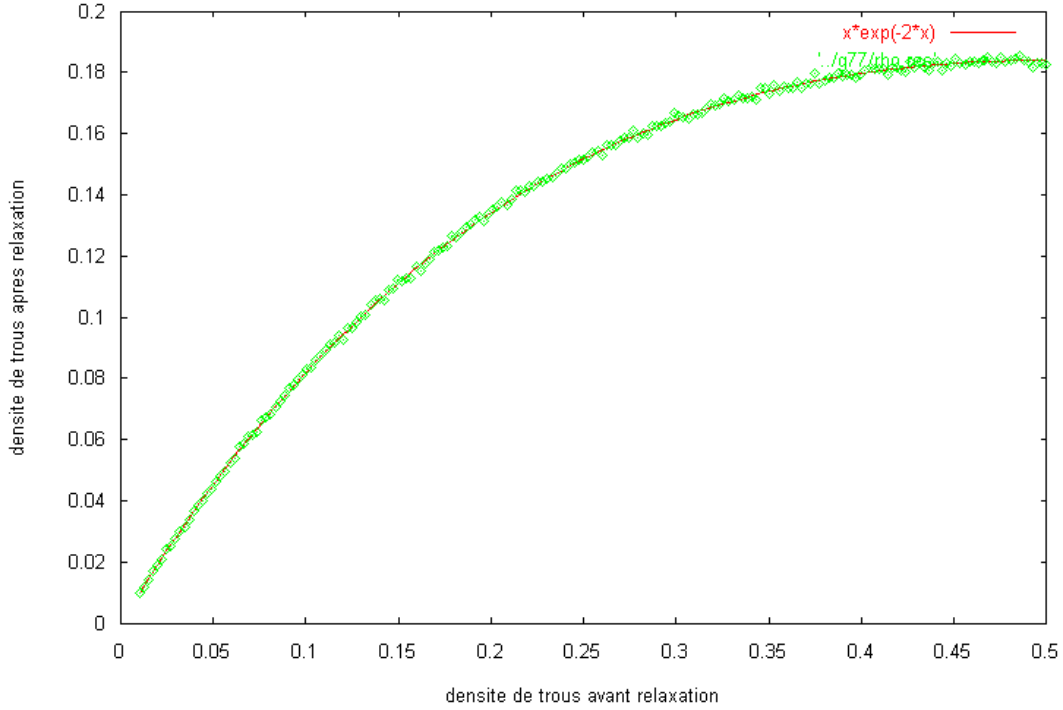


FIG. 2 – Densité de trous après relaxation en fonction de la densité initiale de trous avant relaxation. En vert : donnée d’une simulation pour 10000 spins, en rouge : courbe correspondant à l’équation 6.

## 4 Dynamique effective et état stationnaire

On part d’un état relaxé (instant  $t = 0$ ). On lui applique une secousse (c’est à dire que chaque spin est retourné avec une probabilité  $p$ ) et on le laisse relaxer à température nulle. On obtient alors l’état de l’instant  $t = 1$ , et ainsi de suite. On cherche à décrire l’évolution des états avec  $t$ . On prend  $p \ll 1$ , pour pouvoir développer en puissances de  $p$ . Ainsi, sur  $k$  spins consécutifs, on a une probabilité de  $p(1-p)^{k-1} \sim p$  qu’un spin donné soit retourné, de  $p^2(1-p)^{k-2} \sim p^2$  que deux spins donnés soient retournés, ...

On cherche d’abord les différentes modifications que l’inversion d’un seul spin peut apporter. L’inversion peut augmenter l’énergie ou la laisser stable, mais pas la baisser (sinon, ce mouvement aurait été effectué lors de la relaxation). Si elle l’augmente, au moins un spin sera retourné lors de la relaxation, puisque le retour du spin inversé à sa position d’origine baisse l’énergie. Donc, après la relaxation, l’énergie ne peut être qu’inférieure ou égale à sa valeur d’origine. Le nombre de trous final ne peut donc que diminuer si l’on ne considère que l’ordre  $p$ . Les seuls évènements possibles sont la diffusion d’un trou sur un site et la destruction d’une paire de trous (voir les premières lignes du tableau 2). L’état absorbant du système est l’état sans trous. Pour avoir des états stationnaires plus intéressants, on doit considérer l’ordre  $p^2$ .

Si l’on considère les inversions simultanées de deux spins, on observe de nouveaux évènements. Certains peuvent être obtenus par combinaison de deux évènements d’ordre  $p$ , mais pas la création d’une paire de trous (représentée à la fin du tableau 2). On a maintenant un processus de Markov irréductible (si l’on passe d’un état  $A$  à un état  $B$ , il existe une chaîne de transformations de probabilités non nulles menant de l’état  $B$  à l’état  $A$ ).

Sur la figure 3, on peut suivre la position des trous en fonction du temps pour différents  $p$  (programme fortran en annexe). On voit que pour les  $p$  très petits, on a une diffusion lente des trous, et des annihilations de paires. Lorsque  $p$  augmente, la diffusion devient plus rapide, et des

Etat initial	Etat après secousse et probabilité	Etat après relaxation et probabilité	Commentaires
---++--	---+--- $p$ ---+-- $p$	----- $2p$	Destruction d'une paire de trous
--+++	---++ $p$	---++ $p$	Diffusion sur 1 site
+++--	+++-- $p$	+++-- $p$	Diffusion sur 1 site
---++++--	---+-+-- $p$	---++++-- $p/3$ ----- $2p/3$	Pas de changements Destruction de 2 trous
--++++	--+-++ $p$	----++ $p/2$ --++++ $p/2$	Pas de changements Diffusion sur 2 sites
++++--	++-+-- $p$	++-+-- $p/2$ ++++-- $p/2$	Diffusion sur 2 sites Pas de changements
++++++	++-++ $p^2$	++-++ $p^2$	Création de 2 trous
+++++++	++-+-++ $p^2$	++-+-++ $p^2/3$ +++++++ $2p^2/3$	Création de 2 trous Pas de changements

TAB. 2 – Evénements élémentaires d'ordre 1 et 2 en  $p$  entre deux instants séparés par une secousse et une relaxation à température nulle.

paires de trous apparaissent. Pour  $p$  très grand, l'évolution devient beaucoup plus rapide. Sur la figure 4, on peut suivre la densité de grains en fonction du temps pour différents  $p$ . Pour  $p$  très petit, on retrouve bien une croissance monotone : pas de création de trous. Quand  $p$  augmente, la densité finale diminue, et le régime stationnaire est atteint plus rapidement.

A chaque  $p$  correspond un état stationnaire, caractérisé par les probabilités stationnaires  $P_s(m)$  associées à chaque état  $m$ , vérifiant le bilan détaillé :

$$W_{eff}(m|m')P_s(m') = W_{eff}(m'|m)P_s(m) \quad (7)$$

avec  $W_{eff}(m'|m)$  la probabilité de transition effective de  $m$  vers  $m'$ . Or,  $P_s(m)$  ne dépend que du nombre de trous de  $m$ . En effet, tous les états  $m^{(k)}$  possédant le même nombre de trous  $k$  sont reliés par des processus de diffusion qui sont isotropes. Par exemple, on a :

$$W_{eff}(001000|000100) = W_{eff}(000100|001000) \quad (8)$$

En utilisant le tableau 2 et l'équation 7, on obtient :

$$\frac{P_s(m^{(k+2)})}{P_s(m^{(k)})} = \frac{p}{2} \Rightarrow P_s(m^{(k)}) = \frac{1}{Z} \left(\frac{p}{2}\right)^{k/2} = \frac{1}{Z} e^{-k/X} \quad (9)$$

avec  $e^{-1/X} = \sqrt{p/2}$  ( $X$  est la compactivité d'Edwards),  $Z = \sum_{k=0; k \text{ pair}}^{N/2} (\Omega_k^{(N)} e^{-k/X})$  et  $\Omega_k^{(N)}$  le nombre d'états métastables avec  $k$  trous pour  $N$  sites.

On en déduit la densité stationnaire de trous  $D_0^s$

$$D_0^s = \langle k \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial (1/X)} = \frac{(1 + 4e^{-1/X})^{1/2} - 1}{2(1 + 4e^{-1/X})^{1/2}} \quad (10)$$

Sur la figure 5 sont présentés les résultats d'une simulation donnant la densité stationnaire de trous en fonction de  $p$ , ainsi que la courbe de l'équation 10. Les deux courbes correspondent bien pour  $p \ll 1$ .

A partir de cette fonction de partition et avec les analogies du tableau 1, on peut construire une entropie  $S$  et une énergie libre  $\Phi$  :

$$S = -\sum_m P_s(m) \ln(P_s(m)) = \frac{N}{Z} D_0^s + \ln(Z) \quad \Phi = D_0^s - X \frac{S}{N} \quad (11)$$

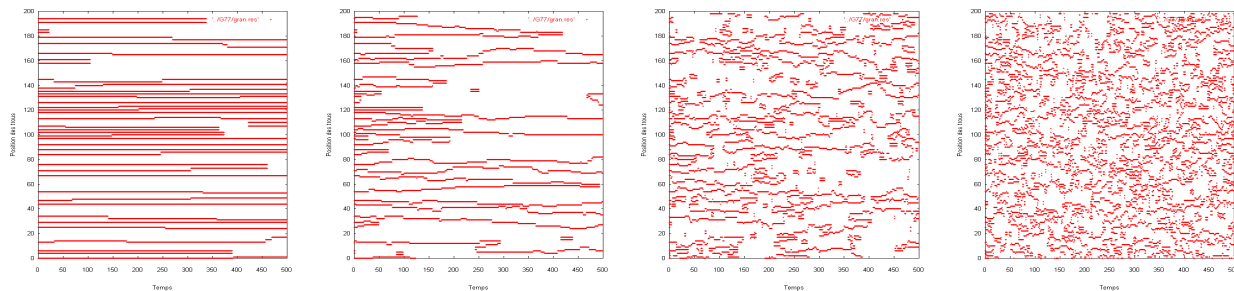


FIG. 3 – Position des trous en fonction du temps pour différents  $p$  (de gauche à droite ,  $p = 0.001$ ;  $p = 0.01$ ;  $p = 0.05$ ;  $p = 0.1$ ). Pour  $p$  très petit, l’approximation au premier ordre est valable : il n’y a que de la diffusion lente de trous et l’annihilation de deux trous proches. Quand  $p$  grandit, des effets du deuxième ordre apparaissent : création de paires de trous. La diffusion est plus rapide. Enfin, pour un  $p$  très élevé, on a des effets d’ordre élevé et l’évolution devient beaucoup plus compliquée.

**Corrélations spatiales :** Si on considère deux entités dans le système :

- $A$  : deux sites consécutifs avec un grain sur le premier, un trou sur le deuxième,
- $B$  : un site rempli d’un grain,

Les agencements de ces entités comportant les mêmes nombres  $N_A$  et  $N_B$  d’entités  $A$  et  $B$  sont équiprobables. Or, la relation entre ces deux nombres se trouve facilement à partir de la densité de trous  $D_0^s$ . On peut donc trouver toutes les corrélations spatiales à partir de  $D_0^s$ .

## 5 Conclusion

On a étudié la dynamique d’un milieu granulaire simplifié, réduit à un modèle unidimensionnel de spins Ising. Une marche de temps correspond à l’application d’une secousse (retournement des spins avec une probabilité  $p$ ) puis à une relaxation (un seul spin peut changer à la fois, et seulement si l’énergie diminue strictement). Ce modèle permet de calculer analytiquement de nombreuses quantités, dans la limite  $p \ll 1$ . On retrouve ainsi la thermodynamique des milieux granulaires d’Edwards. Il est intéressant de retrouver cette thermodynamique dans un modèle qui n’a *a priori* aucune raison d’avoir le même comportement qu’un milieu granulaire. Mais malheureusement, ce point commun entre les deux modèles (spins et grain) ne permet pas de comprendre la physique du phénomène de compaction (frottement des grains,... ).

## Références

- [1] J. Javier Brey, A. Prados, and B. Sanchez-Rey. Thermodynamic description in a simple model for granular compaction. *Physica A*, 275 :310, 2000.
- [2] R. J. Glauber. Time-dependent statistics of the ising model. *J. Math. Phys.*, 4 :294, 1963.
- [3] Heinrich M. Jaeger, Sidney R. Nagel, and Robert P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, 68(4) :1259–1273, Oct 1996.
- [4] Leo P. Kadanoff. Built upon sand : Theoretical ideas inspired by granular flows. *Rev. Mod. Phys.*, 71(1) :435–444, Jan 1999.
- [5] A Lefèvre and D S Dean. Tapping thermodynamics of the one-dimensional ising model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 34(14) :L213–L220, 2001.
- [6] A. Prados and J. Javier Brey. Effective dynamics and steady state of an ising model submitted to tapping processes. *Phys. Rev. E*, 66(4) :041308, Oct 2002.

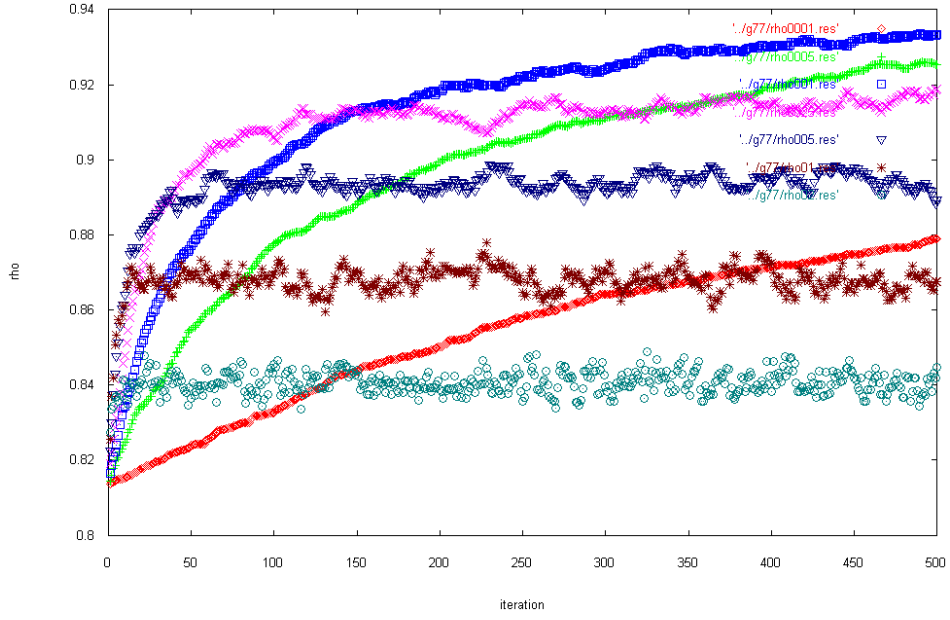


FIG. 4 – Evolution de la densité de grains en fonction du temps (nombre d’itérations choc+relaxation), pour différents  $p$  (rouge :  $p = 0.001$ , vert :  $p = 0.005$ , bleu :  $p = 0.01$ , magenta :  $p = 0.025$ , bleu foncé :  $p = 0.05$ , marron :  $p = 0.1$  et cyan :  $p = 0.5$ ). Plus  $p$  est grand, plus le régime transitoire est court, plus la densité stationnaire de grains est faible.

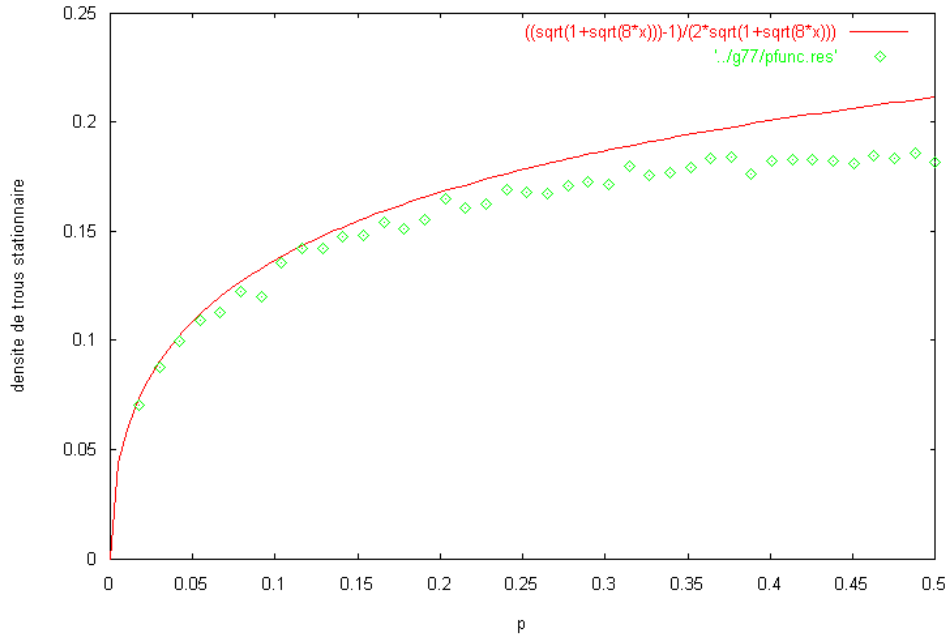


FIG. 5 – Evolution de la densité stationnaire de trous en fonction de  $p$ . Plus  $p$  est petit, moins le système gagne d’énergie après une secousse, plus il a de chances de finir dans un état métastable d’énergie plus faible.