

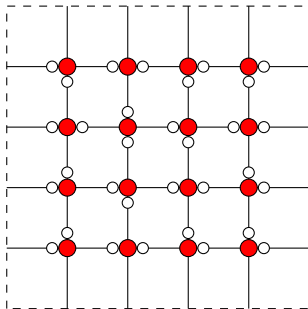
Calcul de l'entropie résiduelle de la glace carrée

Silvère Gangloff

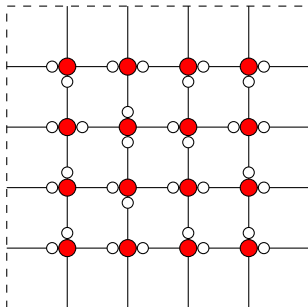
LIP, ENS Lyon

October 4, 2018

États stables de la glace carrée [Pauling-Lieb]:

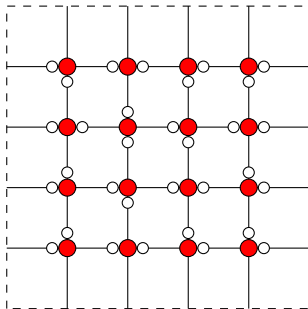


États stables de la glace carrée [Pauling-Lieb]:



E.H. Lieb, *Residual entropy of square ice*, Physical Review, 1967.

États stables de la glace carrée [Pauling-Lieb]:



E.H. Lieb, *Residual entropy of square ice*, Physical Review, 1967.

Valeur de l'entropie?

Motivations:

Lieb: confirmation du modèle de la glace.

Motivations:

Lieb: confirmation du modèle de la glace.

MC2: méthodes de calcul de l'entropie des SFT multidimensionnels.

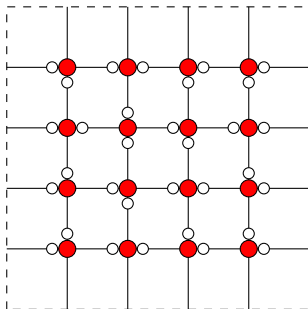
Motivations:

Lieb: confirmation du modèle de la glace.

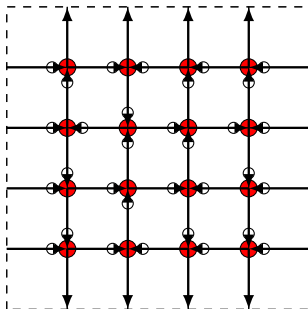
MC2: méthodes de calcul de l'entropie des SFT multidimensionnels.

But de l'exposé: 'calcul' de la l'entropie de la glace.

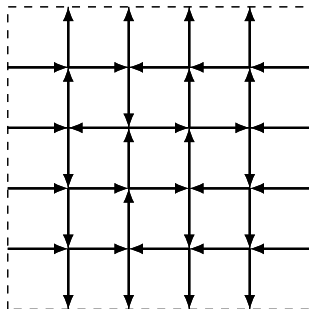
Représentation par tuiles [Folklore]:



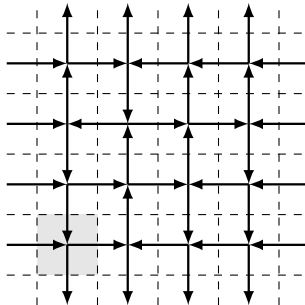
Représentation par tuiles [Folklore]:



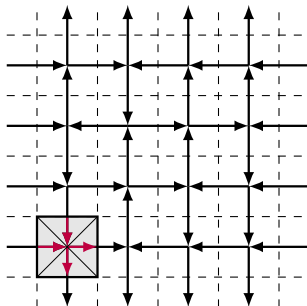
Représentation par tuiles [Folklore]:



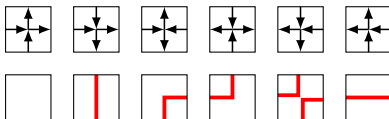
Représentation par tuiles [Folklore]:



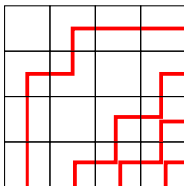
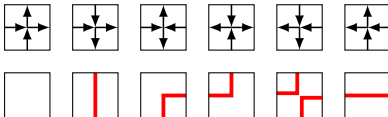
Représentation par tuiles [Folklore]:



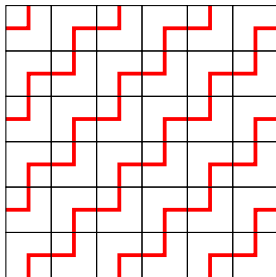
Représentation par courbes discrètes [Folklore]:



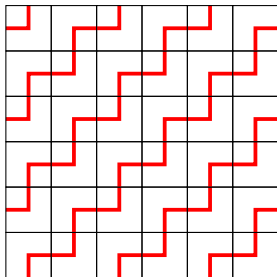
Représentation par courbes discrètes [Folklore]:



Condition toroïdale [Lieb, Preuve Duminil-Copin et al.]:

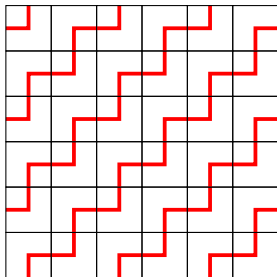


Condition toroïdale [Lieb, Preuve Duminil-Copin et al.]:



H. Duminil-Copin et al., *Discontinuity of the phase transition for the planar random-cluster and Potts models with $q > 4$.*

Condition toroïdale [Lieb, Preuve Duminil-Copin et al.]:

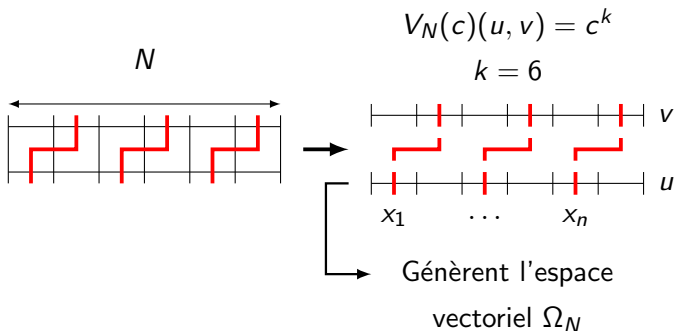


H. Duminil-Copin et al., *Discontinuity of the phase transition for the planar random-cluster and Potts models with $q > 4$.*

Suffisant: compter les motifs valides sur un tore

Matrice de transfert [Lieb]:

Matrice de transfert [Lieb]:



$$\Omega_N = \bigoplus_{k=0}^N \Omega_N^{(k)}, \quad k : \text{nombre de courbes}$$

Entropie 'lestée' [Lieb]:

Entropie 'lestée' [Lieb]:

$$h_c = \lim_N \lim_M \frac{\log(Tr(V_N(c))^M)}{M}$$

Entropie 'lestée' [Lieb]:

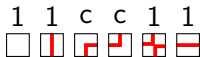
$$h_c = \lim_N \lim_M \frac{\log(Tr(V_N(c))^M)}{M}$$

Fonction de partition: $c > 0$:

Entropie 'lestée' [Lieb]:

$$h_c = \lim_N \lim_M \frac{\log(Tr(V_N(c))^M)}{M}$$

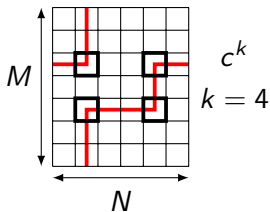
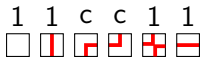
Fonction de partition: $c > 0$:



Entropie 'lestée' [Lieb]:

$$h_c = \lim_N \lim_M \frac{\log(Tr(V_N(c))^M)}{M}$$

Fonction de partition: $c > 0$:



$$P_{N,M}(c) = \sum_{\text{motifs}} c^{k(\text{motif})}$$

$$P_{N,M}(c) = Tr(V_N(c))^M$$

$$h_1 = h_{top}$$

Valeur propre maximale [classique]:

Valeur propre maximale [classique]:

$$h_c = \lim_M \lim_N \frac{\log(\text{Tr}(V_N(c))^M))}{N}$$

Valeur propre maximale [classique]:

$$h_c = \lim_M \lim_N \frac{\log(\text{Tr}(V_N(c))^M))}{N}$$

$$h_c = \lim_M \lim_N \frac{\log(\sum_k \lambda_k(V_N(c))^M))}{N}$$

Valeur propre maximale [classique]:

$$h_c = \lim_M \lim_N \frac{\log(\text{Tr}(V_N(c))^M))}{N}$$

$$h_c = \lim_M \lim_N \frac{\log(\sum_k \lambda_k(V_N(c))^M))}{N}$$

$$h_c = \lim_N \frac{\log(\lambda_{\max}(V_N(c)))}{N}$$

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

Preuve:

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

Preuve:

Pour tous $c, c' > 0$, $V_N(c)$, $V_N(c')$ commutent.

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

Preuve:

Pour tous $c, c' > 0$, $V_N(c)$, $V_N(c')$ commutent.

Donc $\exists P$ inversible t.q. $\forall c > 0$,

$$V_N(c) = P \begin{pmatrix} \lambda_1(c) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_{2N}(c) \end{pmatrix} P^{-1}$$

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

Preuve:

Pour tous $c, c' > 0$, $V_N(c)$, $V_N(c')$ commutent.

Donc $\exists P$ inversible t.q. $\forall c > 0$,

$$V_N(c) = P \begin{pmatrix} \lambda_1(c) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_{2N}(c) \end{pmatrix} P^{-1}$$

Perron-Frobenius [matrices symétriques irréductibles]: o.p.s. que $\lambda_1(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$ pour tout $c > 0$.

La fonction $c > 0 \mapsto \lambda_{\max}(V_N(c))$ est un **polynôme [inspiré de Baxter]**

Preuve:

Pour tous $c, c' > 0$, $V_N(c)$, $V_N(c')$ commutent.

Donc $\exists P$ inversible t.q. $\forall c > 0$,

$$V_N(c) = P \begin{pmatrix} \lambda_1(c) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_{2N}(c) \end{pmatrix} P^{-1}$$

Perron-Frobenius [matrices symétriques irréductibles]: o.p.s. que $\lambda_1(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$ pour tout $c > 0$.

T.J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, 1982.

Bethe ansatz [classique φ stat.]:

Bethe ansatz [classique φ stat.]: Si $(p_j)_{j=1}^n \in (-\pi, \pi)^n$ telle que:

Bethe ansatz [classique φ stat.]: Si $(p_j)_{j=1}^n \in (-\pi, \pi)^n$ telle que:

$$Np_j = 2\pi \left(j - \frac{n+1}{2} \right) - \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$$

Bethe ansatz [classique φ stat.]: Si $(p_j)_{j=1}^n \in (-\pi, \pi)^n$ telle que:

$$Np_j = 2\pi \left(j - \frac{n+1}{2} \right) - \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$$

où $\Theta(0,0)$,

$$e^{-i\Theta(x,y)} = e^{i(x-y)} \frac{e^{ix} + e^{-iy} - 2\Delta}{e^{-ix} + e^{-iy} - 2\Delta},$$

et $\Delta = (2 - c^2)/2$,

$$\varphi_n(c)(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\sigma \in \Sigma_n} A_\sigma \prod_{k=1}^n \exp(ip_{\sigma(k)} x_k)$$

$$\varphi_n(c)(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\sigma \in \Sigma_n} A_\sigma \prod_{k=1}^n \exp(ip_{\sigma(k)} x_k)$$

$$\Lambda_n(c) = \prod_{j=1}^n \left(1 + \frac{c^2 e^{ip_j}}{1 - e^{ip_j}} \right) + \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{c^2}{1 - e^{ip_j}} \right)$$

$$\varphi_n(c)(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\sigma \in \Sigma_n} A_\sigma \prod_{k=1}^n \exp(ip_{\sigma(k)} x_k)$$

$$\Lambda_n(c) = \prod_{j=1}^n \left(1 + \frac{c^2 e^{ip_j}}{1 - e^{ip_j}} \right) + \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{c^2}{1 - e^{ip_j}} \right)$$

alors

$$V_N(c)\varphi_n(c) = \Lambda_n(c) \cdot \varphi_n(c)$$

$$\varphi_n(c)(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\sigma \in \Sigma_n} A_\sigma \prod_{k=1}^n \exp(ip_{\sigma(k)} x_k)$$

$$\Lambda_n(c) = \prod_{j=1}^n \left(1 + \frac{c^2 e^{ip_j}}{1 - e^{ip_j}} \right) + \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{c^2}{1 - e^{ip_j}} \right)$$

alors

$$V_N(c)\varphi_n(c) = \Lambda_n(c) \cdot \varphi_n(c)$$

Remarque: $\Lambda_n(c) \neq 0?$, $\varphi_n(c) \neq 0?$

Identification asymptotique [Yang², Duminil-Copin et al.]:

Identification asymptotique [Yang², Duminil-Copin et al.]:

$$V_N(\infty) \equiv \lim_c \frac{1}{c^{N/2}} V_N(c).$$

$$V_N(\infty) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ 0 & & 0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Identification asymptotique [Yang², Duminil-Copin et al.]:

$$V_N(\infty) \equiv \lim_c \frac{1}{c^{N/2}} V_N(c).$$

$$V_N(\infty) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ 0 & & 0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



Identification asymptotique [Yang², Duminil-Copin et al.]:

$$V_N(\infty) \equiv \lim_c \frac{1}{c^{N/2}} V_N(c).$$

$$V_N(\infty) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ 0 & & 0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



Donc $\lambda_{\max}(V_N(\infty)) = 1$

$$\frac{1}{c^{N/2}} \Lambda_{N/2}(c) \rightarrow 1$$

$$\frac{1}{c^{N/2}} \Lambda_{N/2}(c) \rightarrow 1$$

Au voisinage de $+\infty$:

$$\Lambda_{N/2}(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$$

$$\frac{1}{c^{N/2}} \Lambda_{N/2}(c) \rightarrow 1$$

Au voisinage de $+\infty$:

$$\Lambda_{N/2}(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$$

Hypothèse: $\exists c \mapsto (p_j(c))_j$ analytique.

$$\frac{1}{c^{N/2}} \Lambda_{N/2}(c) \rightarrow 1$$

Au voisinage de $+\infty$:

$$\Lambda_{N/2}(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$$

Hypothèse: $\exists c \mapsto (p_j(c))_j$ analytique.

$$\Lambda_{N/2} \equiv \lambda_{\max}(V_N(c))$$

$$\frac{1}{c^{N/2}} \Lambda_{N/2}(c) \rightarrow 1$$

Au voisinage de $+\infty$:

$$\Lambda_{N/2}(c) = \lambda_{\max}(V_N(c))$$

Hypothèse: $\exists c \mapsto (p_j(c))_j$ analytique.

$$\Lambda_{N/2} \equiv \lambda_{\max}(V_N(c))$$

C.N. Yang & C.P Yang, *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I.*, Physical Review, 1966.

Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Argument: point fixe sur: $(p_j)_j \mapsto j : \frac{2\pi}{N} \left(j - \frac{n+1}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$

Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Argument: point fixe sur: $(p_j)_j \mapsto j : \frac{2\pi}{N} \left(j - \frac{n+1}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$
à partir du point fixe sur:

$$\rho \mapsto x : \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Argument: point fixe sur: $(p_j)_j \mapsto j : \frac{2\pi}{N} \left(j - \frac{n+1}{2}\right) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$
à partir du point fixe sur:

$$\rho \mapsto x : \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

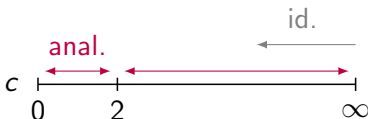
après changement de variable.

Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Argument: point fixe sur: $(p_j)_j \mapsto j : \frac{2\pi}{N} (j - \frac{n+1}{2}) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$
à partir du point fixe sur:

$$\rho \mapsto x : \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

après changement de variable.

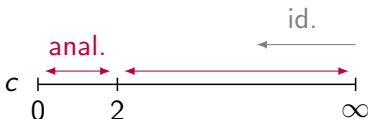


Existence de $c \mapsto (p_j(c))_j$ [Yang², Duminil-Copin et al. pour $c > 2$]:

Argument: point fixe sur: $(p_j)_j \mapsto j : \frac{2\pi}{N} (j - \frac{n+1}{2}) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n \Theta(p_i, p_j)$
à partir du point fixe sur:

$$\rho \mapsto x : \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

après changement de variable.



Problème: identification $c > 2$, on veut $c = 1$.

Argument de Yang²:

Argument de Yang²:

Identification en $c = \sqrt{2}$.

Argument de Yang²:

Identification en $c = \sqrt{2}$.

" Now all the eigenstates of H are known. It is easily seen that the solution above is the ground state [1].", Yang²

Argument de Yang²:

Identification en $c = \sqrt{2}$.

" Now all the eigenstates of H are known. It is easily seen that the solution above is the ground state [1].", Yang²

[1] E.H. Lieb, T. Shultz, D. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, Annals of Physics, 1961.

Calcul de ρ [Yang²]:

Calcul de ρ [Yang²]:

On a " $(p_j) \rightarrow \rho$ " t.q.

Calcul de ρ [Yang²]:

On a " $(p_j) \rightarrow \rho$ " t.q.

$$2\pi\rho(x) = 1 + \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Calcul de ρ [Yang²]:

On a $(p_j) \rightarrow \rho$ t.q.

$$2\pi\rho(x) = 1 + \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Changement de var. $x = x(\alpha)$, Fourier:

Calcul de ρ [Yang²]:

On a $''(p_j) \rightarrow \rho''$ t.q.

$$2\pi\rho(x) = 1 + \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Changement de var. $x = x(\alpha)$, Fourier:

$$\rho(x) = \frac{\pi}{2\mu \cosh(\pi\alpha/2\mu)}$$

Calcul de ρ [Yang²]:

On a $''(p_j) \rightarrow \rho''$ t.q.

$$2\pi\rho(x) = 1 + \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Changement de var. $x = x(\alpha)$, Fourier:

$$\rho(x) = \frac{\pi}{2\mu \cosh(\pi\alpha/2\mu)}$$

où $\Delta = -\cos(\mu)$.

Calcul de ρ [Yang²]:

On a $(p_j) \rightarrow \rho$ t.q.

$$2\pi\rho(x) = 1 + \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

Changement de var. $x = x(\alpha)$, Fourier:

$$\rho(x) = \frac{\pi}{2\mu \cosh(\pi\alpha/2\mu)}$$

où $\Delta = -\cos(\mu)$.

C.N. Yang & C.P Yang, *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. II.*, Physical Review, 1966.

On a $h_1 = \lim_N \frac{\Lambda_{N/2}(1)}{N},$

On a $h_1 = \lim_N \frac{\Lambda_{N/2}(1)}{N}$,

$$h_1 = -\lim_N \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \log(2(1 - \cos(p_j))) = -\int_{-\pi}^{\pi} \log(2 - 2 \cos(x)) \rho(x) dx.$$

On a $h_1 = \lim_N \frac{\Lambda_{N/2}(1)}{N}$,

$$h_1 = -\lim_N \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \log(2(1 - \cos(p_j))) = -\int_{-\pi}^{\pi} \log(2 - 2\cos(x))\rho(x)dx.$$

$$h_1 = -3\frac{\pi}{16} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh(3x/4)} \log\left(1 - \frac{3}{1 + 2\cosh(x)}\right).$$

On a $h_1 = \lim_N \frac{\Lambda_{N/2}(1)}{N}$,

$$h_1 = -\lim_N \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \log(2(1 - \cos(p_j))) = -\int_{-\pi}^{\pi} \log(2 - 2 \cos(x)) \rho(x) dx.$$

$$h_1 = -3 \frac{\pi}{16} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh(3x/4)} \log \left(1 - \frac{3}{1 + 2 \cosh(x)} \right).$$

Intégrales contours dans \mathbb{C} :

$$h_1 = (4/3)^{3/2}$$

Commentaires:

- ① Extensions: eight-vertex model [Baxter], dimer model [Lieb]..



Commentaires:

- ① Extensions: eight-vertex model [Baxter], dimer model [Lieb]..



- ② Hard core model ? La glace cubique ?



Commentaires:

- ① Extensions: eight-vertex model [Baxter], dimer model [Lieb]..



- ② Hard core model ? La glace cubique ?



- ③ Perron-Frobenius: simplification de l'ansatz ?

"If all eigenvectors are given by the Bethe ansatz and span the 2^N dimensional vectorial space (which is the case) [...]", Baxter.

Quelques idées:

- ① Preuve de l'identification en $c = \sqrt{2}$?

Quelques idées:

- ① Preuve de l'identification en $c = \sqrt{2}$?
- ② Raisonnement par extensions des carrés de taille N en $N + 1$?

Quelques idées:

- ① Preuve de l'identification en $c = \sqrt{2}$?
- ② Raisonnement par extensions des carrés de taille N en $N + 1$?
- ③ Entropie du Kari-Culik ?

Quelques idées:

- ① Preuve de l'identification en $c = \sqrt{2}$?
- ② Raisonnement par extensions des carrés de taille N en $N + 1$?
- ③ Entropie du Kari-Culik ?
- ④ Transformation d'entropie par opérateurs ?

