

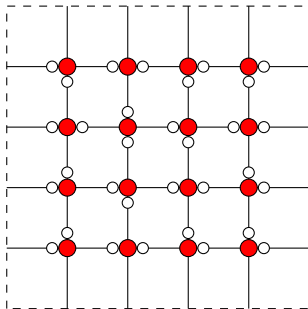
# Calcul de l'entropie résiduelle de la glace carrée

Silvère Gangloff

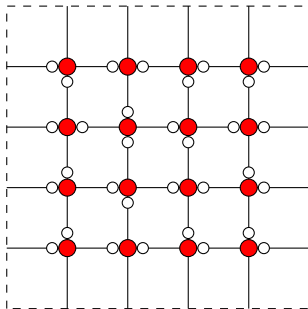
LIP, ENS Lyon

October 4, 2018

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

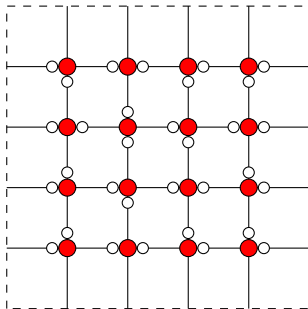


## États stables de la glace carrée [Pauling-Lieb]:



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.

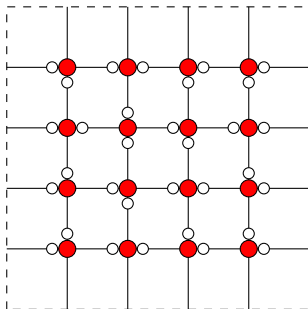
## **Motivations:**

Lieb: confirmation du modèle de la glace.

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

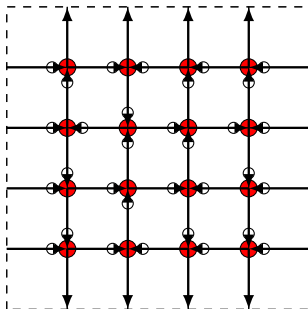
But de l'exposé: 'calcul' de la l'entropie de la glace.

## Représentation par tuiles [Folklore]:

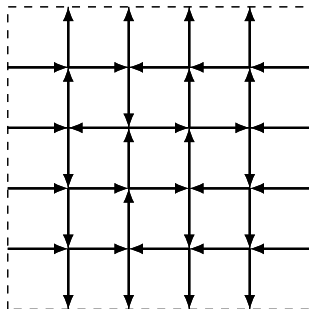




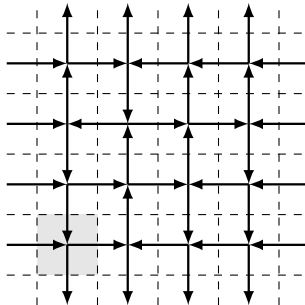
## Représentation par tuiles [Folklore]:



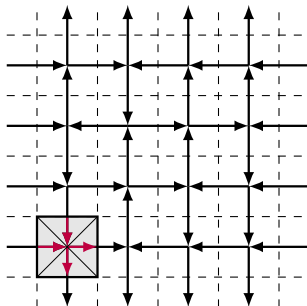
## Représentation par tuiles [Folklore]:



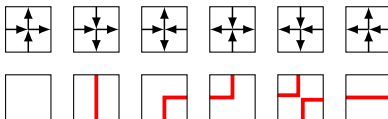
## Représentation par tuiles [Folklore]:



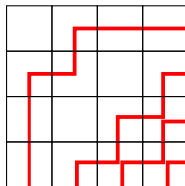
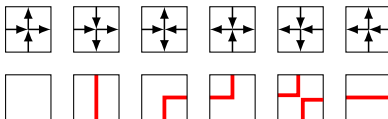
## Représentation par tuiles [Folklore]:



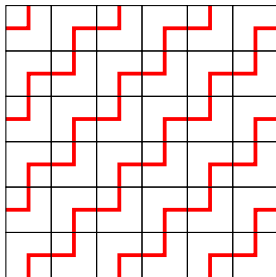
## Représentation par courbes discrètes [Folklore]:



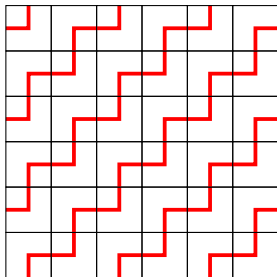
## Représentation par courbes discrètes [Folklore]:



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



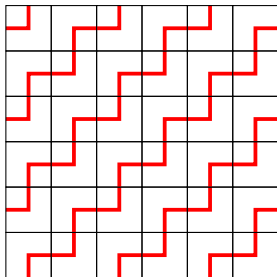
## Condition toroïdale [Lieb, Preuve Duminil-Copin et al.]:



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.]:

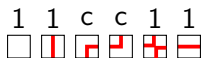


H. Duminil-Copin et al., *Discontinuity of the phase transition for the planar random-cluster and Potts models with  $q > 4$ .*

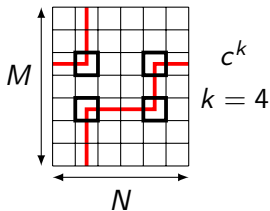
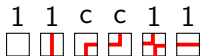
**Suffisant: compter les motifs valides sur un tore**

**Fonction de partition:**  $c > 0$ :

**Fonction de partition:**  $c > 0$ :



**Fonction de partition:**  $c > 0$ :

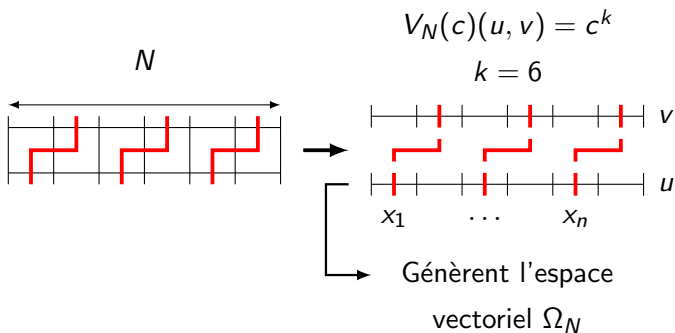


$$P_{N,M}(c) = \sum_{\text{motifs}} c^{k(\text{motif})}$$

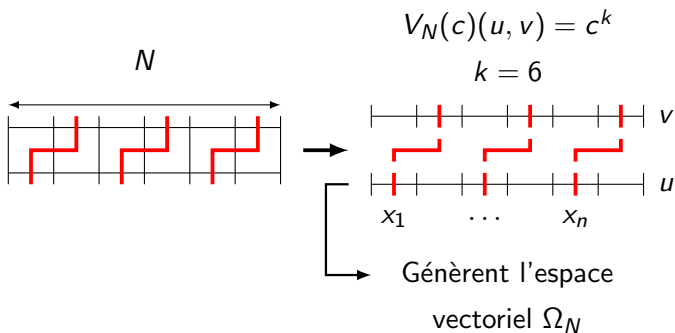
$$P_{N,M}(c) = \text{Tr}(V_N(c)^M)$$

**Matrice de transfert [Lieb]:**

## Matrice de transfert [Lieb]:

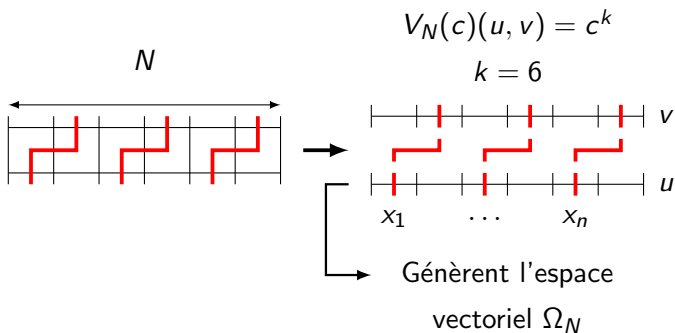


## Matrice de transfert [Lieb]:



## Entropie 'lestée' [Lieb]:

## Matrice de transfert [Lieb]:



## Entropie 'lestée' [Lieb]:

$$h_c = \lim_N \lim_M \frac{\log(\text{Tr}(V_N(c)^M))}{M} \quad \text{et} \quad h_1 = h_{top}$$



**Valeur propre maximale [classique]:**

**Valeur propre maximale [classique]:**

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

**Valeur propre maximale [classique]:**

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

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

**Valeur propre maximale [classique]:**

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

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

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

*Preuve:*

*Preuve:*

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

*Preuve:*

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

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

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

*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  $c > 0$ .



**Bethe ansatz [classique  $\varphi$  stat.]:**

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

**Bethe ansatz [classique  $\varphi$  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  $\varphi$  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  $\Delta = (2 - c^2)/2$ ,

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

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

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

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

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

alors

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

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

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

alors

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

Remarque:  $\lambda_n \neq 0?$ ,  $\varphi_n \neq 0?$



**Identification asymptotique [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al.]:**

## Identification asymptotique [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al.]:

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

## Identification asymptotique [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al.]:

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

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

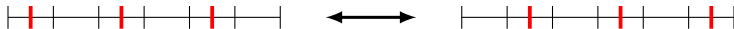
$$V_N(\infty) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ 0 & & 0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

## Identification asymptotique [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al.]:

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

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

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

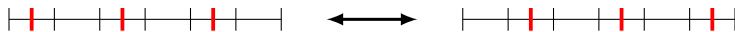


## Identification asymptotique [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al.]:

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

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

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



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

$$\frac{1}{c^{N/2}} \lambda_{N/2} \rightarrow 1$$

$$\frac{1}{c^{N/2}} \lambda_{N/2} \rightarrow 1$$

Au voisinage de  $+\infty$ :

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

$$\frac{1}{c^{N/2}} \lambda_{N/2} \rightarrow 1$$

Au voisinage de  $+\infty$ :

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

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



$$\frac{1}{c^{N/2}} \lambda_{N/2} \rightarrow 1$$

Au voisinage de  $+\infty$ :

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

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

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

**Existence de  $c \mapsto (p_j(c))_j$  [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al. pour  $c > 2$ ]:**

**Existence de  $c \mapsto (p_j(c))_j$  [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al. pour  $c > 2$ ]:**

Argument: 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  $c \mapsto (p_j(c))_j$  [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al. pour  $c > 2$ ]:**

Argument: 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 var. (distinction  $c > 2, c < 2$ )

**Existence de  $c \mapsto (p_j(c))_j$  [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al. pour  $c > 2$ ]:**

Argument: 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 var. (distinction  $c > 2, c < 2$ )

puis 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  $c \mapsto (p_j(c))_j$  [Yang<sup>2</sup>, Duminil-Copin et al. pour  $c > 2$ ]:**

Argument: point fixe sur:

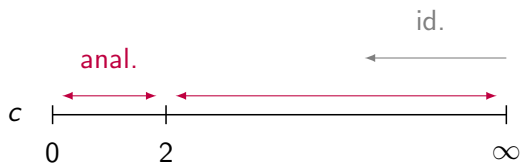
$$\rho \mapsto x : \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_1 \Theta(x, y) \rho(y) dy.$$

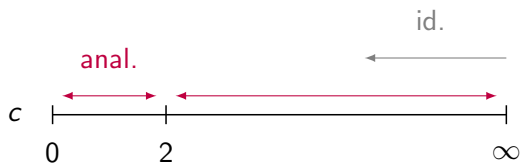
après changement de var. (distinction  $c > 2, c < 2$ )

puis sur:

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

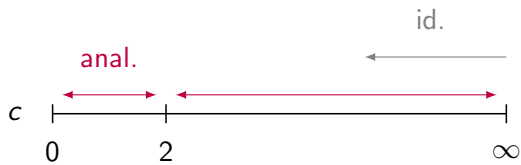
Problème: identification  $c > 2$ , on veut  $c = 1$ .





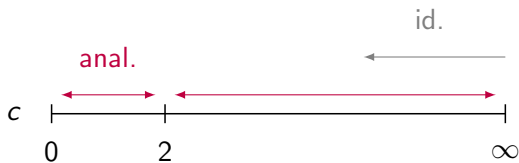
**Argument de Yang<sup>2</sup>:**





**Argument de Yang<sup>2</sup>:**

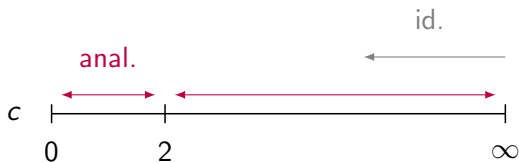
Identification en  $c = \sqrt{2}$ .



## Argument de Yang<sup>2</sup>:

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].", Yang<sup>2</sup>*



## Argument de Yang<sup>2</sup>:

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].", Yang<sup>2</sup>*

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

Calcul de  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:

**Calcul de  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:**

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

**Calcul de  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:**

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  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:**

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  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:**

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  $\rho$  [Yang<sup>2</sup>]:**

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 $\rho$ [Yang<sup>2</sup>]:

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  $h_1 = \lim_N \frac{\lambda_{N/2}(V_N(1))}{N},$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(contours dans  $\mathbb{C}$ )

## 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:

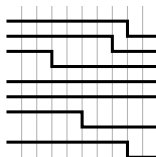
- ① Preuve de l'identification en  $c = \sqrt{2}$ ?
- ② Raisonnement par extensions des carrés de taille  $N$  en  $N + 1$  ?

## 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 ?

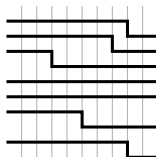
## Quelques idées:

- 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 ?



## 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 ?



- 5 Relation de l'ansatz avec les Parafermonic observables [Duminil-Copin, Smirnov] ?