



HAL
open science

Sur certaines méthodes de calcul de la physique statistique

Bernard Lacolle

► **To cite this version:**

Bernard Lacolle. Sur certaines méthodes de calcul de la physique statistique. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1984. tel-00311764

HAL Id: tel-00311764

<https://theses.hal.science/tel-00311764>

Submitted on 21 Aug 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

présentée à

l'Université Scientifique et Médicale de Grenoble

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES SCIENCES

«Mathématiques»

par

Bernard LACOLLE



**SUR CERTAINES METHODES DE CALCUL
DE LA PHYSIQUE STATISTIQUE.**



Thèse soutenue le 29 juin 1984 devant la commission d'examen.

Monsieur N. GASTINEL : Président

**Messieurs C. BREZINSKI
P.J. LAURENT
R. MAYNARD
F. ROBERT
J. VANNIMENUS** } **Examineurs**

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

Année universitaire 1982-1983

Président de l'Université : M. TANCHE

MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE L'U.S.M.G.

(RANG A)

SAUF ENSEIGNANTS EN MEDECINE ET PHARMACIE

PROFESSEURS DE 1ère CLASSE

ARNAUD Paul	Chimie organique
ARVIEU Robert	Physique nucléaire I.S.N.
AUBERT Guy	Physique C.N.R.S.
AYANT Yves	Physique approfondie
BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale C.N.R.S. (labo de magnétisme)
BARJON Robert	Physique nucléaire I.S.N.
BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose-Biologie
BARRA Jean-René	Statistiques - Mathématiques appliquées
BELORISKY Elie	Physique
BENZAKEN Claude (M.)	Mathématiques pures
BERNARD Alain	Mathématiques pures
BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques pures
BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques pures
BILLET Jean	Géographie
BONNIER Jean-Marie	Chimie générale
BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire I.S.N.
BRAVARD Yves	Géographie
CARLIER Georges	Biologie végétale
CAUQUIS Georges	Chimie organique
CHIBON Pierre	Biologie animale
COLIN DE VERDIERE Yves	Mathématiques pures
CRABBE Pierre (détaché)	C.E.R.M.O.
CYROT Michel	Physique du solide
DAUMAS Max	Géographie
DEBELMAS Jacques	Géologie générale
DEGRANGE Charles	Zoologie
DELOBEL Claude (M.)	M.I.A.G. Mathématiques appliquées
DEPORTES Charles	Chimie minérale
DESRE Pierre	Electrochimie
DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
DUCROS Pierre	Cristallographie
FONTAINE Jean-Marc	Mathématiques pures
GAGNAIRE Didier	Chimie physique

.../...

GASTINEL Noël	Analyse numérique - Mathématiques appliquées
GERBER Robert	Mathématiques pures
GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
GIRAUD Pierre	Géologie
IDELMAN Simon	Physiologie animale
JANIN Bernard	Géographie
JOLY Jean-René	Mathématiques pures
JULLIEN Pierre	Mathématiques appliquées
KAHANE André (détaché DAFCO)	Physique
KAHANE Josette	Physique
KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques pures
KRAKOWIAK Sacha	Mathématiques appliquées
KUPTA Yvon	Mathématiques pures
LACAZE Albert	Thermodynamique
LAJZEROWICZ Jeannine	Physique
LAJZEROWICZ Joseph	Physique
LAURENT Pierre	Mathématiques appliquées
DE LEIRIS Joël	Biologie
LLIBOUTRY Louis	Géophysique
LOISEAUX Jean-Marie	Sciences nucléaires I.S.N.
LOUP Jean	Géographie
MACHE Régis	Physiologie végétale
MAYNARD Roger	Physique du solide
MICHEL Robert	Minéralogie et pétrographie (géologie)
MOZIERES Philippe	Spectrométrie - Physique
OMONT Alain	Astrophysique
OZENDA Paul	Botanique (biologie végétale)
PAYAN Jean-Jacques (détaché)	Mathématiques pures
PEBAY PEYROULA Jean-Claude	Physique
PERRIAUX Jacques	Géologie
PERRIER Guy	Géophysique
PIERRARD Jean-Marie	Mécanique
RASSAT André	Chimie systématique
RENARD Michel	Thermodynamique
RICHARD Lucien	Biologie végétale
RINAUDO Marguerite	Chimie CERMAV
SENGEL Philippe	Biologie animale
SERGERAERT Francis	Mathématiques pures
SOUTIF Michel	Physique
VAILLANT François	Zoologie
VALENTIN Jacques	Physique nucléaire I.S.N.
VAN CUTSEN Bernard	Mathématiques appliquées
VAUQUOIS Bernard	Mathématiques appliquées
VIALON Pierre	Géologie

PROFESSEURS DE 2^{ème} CLASSE

ADIBA Michel	Mathématiques pures
ARMAND Gilbert	Géographie

.../...

AURIAULT Jean-Louis	Mécanique
BEGUIN Claude (M.)	Chimie organique
BOEHLER Jean-Paul	Mécanique
BOITET Christian	Mathématiques appliquées
BORNAREL Jean	Physique
BRUN Gilbert	Biologie
CASTAING Bernard	Physique
CHARDON Michel	Géographie
COHENADDAD Jean-Pierre	Physique
DENEUVILLE Alain	Physique
DEPASSEL Roger	Mécanique des fluides
DOUCE Roland	Physiologie végétale
DUFRESNOY Alain	Mathématiques pures
GASPARD François	Physique
GAUTRON René	Chimie
GIDON Maurice	Géologie
GIGNOUX Claude (M.)	Sciences nucléaires I.S.N.
GUITTON Jacques	Chimie
HACQUES Gérard	Mathématiques appliquées
HERBIN Jacky	Géographie
HICTER Pierre	Chimie
JOSELEAU Jean-Paul	Biochimie
KERCKOVE Claude (M.)	Géologie
LE BRETON Alain	Mathématiques appliquées
LONGEQUEUE Nicole	Sciences nucléaires I.S.N.
LUCAS Robert	Physiques
LUNA Domingo	Mathématiques pures
MASCLE Georges	Géologie
NEMOZ Alain	Thermodynamique (CNRS - CRTBT)
OUDET Bruno	Mathématiques appliquées
PELMONT Jean	Biochimie
PERRIN Claude (M.)	Sciences nucléaires I.S.N.
PFISTER Jean-Claude (détaché)	Physique du solide
PIBOULE Michel	Géologie
PIERRE Jean-Louis	Chimie organique
RAYNAUD Hervé	Mathématiques appliquées
ROBERT Gilles	Mathématiques pures
ROBERT Jean-Bernard	Chimie physique
ROSSI André	Physiologie végétale
SAKAROVITCH Michel	Mathématiques appliquées
SARROT REYNAUD Jean	Géologie
SAXOD Raymond	Biologie animale
SOUTIF Jeanne	Physique
SCHOOL Pierre-Claude	Mathématiques appliquées
STUTZ Pierre	Mécanique
SUBRA Robert	Chimie
VIDAL Michel	Chimie organique
VIVIAN Robert	Géographie

*A Denise
pour avoir imaginé et voulu cet instant,*

*A Nathalie, Matthieu et Guillaume
pour en avoir souri,*

*A mes Parents
pour l'avoir pressenti*

Monsieur le Professeur N. GASTINEL, en consacrant d'innombrables heures à défricher des problèmes nouveaux, à me guider, à me conseiller, à m'encourager, vous m'avez permis de réaliser ce travail. Il porte la marque de l'ouverture d'esprit, de la compétence et du dévouement dont vous avez toujours fait preuve avec tous ceux qui ont la chance de travailler avec vous.

Pour tout cela, je vous prie d'accepter toute ma reconnaissance et mes sincères remerciements.

J'adresse ma reconnaissance à Monsieur C. BREZINSKI d'avoir accepté de juger ce travail et de siéger aujourd'hui à ce jury.

Je remercie Monsieur P.J. LAURENT de l'intérêt qu'il porte à ce travail en acceptant de participer à la réalisation de ce jury.

Je remercie Monsieur R. MAYNARD d'avoir accepté de participer à ce jury et d'avoir eu, il y a quelques années, l'initiative du dialogue entre Physiciens et Mathématiciens, qui m'a permis la réalisation de ce travail.

J'adresse mes amicaux remerciements à Monsieur F. ROBERT à sa sagesse et sa patience. Il a toujours su me faire présenter les instants importants et me convaincre aux moments d'indécision.

Je remercie Monsieur J. VANNIMENUS qui après avoir accepté de juger ce travail a bien voulu participer à ce jury.

Ce travail doit aussi beaucoup à de nombreuses personnes que j'ai été amené à rencontrer depuis plusieurs années. En particulier tous ceux qui, à des moments divers, ont animé notre dialogue avec les Physiciens.

Je remercie particulièrement tous mes amis de l'équipe d'Ana... oh pardon !, d'Algorithmique Mathématique et à tous ceux qui en ont fait partie un jour. Je ne les citerai pas sous peine d'en oublier un, ce qui serait contraire à mes intentions.

Je remercie aussi toutes les personnes qui ont permis, chacune à leur manière, la réalisation de ce travail : le personnel du Centre de calcul, toujours prêt à renseigner les utilisateurs les plus insensés, le personnel des bibliothèques... et toutes les personnes qui à de nombreuses reprises m'ont consacré de leur temps pour le renseignement dont j'avais besoin.

Je dois un grand merci à G. BICAIS dont la dextérité légendaire devant tout ce qui ressemble à un clavier de machine à écrire, a permis de terminer à temps ce travail.

Merci à C. MEYRIEUX pour avoir dompté la récalcitrante machine de traitement de texte.

Merci à tout le service tirage, à D. IGLESIAS, réalisateur de l'impossible, et à C. ANGUILLE, seul maître à bord de la fouguse Neuf-Mille-Deux : ils ont réalisé un document dont les seules imperfections sont celles de l'auteur.

SUR CERTAINES METHODES DE CALCUL

DE LA PHYSIQUE STATISTIQUE

CHAPITRE I

MODELES D'INTERACTIONS A SPINS D'ISING SUR Z^2 OU Z^3

I	- Introduction -----	1.1
II	- Modèles d'interactions à spins d'Ising sur Z^2 -----	1.2
	II.1 Généralités sur Z^2 -----	1.2
	II.1.1. - Sites. Spins. Liaisons -----	1.2
	II.1.2. - Convergence vers Z^2 au sens de Van Hove -----	1.3
	II.2 Fonction de partition et énergie de systèmes finis -----	1.3
	II.2.1. - Fonction de partition : définition -----	1.4
	II.2.2. - Energie : définition -----	1.4
	II.3 Quelques propriétés de l'énergie -----	1.5
	II.3.1. - Notation -----	1.5
	II.3.2. - Condition de Lipschitz -----	1.5
	II.3.3. - Convexité -----	1.6
	II.3.4. - Propriété relative aux matrices de connexions --	1.6
III	- L'Energie limite -----	1.7
	III.1 Existence pour un modèle homogène -----	1.7
	III.1.1 - Lemme : union de deux parties disjointes -----	1.7
	III.1.2 - Corollaire : union de n parties disjointes -----	1.8
	III.1.3 - Lemme : majoration de l'énergie -----	1.9
	III.1.4 - Lemme sur l'énergie d'un système carré -----	1.9
	III.1.5 - Lemme : Approximation par des carrés -----	1.10
	III.1.6 - Convergence de l'énergie de sous-systèmes carrés	1.11
	III.1.7 - Existence de l'énergie limite -----	1.12
	III.1.8 - Propriétés : convexité et condition de Lipschitz de l'énergie limite -----	1.15
	III.2 Energie limite de systèmes périodiques -----	1.15
	III.3 Modification asymptotiquement négligeable -----	1.16
	III.3.1 - Modification de connexions -----	1.16
	Propriété	
	Application : Remplacement d'un carré par un tore	
	III.3.2 - Modification de l'ensemble de sommation -----	1.19
	Propriété	
	Exemple : Périodicité des spins sur des réseaux carrés.	
IV	- Le concept de frustration -----	1.21
	IV.1 Invariance locale -----	1.21
	IV.2 Transformations canoniques -----	1.23
	IV.3 Plaquettes frustrées -----	1.23
	IV.4 Forme canonique d'un "verre de spin" sur un carré $n \times n$ non périodique -----	1.23
	IV.5 Propriété : Forme canonique et frustration -----	1.25
	BIBLIOGRAPHIE -----	1.26

CHAPITRE II

APPROXIMATION D'UNE FONCTION CONVEXE LIPSCHITZIENNE ET DE SES SINGULARITES

Présentation du chapitre -----	II.1
Le reste du chapitre est constitué d'un article à paraître dans la RAIRO*	
I - Approximation d'une fonction convexe Lipschitzienne -----	II.3
I.0 Notations -----	II.3
I.1 Caractérisation de E Théorème I.1 -----	II.3
I.2 Caractérisation de F Théorème I.2 -----	II.8
I.3 Algorithmes de construction d'une suite de polynômes associés -----	II.8
I.4 Variante des algorithmes de base -----	II.12
II - Expression intégrale locale d'éléments de E et de F -----	II.12
II.0 Notations et généralités -----	II.12
II.1 Théorème II.1 (énoncé) -----	II.13
II.2 Décomposition de la fonction f et notations -----	II.14
II.3 Lemme II.3 -----	II.14
II.4 Propriété II.4 -----	II.16
II.5 Propriété II.5 -----	II.19
II.6 Démonstration du théorème II.1 -----	II.22
II.7 Expression intégrale d'un élément de F. Théorème II.7 --	II.23
III - Approximation des singularités d'une fonction f convexe lipschitzienne -----	II.24
Théorème III -----	II.24
III.1 Illustration du théorème III -----	II.25
III.2 Recherche des singularités d'une fonction convexe lipschitzienne -----	II.26
Exemple numérique 1	
Exemple numérique 2	
Exemple numérique 3	
Conclusion -----	II.31
BIBLIOGRAPHIE -----	II.32

* RAIRO Analyse Numérique/Numerical Analysis AFCET (BORDAS DUNOD)

CHAPITRE III

FONCTIONS CONVEXES ET LOGARITHMES DE POLYNOMES ETUDE DES SINGULARITES DES FONCTIONS D'ENERGIE

Présentation du chapitre -----	III.1
I - Fonction convexe et logarithmes de polynômes -----	III.3
I.1 Expression d'une fonction convexe à l'aide de logarithmes de polynômes à coefficients positifs Théorème -----	III.3
I.2 Fonction convexe - Suite de logarithmes de polynômes. Introduction de la fonction polaire -----	III.5
I.2.1 - Notations -----	III.5
I.2.2 - Propriété : Approximation discrète de la polaire -	III.6
I.2.3 - Propriété : Approximation de la fonction polaire et logarithmes de polynômes -----	III.8
I.2.4 - Propriété : Approximation d'une fonction convexe et logarithmes de polynômes utilisant les valeurs de la fonction polaire -----	III.9
I.2.5 - Théorème : Approximation d'une fonction convexe et logarithmes de polynômes. Propriété asymptotique des coefficients des polynômes -----	III.11
II - Etude des singularités des fonctions d'énergie -----	III.14
II.1 Introduction -----	III.14
II.2 Existence des dérivées de l'énergie -----	III.15
II.2.1- Remarque sur la continuité de l'énergie -----	III.15
II.2.2- Théorème : Critère de convergence normale -----	III.15
II.2.3- Théorème : Critère de convergence uniforme -----	III.17
II.2.4- Application -----	III.20
II.3 Une condition d'analyticité de l'énergie -----	III.22
II.3.1- Théorème (énoncé)-----	III.22
II.3.2- Schéma de la démonstration -----	III.22
II.3.3- Lemme -----	III.23
II.3.4- Lemme -----	III.23
II.3.5- Quelques majorations -----	III.24
II.3.6- Démonstration du théorème -----	III.25
BIBLIOGRAPHIE -----	III.27

CHAPITRE IV

MATRICES DE TRANSFERT ET FONCTIONS DE PARTITION

Introduction	-----	IV.1
I	- Matrices de transfert : définition et formes tensorielles pour des modèles à spins d'Ising	IV.3
I.1	Les modèles d'interactions et les matrices de transfert	IV.3
I.1.1	Cas homogène	IV.3
I.1.2	Cas non homogène	IV.4
I.1.3	Factorisation des matrices de transfert	IV.5
I.2	Expression des matrices de transfert pour des modèles de type Ising. Forme tensorielle	IV.5
I.2.1	Numérotation des états d'un système de n spins	IV.5
I.2.2	Matrice de Pauli. Produit de Kronecker	IV.6
	Propriété I.2.2	IV.6
	Exemple 1 : Interaction entre deux chaînes de n spins	
	Exemple 2 : Réseau cubique	
	Exemple 3 : Introduction d'un champ magnétique	
II	- Matrices polynomiales à coefficients positifs	IV.10
II.1	Le cadre de l'étude	IV.10
II.2	Etude des racines de $S_p(z) = \text{Trace}(M(z))^p$	IV.11
II.2.1	Notations - Objectifs	IV.11
II.2.2	Quelques propriétés de combinaisons linéaires de nombres complexes	IV.12
	Notation	IV.12
	Problème 1. Propriété 1	IV.12
	Problème 2. Propriété 2	IV.13
	Théorème II.2.2 : Localisation en secteur de combinaisons linéaires de nombres complexes.	IV.15
II.2.3	Application aux matrices de transfert.	
	Itéré d'un vecteur par une matrice de transfert	IV.15
	Propriété 1	IV.16
	Propriété 2	IV.16
	Théorème II.2.3 : localisation en secteurs des termes de $(M(z))^p$.	IV.17
	Corollaire du théorème II.2.3 : Exclusion des racines de trace $(M(z))^p$.	IV.17

II.3 Généralisations -----	IV.18
II.3.1 Matrices dont les coefficients sont des polynômes à coefficients positifs -----	IV.18
Théorème II.3.1 - Corollaire	
II.3.2 Produits généraux de matrices à coefficients monomiaux -----	IV.19
Théorème II.3.2 - Corollaire	
II.3.3 Produits de matrices à coefficients monomiaux Matrices de tailles variables -----	IV.20
Théorème II.3.3 - Corollaire	
 III - Autres localisations des racines de Trace $(M_p(z))^p$ -----	IV.21
III.1 Localisation des racines de Trace $(M(z))^p$ -----	IV.21
Théorème III.1 -----	IV.21
Exemple -----	IV.22
III.2 Généralisation du théorème III.1 -----	IV.23
III.2.1 Notations -----	IV.24
III.2.2 Théorème -----	IV.24
 IV - Quelques exemples -----	IV.25
IV.1 Lemme -----	IV.25
IV.2 Des exemples -----	IV.26
Exemple 1 -----	IV.27
Exemple 2 -----	IV.29
Localisation des racines de polynômes définis par une relation de récurrence linéaire -----	IV.34
 BIBLIOGRAPHIE -----	IV.38

CHAPITRE V

CALCUL FORMEL DE FONCTIONS DE PARTITION EN PHYSIQUE STATISTIQUE

Présentation -----	V.1
Le reste du chapitre est constitué du Rapport de Recherche IMAG n° 411.	
Introduction -----	V.3
I - Le problème bidimensionnel -----	V.3
I.1 Description-----	V.3
I.2 Le problème du temps de calcul -----	V.4
I.3 Reconstitution formelle du polynôme -----	V.5
II - Reconstitution du polynôme -----	V.5
II.1 Arithmétique modulaire -----	V.5
II.2 Reconstitution du polynôme -----	V.6
III - Formulation matricielle -----	V.8
III.1 Notations -----	V.8
III.2 Périodicité en lignes -----	V.8
III.3 Non périodicité en lignes -----	V.10
III.4 Périodicité, antipériodicité des spins -----	V.11
IV - Etude de la complexité du calcul de P -----	V.12
IV.1 Périodicité -----	V.12
IV.2 Non périodicité -----	V.13
V - Résultats numériques -----	V.13
V.1 Cas non périodique -----	V.13
V.1.1 Réalisation pratique de l'algorithme -----	V.13
V.1.2 Quelques résultats -----	V.17
V.2 Cas non périodique -----	V.18
V.2.1 Réalisation pratique de l'algorithme -----	V.18
V.2.2 Quelques résultats -----	V.18
VI - Le problème à trois dimensions non périodique -----	V.22
VI.1 Généralités -----	V.22
VI.2 Réalisation pratique de l'algorithme -----	V.23
VI.3 Quelques résultats -----	V.24
BIBLIOGRAPHIE -----	V.28
ANNEXE : Programme de calcul d'une fonction de partition pour un modèle à deux dimensions.	V.30

CHAPITRE VI

CALCUL FORMEL ET ANALYSE SPINORIELLE

Introduction		VI.1
I - Les problèmes traités		VI.3
I.1 Premier problème : le calcul de la fonction de partition		VI.3
I.2 Deuxième problème : calcul formel de l'énergie		VI.3
II - La formulation spinorielle		VI.4
II.1 Transformation du problème		VI.4
II.1.1 Notations		VI.4
II.1.2 Propriété		VI.5
II.1.3 Propriété		VI.6
II.2 Groupe spinoriel et $SO(\mathcal{N})$		VI.6
II.2.1 Définition		VI.6
II.2.2 Exemple		VI.7
II.2.3 Théorème sur le groupe spinoriel		VI.7
II.2.4 Quelques exemples simples		VI.8
II.2.5 Modèle d'Ising à deux dimensions		VI.10
III - Calcul de fonctions de partition de modèles non homogènes : une méthode "polynomiale"		VI.14
III.1 Introduction		VI.14
III.2 Méthode de calcul pour un modèle non homogène		VI.14
III.2.1 Notations		VI.14
III.2.2 Lemme		VI.15
III.2.3 Lemme		VI.15
III.2.4 Evaluation de Z par un déterminant		VI.15
III.3 Suppression de la périodicité en ligne		VI.18
IV - Calcul formel d'énergies de modèles périodiques		VI.20
IV.1.1 Notations et position du problème		VI.20
IV.1.2 Démarche de la méthode de calcul		VI.21
IV.2 Quelques lemmes		VI.23
IV.2.1 Lemme sur la restriction de ϵ^+		VI.23
IV.2.2 Lemme		VI.25
IV.2.3 Lemme		VI.26
IV.2.4 Lemme		VI.27
IV.3 Modèle à périodicité verticale 1		VI.28
IV.3.1 Description générale		VI.28
IV.3.2 Propriété des valeurs propres		VI.30
IV.3.3 Introduction de la périodicité en ligne		VI.30
IV.3.4 Illustration : modèle d'Ising		VI.31

IV.3.5	Modèle à période horizontale 2 -----	VI.33
IV.3.6	Modèles à période horizontale 4 -----	VI.37
IV.3.7	Modèle à période horizontale 5 -----	VI.39
IV.3.8	Modèle à période horizontale 6-----	VI.40
IV.4	Modèles à périodicité 2 en ligne et colonne -----	VI.41
IV.4.1	Un modèle à paramètres multiples -----	VI.41
IV.4.2	Cas particulier -----	VI.V3
	Généralisation à d'autres réseaux et conclusion -----	VI.45
	Théorème sur le groupe spinoriel : éléments de démonstration --	VI.46
	BIBLIOGRAPHIE -----	VI.48

PREAMBULE

Ce travail a débuté le jour où des Physiciens de Grenoble dont M^r R. Maynard sont venus présenter à M^r N. Gastinel et quelques Mathématiciens appliqués, des problèmes inconnus pour nous et en particulier le problème des "Verres de Spins". Ce thème s'est révélé l'un des plus "porteurs" de ces dernières années pour bien de nos collègues de Mathématiques Appliquées. Des travaux originaux ont déjà été les fruits de ces échanges.

Cette thèse vient relativement tard après mes premiers contacts avec la physique statistique. Il a été très long de voir quelles pourraient être les contributions de nos connaissances en mathématiques du calcul à ce genre de problèmes. On trouvera au fil des chapitres de cette thèse, la démarche que j'ai suivie. Si ce travail, en plus des résultats obtenus, pouvait permettre au lecteur de faire rapidement cette démarche, je pense qu'un objectif important serait atteint et que Physiciens et Mathématiciens pourraient avancer concrètement sur de vrais problèmes.

Tout d'abord, le premier chapitre, même s'il ne contient pas vraiment de théorèmes nouveaux, permet de faire connaître rapidement les problèmes abordés. Précisons que cette découverte de la physique statistique, de son langage, m'a personnellement pris un temps considérable. Cet investissement, peu productif à court terme, a été difficile à assumer. Viennent ensuite trois chapitres où j'ai ressenti les besoins d'aller plus loin du côté mathématique, que les approches strictement nécessaires en physique. Des résultats mathématiques sont établis sur des problèmes suggérés par la Physique. Je pense que ces chapitres ont aussi comme intérêt de poser de vrais problèmes sur lesquels le mathématicien peut certainement avancer. Enfin, les deux derniers chapitres constituent un apport concret de nos mathématiques du calcul à la physique statistique et comportent la réalisation effective de grands programmes.

J'espère que cette rédaction mettra clairement en évidence les différents traits cités plus haut : la prise de connaissance avec un domaine inconnu a priori, l'investissement dans différents domaines des mathématiques, la réalisation effective de grands programmes de calcul et l'obtention de résultats sur des exemples concrets.

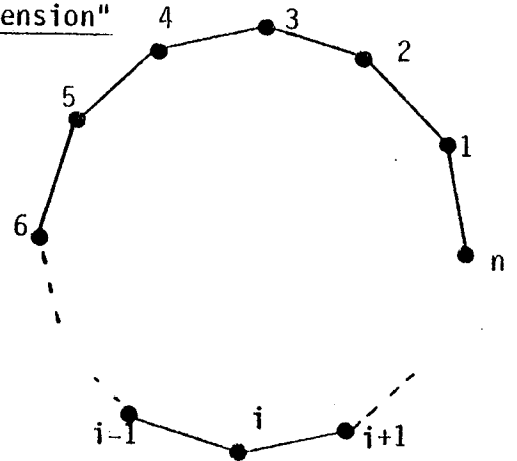
INTRODUCTION

La matière même de cette thèse est certainement peu connue du lecteur éventuel. En conséquence, avant de présenter les résultats obtenus, je développe l'exemple le plus simple des modèles étudiés. Evidemment sa simplicité ne permettra pas de mettre en évidence des comportements aussi riches que des modèles plus évolués. D'autre part le modèle présenté se traite "analytiquement" ce qui n'est pas le cas le plus fréquent. Après la présentation de ce modèle simple je détaille chapitre par chapitre les différents problèmes et les résultats obtenus.

Un modèle simple : "le modèle d'Ising à 1 dimension"

Brève description

Considérons un graphe cyclique non orienté à n sommets. Sur chacun de ses sommets ou sites se trouve un spin de valeur ± 1 . (Spins d'Ising). Le spin σ_i se trouve sur le sommet i . Les arêtes du graphe matérialisent les "connexions" entre sites.



Nous appelons "état" (de spins) un élément σ de $\{-1, 1\}^n$ et à chaque état σ nous associons une valeur $E(\sigma)$ qui, physiquement, sera l'énergie de l'état σ .

Par exemple nous prendrons :

$$E(\sigma) = -(J_{12}\sigma_1\sigma_2 + J_{23}\sigma_2\sigma_3 + \dots + J_{n-1,n}\sigma_{n-1}\sigma_n + J_{n,1}\sigma_n\sigma_1)$$

$J_{i,i+1}$ étant la valeur de la connexion entre les sites i et $i+1$.

Prenons pour simplifier : $J_{ij} = J$.

Revenons dans le domaine de la mécanique statistique. Dans une distribution canonique de Gibbs, l'état σ a une probabilité proportionnelle à :

$$\exp(-E(\sigma)/kT)$$

k étant la constante de Boltzmann et T la température absolue.

Une fonction fondamentale de la mécanique statistique est la *fonction de partition** :

$$Z = \sum_{\sigma \in \{-1,1\}^n} \exp(-E(\sigma)/kT)$$

Dans notre exemple nous retenons comme variable le nombre de sommets du graphe : n , et la variable réelle $\beta = \frac{J}{kT}$:

$$Z = Z_n(\beta) = \sum_{\sigma \in \{-1,1\}^n} \exp(\beta(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \dots + \sigma_{n-1}\sigma_n + \sigma_n\sigma_1))$$

Dans ce cas particulier on démontre par récurrence :

$$Z_n(\beta) = 2^n \{ (\text{ch}\beta)^n + (\text{sh}\beta)^n \}$$

Dans le cadre de la mécanique statistique on peut alors montrer l'existence d'une autre fonction fondamentale définie par

$$f(\beta) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log Z_n(\beta)$$

que j'appellerai dans cette thèse, par abus de langage, *fonction d'énergie*. En effet en thermodynamique cette fonction d'énergie serait

$$-k T f(J/kT)$$

Ce passage à la limite, modélisant un système réel avec (quasiment) une infinité de "sites" est très différent des démarches classiques de l'analyse ; en particulier les systèmes finis ne sont pas des discrétisations de quelques modèles continus. L'essence du problème réside dans l'existence d'une

* Au risque de gêner le mathématicien nous ne pouvons à ce point figer une définition de la fonction de partition qui fait intervenir de nombreux paramètres : graphe, connexions, température. Nous précisons sur chaque exemple les variables pertinentes, une définition générale ne pouvant être que très formelle et finalement peu utile.

infinité de "sites" distincts et interagissant avec leurs voisins avec éventuellement des connexions différentes.

TRANSITION DE PHASE - SINGULARITE

Le problème fondamental de la mécanique statistique est celui des *transitions de Phase*. Son étude analytique revient à l'étude des *singularités* de la fonction d'énergie f , ici comme fonction de la variable réelle.

Contrairement aux objectifs les plus fréquents de l'analyse, l'approximation quantitative de f est de peu d'importance et les questions essentielles sont :

- la fonction f est-elle analytique ? (*)
- en quels points est-elle singulière ?
- quelle est la nature des singularités ?

Dans l'exemple présenté ci-dessus $f(\beta) = \log(2\cosh\beta)$ est analytique pour $\beta \in \mathbb{R}$. Ceci est dû à la simplicité du système. Dans les cas réels f présente des singularités mais évidemment son expression analytique est rarement connue.

Chapitre I

Ce chapitre présente les modèles de mécanique statistique étudiés dans cette thèse. L'essentiel de ce chapitre est emprunté à des travaux existants et en particulier au livre de D. Ruelle "Statistical Mechanics". Son originalité réside dans le fait que je me suis imposé d'introduire le moins de notations et de concepts propres à la mécanique statistique ce qui permet, je l'espère, au non spécialiste de découvrir très rapidement les problèmes originaux propres à ce domaine. On y découvrira sur les réseaux \mathbb{Z}^2 ou \mathbb{Z}^3 , systèmes de spins, fonction de partition, énergie, énergie limite, verre de spins,...

Dans les deux derniers paragraphes, je donne des démonstrations de propriétés couramment utilisées : modifications asymptotiquement négligeables, forme canonique d'un verre de spin.

(*) Une fonction réelle $f(t)$ de la variable réelle t est analytique sur un segment $]a, b[$ lorsqu'elle est développable en série entière en $t-t_0$ autour de tout point t_0 de ce segment, la série étant convergente dans un intervalle de centre t_0 .

Chapitre II

A partir de l'exemple précédent nous pouvons remarquer que Z_n est, à monôme multiplicatif pris en $z = e^{-\beta}$, un polynôme en cette même variable z :

$$2^n \{ (\operatorname{ch}\beta)^n + (\operatorname{sh}\beta)^n \} = (e^{-\beta})^n \{ (1 + e^{-2\beta})^n + (1 - e^{-2\beta})^n \}$$

La relation entre les zéros de ces polynômes et les singularités de la fonction obtenue en utilisant leurs logarithmes est intuitive. Ces notions ont été précisées dans de nombreux travaux de physiciens et de mathématiciens et restent aujourd'hui des moyens d'études fondamentaux en Physique Théorique (ch.I[2],[4],ch.II [1], ch.III [1][4][5][15]) .

Le travail effectué dans ce chapitre donne un cadre mathématique général pour l'étude des fonctions d'énergie au delà de leur contexte de Physique initial .

Dans ce chapitre je montre que les fonctions de la variable réelle t , définies par :

$$t \rightarrow C t + \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n(e^t)$$

où C est une constante réelle et les P_n des polynômes à coefficients positifs (assurant l'existence de la limite et tels que $d^0 P_n/n$ soit borné) sont en fait toutes les fonctions convexes lipschitziennes . Après avoir établi dans le cas le plus général, une expression intégrale de ces fonctions faisant intervenir les mesures de répartitions des racines des P_n , l'utilisation de méthodes inverses de construction des P_n à partir des valeurs de la fonction f , permet d'entrevoir de nouveaux procédés d'approximation de singularités .

Chapitre III

Ce chapitre complète certaines notions introduites au chapitre précédent .

Dans une première partie je généralise le théorème de caractérisation du chapitre II en montrant que toute fonction convexe peut s'exprimer par :

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n(e^t) \quad t \in \mathbb{R}$$

où les P_n sont des polynômes à coefficients positifs "généralisés". Malheureusement l'expression intégrale ne semble plus valable. Par contre

cette approche nous permet de développer dans le cadre mathématique de l'Analyse convexe (ch.III [9]) un certain nombre de propriétés reliant la fonction f , sa polaire et les polynômes P_n . Cette étude se conclue par la mise en évidence d'une relation de dualité entre les coefficients des polynômes P_n et la fonction convexe f . Bien que l'on retrouve cette relation sous une autre forme dans le livre de D.Ruelle (ch.IV [14]), l'exploitation du cadre Analyse convexe pour l'étude des fonctions d'énergies a , semble-t-il, être peu utilisé.

La seconde partie établit quelques propriétés générales sur la nature des singularités des fonctions définies sous forme intégrale au chapitre II : existence des dérivées d'ordre p , analytité... propriétés établies d'après certaines conditions sur la mesure d'intégration.

Les travaux réalisés en ce domaine consistent essentiellement en la résolution de quelques problèmes particuliers (ch.III [1][2][4][5][6][10][15][19]).

Chapitre IV

La localisation des racines des fonctions de partition mises sous forme polynômiale est de première importance pour l'étude des transitions de phase. Les théorèmes classiques sur la localisation des racines des polynômes (ch.IV [16]) sont de peu d'utilité mais des méthodes spécifiques très originales ont été développées pour certains exemples (ch.IV [1][2][11][14][18][19][20]).

J'ai choisi pour ce chapitre un cadre différent et très peu utilisé en mathématique, celui où les fonctions de partition s'expriment par $\text{Trace}(M_p(z))^p$ où les $M_p(z)$, sont des matrices monomiales appelées "matrices de transfert". Ce chapitre est consacré à l'étude de produits de matrices polynomiales (éventuellement à coefficients positifs) et des polynômes définis par leur trace, en particulier. Un théorème de localisation lorsque $M_p(z)$ ne dépend pas de p y est établi et généralisé à des cas similaires. Toujours dans le cas où $M_p(z)$ est indépendant de p on arrive à localiser l'ensemble limite des racines de trace $(M(z))^p$ lorsque p tend vers l'infini. D'autres propriétés et une série d'exemple illustrent la richesse d'un problème en apparence simple.

Le calcul de fonctions de partition de modèles finis est un moyen d'étude qui s'est révélé fructueux en Physique (ch.V [10][11][12][15]). Malheureusement les tentatives se sont souvent heurtées à une limitation de la taille des modèles étudiés .

Ce chapitre est consacré au calcul effectif de fonctions de partition. Un choix judicieux de bases tensorielles pour exprimer les matrices de Transfert me permet d'élaborer des algorithmes dont la "complexité" est réduite à un seuil qui rend possible le calcul de fonctions de partitions non triviales. La réalisation de tels calculs nécessite l'utilisation de technique de calcul formel (calcul modulaire, interpolation polynomiale sur des corps finis,...). De nombreux exemples sont présentés : beaucoup d'entre eux sont inédits , en particulier par la taille des modèles traités .

Chapitre VI

Pour certains modèles de Physique (à deux dimensions) des résultats ont été obtenus pour des fonctions d'énergie sous forme d'intégrales doubles et ceci principalement par des méthodes combinatoires (ch.VI [1][3][8][11]) . J'ai essayé dans ce chapitre d'accroître les possibilités de tels calculs aussi bien par la mise en oeuvre de méthodes différentes que par leur programmation effective sur ordinateur .

Ce chapitre est, comme le précédent, de nature algorithmique et consacré à l'étude de modèles à deux dimensions d'un point de vue algébrique assez délaissé : celui des représentations spinorielles (ch.VI [7]) .. Je montre que cette approche se révèle très algorithmique et permet le calcul formel d'énergies sous formes d'intégrales doubles dont les noyaux sont des déterminants. On montre très clairement les possibilités nouvelles offertes par un système de calcul formel comme REDUCE pour l'évaluation de ces déterminants ce qui me permet d'obtenir des résultats qui ne semblent pas être connus à ce jour. D'ailleurs les expériences réalisées à titre "prospectif" avec très peu de moyens de calcul permettent d'envisager le traitement d'exemples beaucoup plus complexes.

CHAPITRE I

MODELES D'INTERACTION A SPINS D'ISING
SUR \mathbb{Z}^2 ET \mathbb{Z}^3

I - INTRODUCTION

Ce chapitre a pour principal objectif d'introduire dans le langage le plus simple possible (et avec le moins de notations) les notions et les propriétés nécessaires à la lecture des chapitres suivants.

Cet exposé est destiné au mathématicien non spécialiste pour présenter le type de problèmes traités et leurs traits fondamentaux. En contrepartie ce chapitre ne sera peut être pas d'un grand intérêt pour le physicien ou le spécialiste de mécanique statistique.

Les notions de bases sont conformes au formalisme développé dans le livre de Ruelle "Statistical Mechanics"([4]). J'ai choisi de les exprimer dans un langage matriciel très simple et adapté aux exemples traités dans cette thèse.

En particulier bien que le problème abordé se place éventuellement sur \mathbb{Z}^3 , toutes les notions sont exposées sur \mathbb{Z}^2 . La généralisation à \mathbb{Z}^3 (ou \mathbb{Z}^n) ne pose qu'un problème de notation, sauf difficulté explicitement signalée.

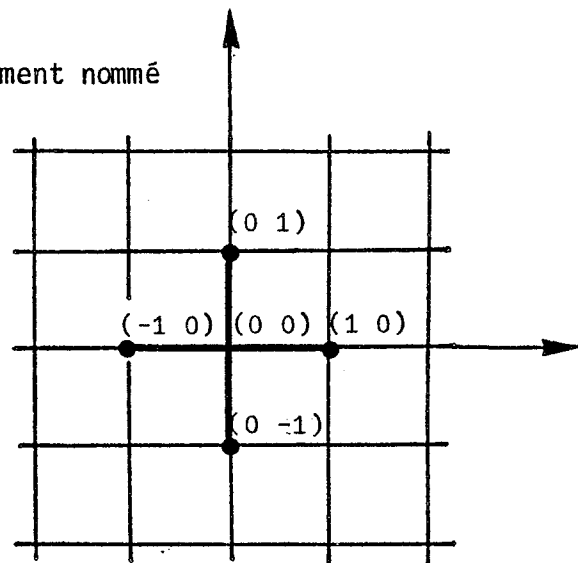
De plus le formalisme matriciel me permet dans les paragraphes III et IV de démontrer et de voir les limites d'applications de quelques résultats que l'on trouve bien éparés en physique.

II - MODELES D'INTERACTIONS A SPINS D'ISING SUR \mathbb{Z}^2

II.1 - GENERALITES SUR \mathbb{Z}^2 ([4])

II.1.1 - Sites Spins liaisons ...

On considère le *réseau carré* habituellement nommé $\mathbb{Z}^2 = \{x, y \mid x \in \mathbb{Z}, y \in \mathbb{Z}\}$. Chaque *noeud* du réseau sera aussi appelé *site*. En chaque site sera placé un *spin* de valeur ± 1 . Des *liaisons (connexions)* existent entre sites plus *proches voisins* au sens de la métrique d_1 sur \mathbb{Z}^2 : les voisins du site correspondant à $(0,0)$ sont matérialisés sur le schéma. Chaque liaison ou connexion a une valeur qui dans cet exposé sera égale à $\pm J$. Certains auteurs [4] parlent de *graphes* (à la place de réseau) et de *sommet* (à la place de noeud).



II.1.2 - Convergence sur \mathbb{Z}^2 au sens de Van Hove

Toutes les fonctions que nous construirons par la suite utilisent des familles de parties finies de \mathbb{Z}^2 et il est indispensable de définir une convergence vers \mathbb{Z}^2 possédant certaines régularités : "en gros" il ne faut pas privilégier une direction par rapport à une autre. Nous allons présenter cette notion.

Soient $a = (a_1, a_2) \in \mathbb{Z}^2$ avec $a_1 > 0$ $a_2 > 0$

$$T(a) = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{Z}^2 : 0 \leq x_1 < a_1, 0 \leq x_2 < a_2\}$$

$T_n(a) = T(a) + na$ est appelé *translaté* de $T(a)$

$$(n = (n_1, n_2) \quad n_a = (n_1 a_1, n_2 a_2)) \quad n \in \mathbb{Z}^2$$

Pour Λ partie finie $\subset \mathbb{Z}^2$ on note :

$N_a^+(\Lambda)$ = nombre de $T_n(a)$ tels que $T_n(a) \cap \Lambda \neq \emptyset$

$N_a^-(\Lambda)$ = nombre de $T_n(a)$ tels que $T_n(a) \subset \Lambda$

Convergence au sens de Van Hove ([4])

Soit $\{\Lambda_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ une famille de parties finies de \mathbb{Z}^2 .
On dit que $\Lambda_i \rightarrow \mathbb{Z}^2$ au sens de Van Hove si et seulement si

$$N_a^-(\Lambda_i) \xrightarrow{i \rightarrow +\infty} +\infty \quad \text{et} \quad \frac{N_a^-(\Lambda_i)}{N_a^+(\Lambda_i)} \xrightarrow{i \rightarrow +\infty} +1 \quad \forall a = (a_1, a_2)$$

$$a_1 \in \mathbb{N}^* \quad a_2 \in \mathbb{N}^*$$

Remarque

Cette notion de convergence suffit pour le travail que je me suis proposé.
D'autres types de convergence sont données dans ([4]).

II.2 - FONCTION DE PARTITION ET ENERGIE DE SYSTEMES FINIS

Soient le réseau \mathbb{Z}^2 et des valeurs de connexions données $\pm J$.
Soit Λ une partie finie de \mathbb{Z}^2 . Les sites et les spins de Λ seront numérotés de 1 à $|\Lambda|$. L'ensemble des "états" ou "configurations" de spins sur les sites Λ peut être identifié à $\mathcal{E}_{|\Lambda|} = \{-1, 1\}^{|\Lambda|}$. σ désignera un "état" ou "configuration" de spins et σ_i la valeur du spin i dans cette configuration.

S'il existe une connexion entre les sites i et j on note sa valeur $J_{ij} = J_{ji} = \pm J$.

A une configuration σ on associe alors une énergie :

$$E(\sigma) = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - I \sum_i \sigma_i$$

J, I désignant deux variables "physiques", (i,j) un couple non ordonné de sommets voisins de Λ . Nous utiliserons la notation matricielle :

$$E(\sigma) = -J \sigma^T J_{\Lambda} \sigma - I \sigma^T V_{\Lambda} \quad (*)$$

où σ est un vecteur de $\{-1,1\}^{|\Lambda|}$, J_{Λ} une matrice de $\mathcal{M}_{|\Lambda|,|\Lambda|}(\mathbb{R})$ appelée *matrice de connexions*, définie par :

$$J_{\Lambda}(i,j) = \begin{cases} 1/2 & \text{si } J_{ij} = J \\ -1/2 & \text{si } J_{ij} = -J \end{cases}$$

et V_{Λ} le vecteur de $\mathbb{R}^{|\Lambda|}$ dont toutes les composantes sont égale à 1.

Deux mots de "physique" pour dire que si k désigne la constante de Boltzmann et T la température on pose : $\beta = J/kT$ $\gamma = I/kT$

II.2.1 - Fonction de partition : définition

$$Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} \exp(\beta \sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \gamma \sigma^T V_{\Lambda})$$

sera appelée la *fonction de partition* correspondant au sous-système Λ de Z^2 .

II.2.2 - Energie : définition

Avec les mêmes notations on pose :

$$f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) = \frac{1}{|\Lambda|} \log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)$$

f étant appelée dans ce travail *énergie* du sous-système fini Λ .

Il y a un abus de langage par rapport à la terminologie physique de la fonction "d'énergie libre". Les rapports sont cependant très étroits entre ces deux fonctions (voir introduction, page 2).

(*) L'ambiguïté éventuelle entre J, J_{ij}, J_{Λ} disparaît au paragraphe suivant où l'on ne parle plus que de J_{Λ} .

II.3 - QUELQUES PROPRIETES DE L'ENERGIE

II.3.1 - Notations

En plus des notations introduites dans les paragraphes précédents, on note $\phi_{|\Lambda|}$ pour $M \in \mathcal{M}_{|\Lambda|, |\Lambda|}(\mathbb{R})$ la semi-norme

$$\phi_{|\Lambda|}(M) = \frac{1}{|\Lambda|} \max_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} |\sigma^T M \sigma|$$

On voit immédiatement que si M correspond à une matrice J_Λ introduite précédemment on a :

$$\phi_{|\Lambda|}(J_\Lambda) \leq 2$$

en effet J_Λ possède au plus $4|\Lambda|$ éléments non nuls, égaux à $\pm 1/2$.

II.3.2 - Condition de Lipschitz

L'application : $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

$$(\beta, \gamma) \rightarrow f(J_\Lambda, \beta, \gamma)$$

est lipschitzienne et :

$$|f(J_\Lambda, \beta, \gamma) - f(J_\Lambda, \beta', \gamma')| \leq 2(|\beta - \beta'| + |\gamma - \gamma'|)$$

Démonstration :

$$\text{On pose } \beta(\varepsilon) = \beta + \varepsilon(\beta' - \beta)$$

$$\gamma(\varepsilon) = \gamma + \varepsilon(\gamma' - \gamma)$$

$$\frac{d}{d\varepsilon} f(J_\Lambda, \beta(\varepsilon), \gamma(\varepsilon)) = \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} ((\beta' - \beta)\sigma^T J_\Lambda \sigma + (\gamma' - \gamma)\sigma^T V_\Lambda) \exp(\beta(\varepsilon)\sigma^T J_\Lambda \sigma + \gamma(\varepsilon)\sigma^T V_\Lambda)}{\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} \exp(\beta(\varepsilon)\sigma^T J_\Lambda \sigma + \gamma(\varepsilon)\sigma^T V_\Lambda)}$$

$$\text{d'où : } \left| \frac{d}{d\varepsilon} f(J_\Lambda, \beta(\varepsilon), \gamma(\varepsilon)) \right| \leq |\beta' - \beta| \phi_{|\Lambda|}(J_\Lambda) + |\gamma' - \gamma|$$

$$\text{et } |f(J_\Lambda, \beta', \gamma') - f(J_\Lambda, \beta, \gamma)| = \left| \int_0^1 \frac{d}{d\varepsilon} f(J_\Lambda, \beta(\varepsilon), \gamma(\varepsilon)) d\varepsilon \right|$$

ce qui est donc majoré par :

$$|\beta' - \beta| \phi_{|\Lambda|}(J_\Lambda) + |\gamma' - \gamma| \leq 2(|\beta' - \beta| + |\gamma' - \gamma|)$$

II.3.3. - Convexité

$$\begin{aligned} \text{L'application : } & \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R} \\ & (\beta, \gamma) \rightarrow f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) \end{aligned}$$

est convexe en (β, γ) .

Démonstration

Soit $\rho \in [0, 1]$.

Considérons $f(J_{\Lambda}, \rho\beta_1 + (1-\rho)\beta_2, \rho\gamma_1 + (1-\rho)\gamma_2)$ qui est égal à :

$$\frac{1}{|\Lambda|} \log \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} \exp\{(\rho\beta_1 + (1-\rho)\beta_2)\sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \rho\gamma_1 + (1-\rho)\gamma_2 \sigma^T V_{\Lambda}\}$$

ce qui peut s'écrire :

$$\frac{1}{|\Lambda|} \log \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda|}} (\exp(\beta_1 \sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \gamma_1 \sigma^T V_{\Lambda}))^{\rho} (\exp(\beta_2 \sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \gamma_2 \sigma^T V_{\Lambda}))^{1-\rho}$$

d'après l'inégalité de Holder nous pouvons majorer cette quantité par :

$$\frac{1}{|\Lambda|} \log \left(\sum_{\sigma} (\exp(\beta_1 \sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \gamma_1 \sigma^T V_{\Lambda}))^{\rho} \right) \left(\sum_{\sigma} \exp(\beta_2 \sigma^T J_{\Lambda} \sigma + \gamma_2 \sigma^T V_{\Lambda}) \right)^{1-\rho}$$

ce qui est égal à :

$$\rho f(J_{\Lambda}, \beta_1, \gamma_1) + (1-\rho) f(J_{\Lambda}, \beta_2, \gamma_2)$$

II.3.4. - Propriété relative aux matrices de connexions

Pour deux matrices de connexions J_{Λ} et J'_{Λ} on a :

$$|f(J'_{\Lambda}, \beta, \gamma) - f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)| \leq |\beta| \Phi_{|\Lambda|} (J'_{\Lambda} - J_{\Lambda}).$$

Démonstration

Elle est identique à celle faite en II.3.2 en posant :

$$J_{\Lambda}(\varepsilon) = J_{\Lambda} + \varepsilon(J'_{\Lambda} - J_{\Lambda}).$$

III - L'ENERGIE LIMITE ([4])

III.1 - EXISTENCE POUR UN MODELE HOMOGENE

Nous allons montrer l'existence d'une énergie limite dans le cas d'un modèle homogène, c'est-à-dire dans le cas où $J_{ij} = J$. Plus précisément nous allons montrer qu'il existe une fonction $f(\beta, \gamma)$ telle que :

$$f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) \rightarrow f(\beta, \gamma)$$

$$\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^2$$

Van Hove

Nous indiquerons plus loin comment peut se généraliser cette propriété pour des modèles non homogènes.

Cette démonstration détaille en fait une démonstration qui figure dans [4] en utilisant des outils de calcul matriciel qui nous sont plus familiers.

III.1.1 - Lemme : union de deux parties disjointes

Soient Λ_1, Λ_2 deux parties finies disjointes de \mathbb{Z}^2 et $C(\Lambda_1, \Lambda_2)$ le nombre de connexions entre les sites de Λ_1 et ceux de Λ_2 .

Nous avons :

$$|\log Z(J_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Lambda_1}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Lambda_2}, \beta, \gamma)| \leq |\beta| C(\Lambda_1, \Lambda_2)$$

Démonstration

Ecrivons $Z(J_{\Lambda_1}, \beta, \gamma)$ sous la forme :

$$\sum_{\sigma_1 \in \mathcal{B}_{|\Lambda_1|}} \exp(\beta(\sigma_1, 0) \bar{J}_{\Lambda_1} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma(\sigma_1, 0)V)$$

avec

$$V = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{|\Lambda_1| + |\Lambda_2|} \quad \bar{J}_{\Lambda_1} = \left(\begin{array}{c|c} J_{\Lambda_1} & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right) \in \mathcal{M}_{|\Lambda_1| + |\Lambda_2|, |\Lambda_1| + |\Lambda_2|}(\mathbb{R})$$

et de même pour $Z(J_{\Lambda_2}, \beta, \gamma)$ avec

$$\bar{J}_{\Lambda_2} = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & J_{\Lambda_2} \end{array} \right)$$

La somme $\log Z(J_{\Lambda_1}, \beta, \gamma) + \log Z(J_{\Lambda_2}, \beta, \gamma)$ est alors égale à :

$$\log \left\{ \left(\prod_{\sigma_1 \in \mathcal{E}|\Lambda_1|} \exp(\beta(\sigma_1, 0) \bar{J}_{\Lambda_1} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma(\sigma_1, 0)V) \right) \times \left(\prod_{\sigma_2 \in \mathcal{E}|\Lambda_2|} \exp(\beta(0, \sigma_2) \bar{J}_{\Lambda_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_2 \end{pmatrix} + \gamma(0, \sigma_2)V) \right) \right\}.$$

Ceci est égal à :

$$\log \left(\prod_{\sigma_1 \in \mathcal{E}|\Lambda_1|} \exp([\beta(\sigma_1, 0) \bar{J}_{\Lambda_1} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ 0 \end{pmatrix} + (0, \sigma_2) \bar{J}_{\Lambda_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_2 \end{pmatrix}] + \gamma[(\sigma_1, 0) + (0, \sigma_2)]V) \right)$$

et en posant $\bar{J}_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} = \left(\begin{array}{c|c} J_{\Lambda_1} & 0 \\ \hline 0 & J_{\Lambda_2} \end{array} \right)$

La quantité précédente peut s'écrire :

$$\log \prod_{\sigma \in \mathcal{E}|\Lambda_1 \cup \Lambda_2|} \exp(\beta \sigma^T \bar{J}_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} \sigma + \gamma \sigma^T V)$$

Donc :

$$|\log Z(J_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}(\omega), \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Lambda_1}(\omega), \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Lambda_2}(\omega), \beta, \gamma)|$$

peut être majoré par : $|\beta| \Phi_{|\Lambda|} (J_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} - \bar{J}_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2})$. ($\Lambda \neq \Lambda_1 \cup \Lambda_2$)

$\Phi_{|\Lambda|} (J_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} - \bar{J}_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2})$ est majoré par la somme des valeurs absolues des éléments de $(J_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} - \bar{J}_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2})$ donc par $C(\Lambda_1, \Lambda_2)$.

III.1.2. - Corollaire : union de n parties disjointes

Soient $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_n$ n parties finies de \mathcal{Z}^2 deux à deux disjointes, $\Lambda = \bigcup_i \Lambda_i$ et $C(\Lambda_i, \Lambda_j)$ le nombre de liaisons entre sites de Λ_i et Λ_j

$$|\log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - \sum_{i=1}^n \log Z(J_{\Lambda_i}, \beta, \gamma)| \leq |\beta| \sum_{(i,j)} C(\Lambda_i, \Lambda_j) \quad (1)$$

(i,j) désigne un couple non ordonné.

Démonstration

C'est la généralisation évidente de la démonstration du lemme III.1.1

III.1.3. - Lemme : majoration de l'énergie

Soit Λ une partie finie de \mathbb{Z}^2 .

$$|f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)| \leq 2(|\beta| + |\gamma|) + \log 2$$

Démonstration

En appliquant la propriété II.3.2. on a :

$$|f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - f(J_{\Lambda}, 0, 0)| \leq 2(|\beta| + |\gamma|)$$

et d'après la définition de $f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)$ on voit que :

$$f(J_{\Lambda}, 0, 0) = \log 2.$$

III.1.4. - Lemme sur l'énergie d'un système carré

Notons $f_{C_r}(\beta, \gamma)$ la fonction $f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)$ lorsque Λ désigne un carré possédant horizontalement (et verticalement) r "rangées" de sites. A cause de l'homogénéité des liaisons ($J_{ij} = +J$), f_{C_r} est bien indépendant de la position du carré Λ .

On notera de même : $Z(J_{C_r}, \beta, \gamma)$.

On a la propriété

$$|f_{C_{pr}}(\beta, \gamma) - f_{C_r}(\beta, \gamma)| \leq \frac{2}{r} |\beta|$$

$$\forall \beta, \gamma \in \mathbb{R}$$

$$\forall r, p \in \mathbb{N}^*$$

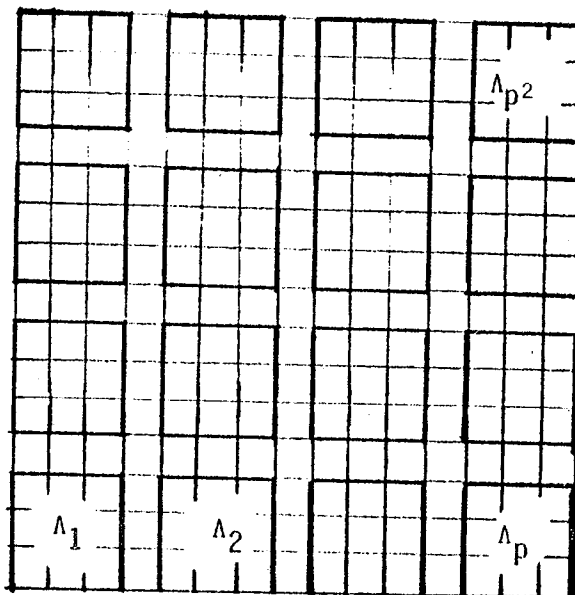
Démonstration

Partageons les $p^2 r^2$ sites d'un carré pr sur pr en p^2 carrés de r^2 sites :

$$\Lambda_1 \quad \Lambda_2 \quad \dots \quad \Lambda_{p^2}$$

de la manière indiquée sur le schéma ci-contre.

Par application du lemme III.1.2 il vient :



$$\begin{aligned}
 & \left| \log Z(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) - \frac{p^2}{\sum_{i=1}^{p^2}} \log Z(J_{\Lambda_i}, \beta, \gamma) \right| \\
 & \leq |\beta| (2(p-1)^2 r + 2(p-1)r) \leq 2 p^2 r |\beta|
 \end{aligned}$$

d'où :

$$\left| f_{C_{pr}}(\beta, \gamma) - f_{C_r}(\beta, \gamma) \right| \leq \frac{2}{r} |\beta|$$

en divisant par $p^2 r^2$ car $Z(J_{\Lambda_i}, \beta, \gamma) = Z(J_{C_r}, \beta, \gamma)$ $i = 1, \dots, p^2$

III.1.5. - Lemme : Approximation par des carrés

$\beta, \gamma \in \mathbb{R}$, $\varepsilon \in \mathbb{R}_+^*$, $r \in \mathbb{N}^*$ étant donnés, il existe $N_\varepsilon \in \mathbb{N}$ tel que :

pour tout $n \geq N_\varepsilon$, il existe un carré C_{pr} tel que :

$$\left| f_{C_n}(\beta, \gamma) - f_{C_{pr}}(\beta, \gamma) \right| \leq \varepsilon.$$

Démonstration

Pour $n \in \mathbb{N}^*$ posons $p = \mathbb{I}E(n/r)$ ce qui implique :

$$pr \leq n < pr+r$$

Pour un carré C_n considérons le sous-ensemble C_{pr} indiqué sur la figure et posons :

$$\Delta = C_n \setminus C_{pr}$$

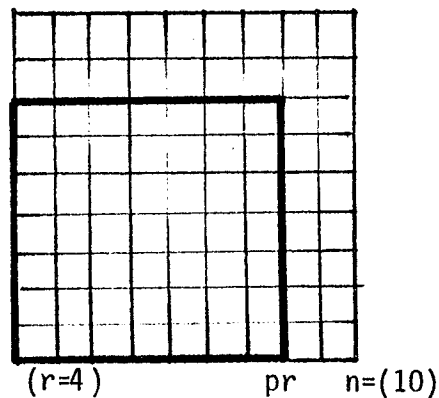
Considérons :

$$\left| \frac{1}{n^2} \log Z(J_{C_n}, \beta, \gamma) - \frac{1}{p^2 r^2} \log Z(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) \right|$$

que nous pouvons majorer par :

$$\frac{1}{n^2} \left| \log Z(J_{C_n}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) \right| + \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2 r^2} \right| \left| \log Z(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) \right|$$

En appliquant le lemme III.1.3 nous pouvons majorer la dernière valeur absolue par :



$$\frac{n^2 - p^2 r^2}{n^2 \cdot p^2 r^2} \times p^2 r^2 \times (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|)$$

donc par $(\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|) \times \frac{2}{p}$.

La première valeur absolue peut être majorée par :

$$\frac{1}{n^2} \{ |\log Z(J_{C_n}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma)| + |\log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma)| \}$$

ce qui est majoré (en appliquant les lemmes III.1.1., III.1.3) par :

$$\frac{1}{n^2} \times \{ |\beta| \times 2pr + (n^2 - p^2 r^2) \cdot (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|) \}$$

que nous majorons encore par :

$$\frac{2|\beta|}{pr} + \frac{2}{p} (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|)$$

Globalement notre première expression est donc plus petite que :

$$\frac{2|\beta|}{pr} + \frac{4}{p} (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|)$$

Nous pouvons choisir p_ϵ tel que cette quantité soit inférieure à ϵ et prendre $N_\epsilon = p_\epsilon r$ ce qui démontre le résultat.

III.1.6. - Convergence de l'énergie de sous-systèmes carrés

Soit $f(J_{C_n}, \beta, \gamma)$ la fonction d'énergie d'un sous-système carré de "côté" n . La suite de fonctions de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} .

$$\{f(J_{C_n}, \beta, \gamma)\}_{n \in \mathbb{N}}$$

est ponctuellement convergente pour $(\beta, \gamma) \in \mathbb{R}^2$.

Démonstration

Soient $(\beta, \gamma) \in \mathbb{R}^2$ et $\epsilon > 0$. Choisissons $r \in \mathbb{N}$ tel que : $\frac{2}{r}|\beta| \leq \epsilon/4$. En appliquant le lemme III.1.5 r étant fixé on peut choisir N_ϵ tel que pour tout entier n (resp. n') $\geq N_\epsilon$ il existe un carré C_{pr} (resp. $C_{p'r'}$) tel que :

$$|f(J_{C_n}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma)| \leq \epsilon/4$$

et la formule équivalente avec n' et p' .

En conséquence pour $n, n' \geq N_\epsilon$, $|f(J_{C_n}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{n'}}, \beta, \gamma)|$ est majoré par :

$$\begin{aligned} & |f(J_{C_{n'}}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{p'r'}}, \beta, \gamma)| + |f(J_{C_{p'r'}}, \beta, \gamma) - f(J_{C_r}, \beta, \gamma)| \\ & + |f(J_{C_r}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma)| + |f(J_{C_{pr}}, \beta, \gamma) - f(J_{C_n}, \beta, \gamma)|. \end{aligned}$$

En appliquant le lemme III.1.4 nous pouvons majorer cette quantité par :

$$\epsilon/4 + \frac{2}{r}|\beta| + \frac{2}{r}|\gamma| + \epsilon/4.$$

ce qui est inférieur à ϵ d'après le choix de r que nous avons fait.

Ceci prouve que la suite est une suite de Cauchy convergente vers $f(\beta, \gamma)$.

III.1.7. - Existence de l'énergie limite ([4])

$f(\beta, \gamma)$ étant la fonction définie au paragraphe précédent on a :

$$\begin{aligned} \forall (\beta, \gamma) \in \mathbb{R}^2 : f(J_\Lambda, \beta, \gamma) &\rightarrow f(\beta, \gamma) \\ \Lambda &\rightarrow \mathbb{Z}^2 \quad * \\ \text{(Van Hove)} & \end{aligned}$$

Démonstration

Soit $(\beta, \gamma) \in \mathbb{R}^2$. Posons $M = (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|)$.

Soit $\epsilon > 0$. Choisissons d'abord $\alpha \in \mathbb{N}^*$ tel que :

$$|f(J_{C_\alpha}, \beta, \gamma) - f(\beta, \gamma)| \leq \epsilon/3$$

Soit $a = (\alpha, \alpha)$

$$T(a) = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{Z}^2 : 0 \leq x_1 < \alpha, 0 \leq x_2 < \alpha\}$$

$$T_n(a) = T(a) + n(\alpha, \alpha) \quad n \in \mathbb{Z}^2$$

Pour $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$, Λ fini, on rappelle que :

* On note $\Lambda = \{\Lambda_i\} \rightarrow \mathbb{Z}^2$ ou l'on peut préciser $\Lambda_i \rightarrow \mathbb{Z}^2$
 $i \rightarrow \infty$

$N_a^+(\Lambda) = \text{Nombre de } T_n(a) : T_n(a) \cap \Lambda \neq \emptyset$

$N_a^-(\Lambda) = \text{Nombre de } T_n(a) : T_n(a) \subset \Lambda.$

On rappelle que si $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^2$ on a :

Van Hove

$$N_a^-(\Lambda) \rightarrow +\infty$$

$$N_a^-(\Lambda)/N_a^+(\Lambda) \rightarrow 1$$

Si on pose $\Delta = \Lambda - \bigcup_{i=1}^{N_a^-(\Lambda)} T_i$ (on pose T_i pour $T_i(a)$)

les T_i désignant les carrés inclus dans Λ , on a en appliquant le lemme III.1.2.

$$\begin{aligned} & |\log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{T_1}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{T_2}, \beta, \gamma) - \dots - \log Z(J_{T_{N_a^-(\Lambda)}}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma)| \quad (*) \\ & \leq N_a^-(\Lambda) \times |\beta| \times 4\alpha \end{aligned}$$

(en effet il ne peut y avoir plus de 4α connexions entre un carré et une partie disjointe).

De plus en appliquant le lemme III.1.3 :

$$|\log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma)| \leq \alpha^2 (N_a^+(\Lambda) - N_a^-(\Lambda)) (\log 2 + 2|\beta| + 2|\gamma|) \quad (**)$$

Cherchons à majorer :

$$|f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{\alpha}}, \beta, \gamma)| = \left| \frac{1}{|\Lambda|} \log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - \frac{1}{\alpha^2} \log Z(J_{C_{\alpha}}, \beta, \gamma) \right|$$

Commençons par majorer par :

$$\left| \frac{1}{|\Lambda|} - \frac{1}{N_a^-(\Lambda)\alpha^2} \right| |\log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma)| + \frac{1}{N_a^-(\Lambda)\alpha^2} |\log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - N_a^-(\Lambda) \log Z(J_{C_{\alpha}}, \beta, \gamma)|$$

En utilisant le lemme III.1.3. nous pouvons majorer la première valeur absolue par :

$$\frac{(N_a^+(\Lambda) - N_a^-(\Lambda))\alpha^2}{(N_a^-(\Lambda))^2 \alpha^4} \cdot N_a^+(\Lambda) \cdot \alpha^2 \cdot M$$

donc
$$\left(\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)} - 1\right) \left(\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)}\right) M$$

La seconde valeur absolue est plus petite que :

$$\frac{1}{N_a^-(\Lambda)} \times \frac{1}{\alpha^2} \left\{ \left| \log Z(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - \sum_{i=1}^{N_a^-(\Lambda)} \log Z(J_{T_i}, \beta, \gamma) - \log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma) \right| + \left| \log Z(J_{\Delta}, \beta, \gamma) \right| \right\}$$

ce qui se majore (en utilisant * et **) par :

$$\frac{1}{N_a^-(\Lambda)} \cdot \frac{1}{\alpha^2} N_a^-(\Lambda) \cdot |\beta| \cdot 4\alpha + \left(\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)} - 1\right) M.$$

Nous pouvons donc écrire :

$$\left| f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - f(\beta, \gamma) \right| \leq \left| f(J_{\Lambda}, \beta, \gamma) - f(J_{C_{\alpha}}, \beta, \gamma) \right| + \left| f(J_{C_{\alpha}}, \beta, \gamma) - f(\beta, \gamma) \right|$$

La première valeur absolue étant majorée par :

$$\left(\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)} - 1\right) \left(\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)} + 1\right) M + \frac{4|\beta|}{\alpha}$$

On peut imposer la condition supplémentaire à α :

$$\frac{4|\beta|}{\alpha} \leq \epsilon/3$$

Ce α étant fixé nous savons que :

$$\frac{N_a^+(\Lambda)}{N_a^-(\Lambda)} \rightarrow 1$$

$$\Lambda \rightarrow \infty$$

Van Hove

ce qui nous prouve que pour Λ "assez grand" nous pouvons imposer :

$$\left(\frac{N_a^+(\lambda)}{N_a^-(\lambda)} - 1\right) \left(\frac{N_a^+(\lambda)}{N_a^-(\lambda)} + 1\right) M \leq \epsilon/3$$

Et nous avons alors :

$$|f(J_{\Lambda, \beta, \gamma}) - f(\beta, \gamma)| \leq \epsilon$$

ce qui démontre le résultat.

III.1.8. - Propriétés : Convexité et condition de Lipschitz de l'énergie limite

L'énergie limite : $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

$$(\beta, \gamma) \rightarrow f(\beta, \gamma)$$

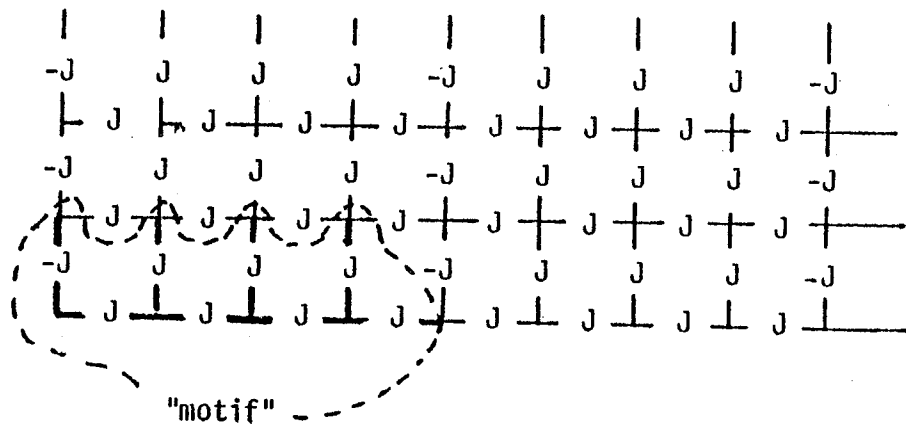
est une fonction convexe lipschitzienne .

Démonstration

Cela résulte des propriétés II.3.2, II.3.3. (la constante de lipschitz étant la même pour tous les systèmes finis).

III.2 - ENERGIE LIMITE DE SYSTEMES "PERIODIQUES"

Nous traiterons dans le chapitre VI de systèmes où un "motif" de connexions se répète horizontalement avec une période p et verticalement avec une période q ; voici un exemple avec p = 4 q = 1.



D'autres exemples figurent au chapitre VI.

Toutes les démonstrations du paragraphe III.1 se transcrivent en remplaçant le carré de base C_n par un rectangle p_n "sur" q_n qui confère à la fonction $Z(J_{R_{p_n, q_n}}, \beta, \gamma)$ la propriété d'invariance par rapport à la position de rectangle dans \mathbb{Z}^2 .

III.3 - MODIFICATION ASYMPTOTIQUEMENT NEGLIGEABLE ([3])

Dans ce paragraphe nous considérons le réseau \mathbb{Z}^2 et un ensemble de valeurs de connexions $\pm J$.

Considérons une suite de parties finies Λ_n de \mathbb{Z}^2 et les matrices de connexions associées $J_{\Lambda_n} \in \mathcal{M}_{|\Lambda_n|, |\Lambda_n|}(\mathbb{R})$

Nous supposons que la suite de fonctions :

$$f(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma)$$

converge ponctuellement vers $f(\beta, \gamma)$.

III.3.1. - Modification des connexions

Soit $\phi_{|\Lambda_n|}$ la semi-norme sur $\mathcal{M}_{|\Lambda_n|, |\Lambda_n|}(\mathbb{R})$ introduite au paragraphe II.3.1 :

$$\phi_{|\Lambda_n|}(M) = \frac{1}{|\Lambda|} \max_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda_n|}} |\sigma^T M \sigma| \quad *$$

Soit $\{\bar{J}_{\Lambda_n}\}$ une famille de matrices de $\mathcal{M}_{|\Lambda_n|, |\Lambda_n|}(\mathbb{R})$ vérifiant :

$$\phi_{|\Lambda_n|}(\bar{J}_{\Lambda_n} - J_{\Lambda_n}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

Propriété

La suite de fonctions :

$$(\beta, \gamma) \rightarrow f(\bar{J}_{\Lambda_n}, \beta, \gamma)$$

converge ponctuellement vers $f(\beta, \gamma)$

* $\mathcal{E}_{|\Lambda_n|} = \{-1, 1\}^{|\Lambda_n|}$

Démonstration

Le lemme II.3.4 nous permet d'écrire :

$$|f(\bar{J}_{\Lambda_n}, \beta, \gamma) - f(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma)| \leq |\beta| \Phi(\bar{J}_{\Lambda_n} - J_{\Lambda_n})$$

d'où la conclusion.

Application : Remplacement d'un carré par un tore

Cela correspond à une utilisation classique en physique qui a pour objet de rétablir l'invariance par translation sur un système homogène fini par exemple. Ce type de transformation rétablit toujours un certain nombre de symétries.

Considérons par exemple un carré C_n et soit J_{C_n} la matrice des connexions associée. Numérotons les sites de gauche à droite et de bas en haut et construisons la matrice \bar{J}_{C_n} de connexions obtenue en ajoutant :

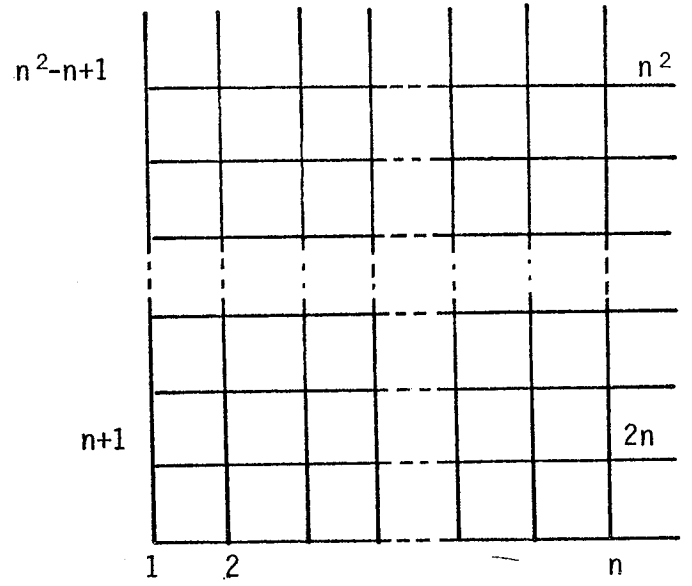
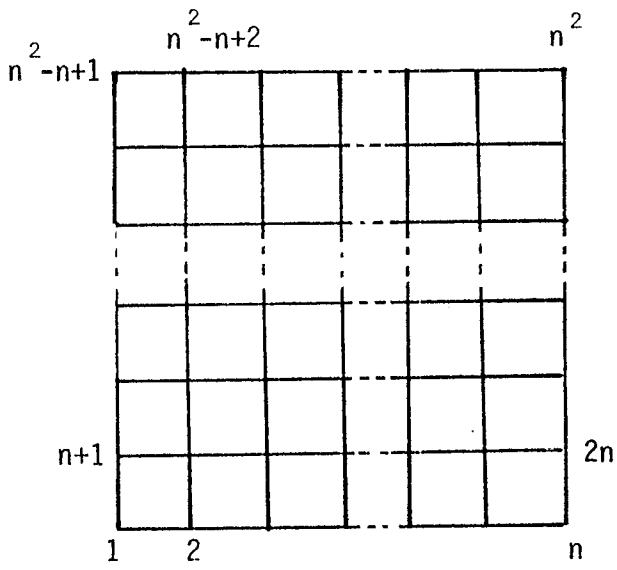
- les liaisons horizontales à droites des sites $n, 2n, \dots, n^2$ comme des liaisons entre les couples de sites $(1, n), (n+1, 2n), \dots, (n^2-n+1, n^2)$.
- les liaisons verticales en haut des sites $n^2-n+1, n^2-n+2, \dots, n^2$ comme des liaisons entre les couples de sites $(1, n^2-n+1), (2, n^2-n+2), \dots, (n, n^2)$.

On remarque immédiatement que

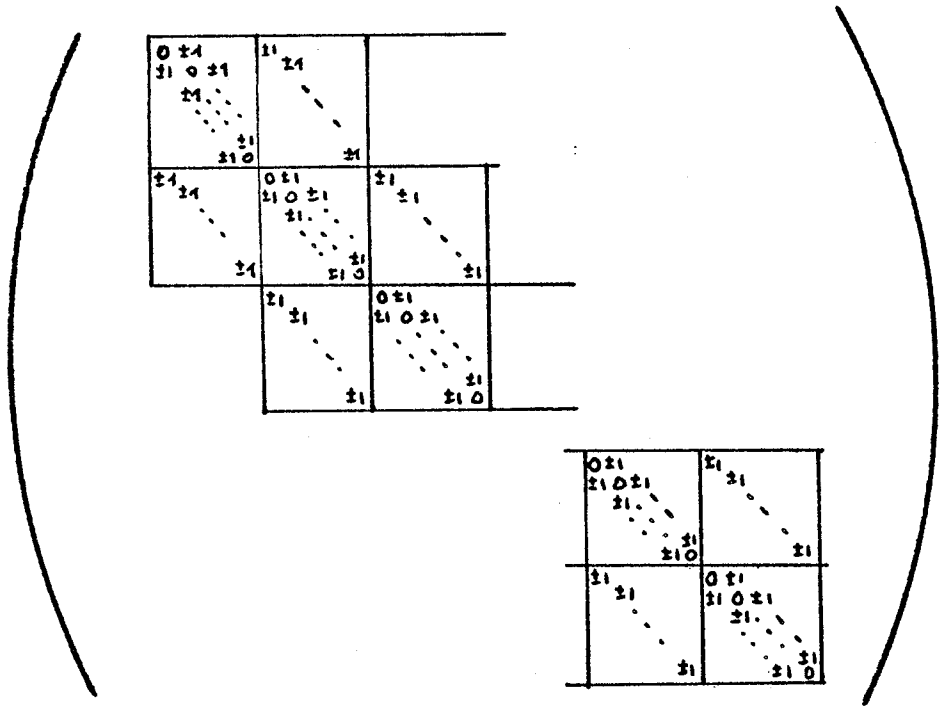
$$\Phi |C_n| (J_{C_n} - \bar{J}_{C_n}) \leq \frac{2n}{n^2} = \frac{2}{n}$$

ce qui démontre le résultat.

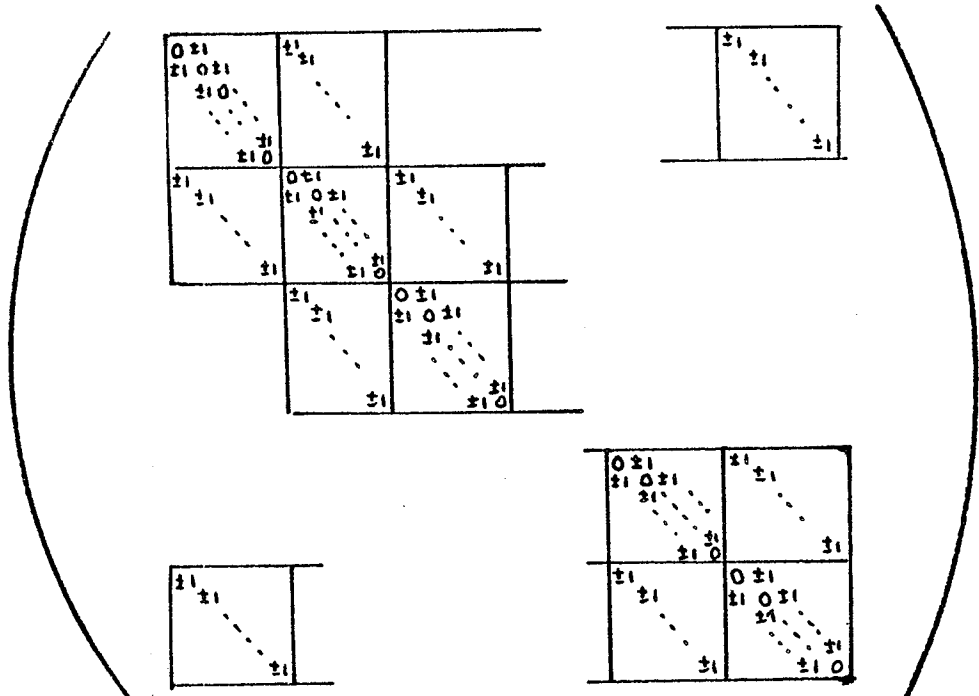
Ce résultat peut être utilisé pour différents Λ_n (carrés, rectangles, ...).



$J_{C_n} = 1/2$



$\overline{J}_{C_n} = 1/2$



III.3.2. - Modification de l'ensemble de sommation

Nous nous plaçons dans les hypothèses introduites au début de ce paragraphe III.

Rappelons la définition des fonctions d'énergie :

$$f(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma) = \frac{1}{|\Lambda_n|} \log \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|\Lambda_n|}} \exp(\beta \sigma^T J_{\Lambda_n} \sigma + \gamma \sigma^T V_{\Lambda_n})$$

Nous voulons modifier l'ensemble de sommation $\mathcal{E}_{|\Lambda_n|}$ en $\bar{\mathcal{E}}_{|\Lambda_n|}$ et remplacer $f(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma)$ par :

$$\bar{f}(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma) = \frac{1}{|\Lambda_n|} \log \sum_{\sigma \in \bar{\mathcal{E}}_{|\Lambda_n|}} \exp(\beta \sigma^T J_{\Lambda_n} \sigma + \gamma \sigma^T V_{\Lambda_n})$$

Propriété

Une condition nécessaire et suffisante pour que

$$\bar{f}(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma) \rightarrow f(\beta, \gamma) \quad (= \lim_{n \rightarrow +\infty} f(J_{\Lambda_n}, \beta, \gamma))$$

est que :

$$\left(\frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\Lambda_n}} \exp(\beta \sigma^T J_{\Lambda_n} \sigma + \gamma \sigma^T V_{\Lambda_n})}{\sum_{\sigma \in \bar{\mathcal{E}}_{\Lambda_n}} \exp(\beta \sigma^T J_{\Lambda_n} \sigma + \gamma \sigma^T V_{\Lambda_n})} \right) \frac{1}{|\Lambda_n|} \rightarrow 1$$

$n \rightarrow +\infty$

La démonstration est évidente.

Exemple : Périodicité des spins sur des réseaux carrés

Considérons comme au paragraphe III.3.1 un carré C_n avec la même numérotation des sites. Posons :

$$\bar{\mathcal{E}}_{|C_n|} = \{ \bar{\sigma} \in \mathcal{E}_{|C_n|} : \bar{\sigma}_{in+1} = \bar{\sigma}_{(i+1)n} \quad i = 0, \dots, n-1 \}$$

ce qui correspond à une condition d'égalité des spins sur les bords verticaux

Nous allons montrer que $\bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}$ vérifie bien la condition de la propriété.

Démonstration

A chaque $\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}$ associons :

$$\mathcal{E}_{|C_n|}^{\bar{\sigma}} = \{ \sigma \in \mathcal{E}_{|C_n|} : \sigma_i = \bar{\sigma}_i \quad \forall i \notin \{n, 2n, \dots, n^2\} \}$$

$\mathcal{E}_{|C_n|}^{\bar{\sigma}}$ contient 2^n éléments. Pour $\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}$ et $\sigma \in \mathcal{E}_{|C_n|}^{\bar{\sigma}}$ nous avons :

$$\frac{\exp(\beta \sigma^T J_n \sigma + \gamma \sigma^T V)}{\exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)} = \exp(\beta (\sigma^T J_n \sigma - \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma}) + \gamma (\sigma - \bar{\sigma})^T V)$$

mais

$$|\sigma^T J_n \sigma - \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma}| \leq 4n-2$$

car l'énergie d'interaction diffère seulement sur les $2n-1$ liaisons aboutissant aux sites $\{n, 2n, \dots, n^2\}$.

D'autre part : $|(\sigma - \bar{\sigma})^T V| \leq 2n$.

Nous avons donc :

$$\frac{\exp(\beta \sigma^T J_n \sigma + \gamma \sigma^T V)}{\exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)} \leq \exp(|\beta| (4n-2) + |\gamma| 2n) \leq (\exp 4|\beta| + 2|\gamma|)^n$$

Donc en écrivant :

$$\frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|C_n|}} \exp(\beta \sigma^T J_n \sigma + \gamma \sigma^T V)}{\sum_{\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}} \exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)} = \frac{\sum_{\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{|C_n|}^{\bar{\sigma}}} \exp(\beta \sigma^T J_n \sigma + \gamma \sigma^T V)}{\sum_{\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}} \exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)}$$

Nous avons la majoration :

$$\frac{\sum_{\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}} \exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V) (\exp 4|\beta| + 2|\gamma|)^{n^2}}{\sum_{\bar{\sigma} \in \bar{\mathcal{E}}_{|C_n|}} \exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)}$$

qui est égale à : $(2 \exp (4|\beta| + 2|\gamma|))^n$

Il en résulte que :

$$1 \leq \left(\frac{\sum_{\sigma \in \mathcal{C}_n} \exp(\beta \sigma^T J_n \sigma + \gamma \sigma^T V)}{\sum_{\bar{\sigma} \in \mathcal{C}_n} \exp(\beta \bar{\sigma}^T J_n \bar{\sigma} + \gamma \bar{\sigma}^T V)} \right)^{1/n^2} \\ \leq (2 \exp(4|\beta| + 2|\gamma|))^{1/n}$$

ce qui démontre que la quantité encadrée tend vers 1 et vérifie donc les hypothèses de la propriété III.3.2.

IV.2.3. - Autres exemples

On peut sans problèmes imposés aux spins des bords verticaux, horizontaux d'être égaux opposés ... On peut aussi imposer des relations entre la configuration de la première et de la dernière rangée de spins...

IV - LE CONCEPT DE FRUSTATION ([5],[6])

Les modèles à connexions $J_{ij} = \pm J$ dans lesquels le paramètre I introduit au paragraphe II.2, est nul sont au centre de ce travail. Ils seront cités en abrégé modèles "Verres de spins". En fait il s'agit de simplification de modèles portant aussi le nom de verre de spins mais plus complexes.

Nous allons donner les traits spécifiques de ce modèle simplifié qui a une importance considérable en physique. Nous ne parlons pas de l'aspect probabiliste au centre du vrai problème de "Verres de Spins" ([7]).

IV-1 - INVARIANCE LOCALE ([5])

Considérons la matrice des connexions J_{C_n} d'un "verre de Spin" (avec $I = 0$) et sa fonction de partition

$$Z(J_{C_n}, \beta, 0) = \sum_{\sigma \in \mathcal{C}_n} \exp(\beta \sigma^T J_{C_n} \sigma)$$

C_n étant un carré de côté n .

Soit Δ une application linéaire de \mathbb{R}^{n^2} sur \mathbb{R}^{n^2} inversible, orthogonale ($\Delta^{-1} = \Delta^T$) et biunivoque de $\{-1,1\}^{n^2} = \mathcal{E}_{|C_n|}$. Δ sera représenté par sa matrice de $\mathcal{M}_{|C_n|, |C_n|}(\mathbb{R})$. (Δ appartient en fait au groupe d' l'hypercube).

Propriétés d'invariance

$$Z(\Delta^{-1} J_{C_n} \Delta, \beta, 0) = Z(J_{C_n}, \beta, 0)$$

Démonstration

Il suffit de remarquer que :

$$\sigma^T (\Delta^{-1} J_{C_n} \Delta) \sigma = \sigma^T \Delta^T J_{C_n} \Delta \sigma = (\Delta \sigma)^T J_{C_n} (\Delta \sigma)$$

et que $\Delta \sigma$ décrit $\mathcal{E}_{|C_n|}$ lorsque σ décrit $\mathcal{E}_{|C_n|}$

Transformation invariante locale

Considérons la matrice diagonale Δ de $\mathcal{M}_{|C_n|, |C_n|}(\mathbb{R})$ dont tous les éléments diagonaux sont égaux à +1 sauf la ième qui est égal à -1 :

$$\Delta = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix}$$

La matrice $\Delta^{-1} J_{C_n} \Delta$ correspond à un nouveau réseau où toutes les liaisons aboutissant au site i ont été changées de signe.



IV.2 - TRANSFORMATIONS CANONIQUES

Nous appellerons transformation canonique tout produit de transformations invariantes locales. Toute transformation canonique pourra être représentée par une matrice diagonale à éléments diagonaux égaux à ± 1 .

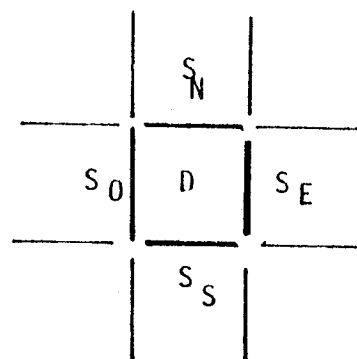
IV.3 - PLAQUETTES FRUSTREES

Définition

Nous appellerons "plaquette" un ensemble de 4 liaisons conformes au schéma ci-contre.

Soient $S_E S_N S_O S_S$ les valeurs des liaisons sur les bords de cette "plaquette".

Nous appellerons "frustration" de la plaquette le signe du produit $S_E S_N S_O S_S$. Si ce signe est négatif la plaquette sera dite "frustrée".



plaquette "P"

Propriété

La frustration d'une plaquette est invariante par toute transformation canonique.

Démonstration

Il suffit de remarquer que toute transformation invariante locale ne modifie le signe que d'un nombre pair (0 ou 2) de liaisons d'une plaquette.

IV.4 - FORME CANONIQUE D'UN "VERRE DE SPIN" SUR UN CARRE $n \times n$ NON PERIODIQUE

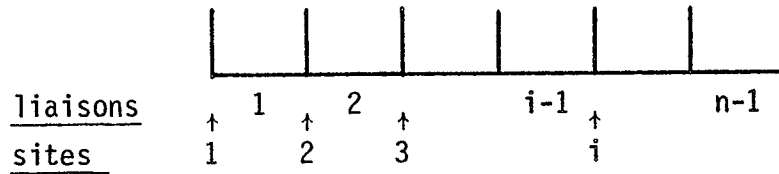
Réduction à la forme canonique

J_{C_n} étant la matrice des connexions d'un "verre de spin" sur un réseau carré $n \times n$, il existe une transformation canonique Δ telle que $\Delta^{-1} J_{C_n} \Delta$ soit la matrice de connexion d'un "verre de spin" sur un réseau carré non périodique C_n où :

- 1) toutes les liaisons verticales sont positives.
- 2) la première rangée (*) de liaisons horizontales est formée uniquement de liaisons positives.

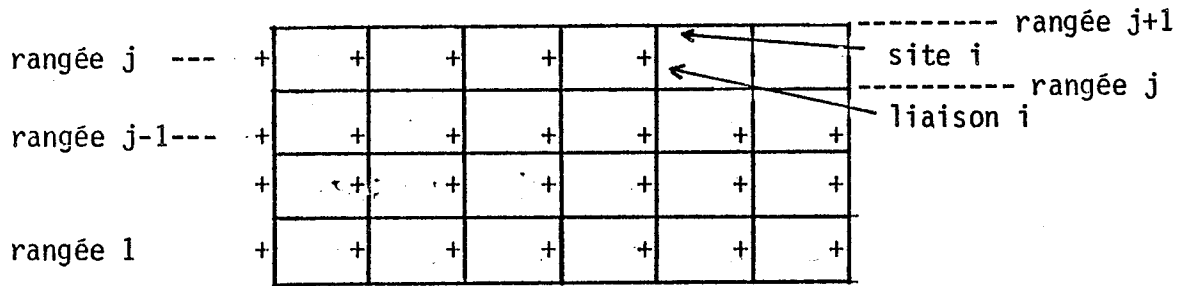
Démonstration

Commençons par la première rangée de liaisons horizontales :



Raisonnons par récurrence sur les liaisons numérotées de gauche à droite. Supposons que toutes les liaisons 1, 2, ..., i-2 aient été rendues positives. Si la liaison i-1 est négative, on applique la "transformation invariante locale" au site i et on passe à la liaison i.

Supposons maintenant que toutes les liaisons verticales dans les j-1 premières rangées soient égales à +1 et occupons nous de la j ème rangée



rangées de liaisons
verticales

rangées de sites

Il est trivial de voir que l'on peut changer le signe de la ième liaison (de la j ème rangée de liaisons verticales) en effectuant la "transformation invariante locale" relative au ième site (de la j+1ème rangée de sites) et la rendre positive si nécessaire.

(*) Dans la démonstration la première rangée est celle du bas en fait le choix de la rangée est sans importance.

IV.5 - PROPRIETE : forme canonique et frustration

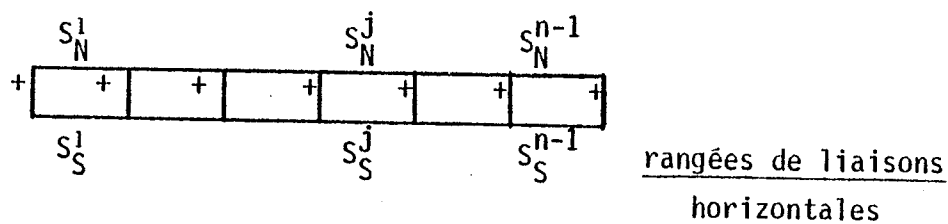
La fonction de partition $Z(J_{C_n}, \beta, 0)$ d'un verre de spin sur un réseau carré C_n non périodique ne dépend que de la données des frustrations des plaquettes .

Démonstration

Après avoir réduit J_{C_n} à sa forme canonique $J_{C_n}^C$ d'après la transformation précédente nous avons donc :

$$Z(J_{C_n}, \beta, 0) = Z(J_{C_n}^C, \beta, 0)$$

Or il est facile de voir que les valeurs des liaisons qui n'ont pas été imposées dans $J_{C_n}^C$ sont déterminées par la frustration des plaquettes. En effet la première rangée de liaisons horizontales est déterminée, et supposons-les déterminées jusqu'à la j ème rangée.



Pour la j ème plaquette les deux liaisons verticales étant positives et la liaison horizontale du bord bas ayant une valeur fixée S_S^j , la valeur de la liaison S_N^j est déterminée par

$$\text{Signe}(S_S^j \times S_N^j \times 1 \times 1) = \text{frustration de la } j\text{ème plaquette.}$$

CHAPITRE II

APPROXIMATION D'UNE FONCTION CONVEXE LIPSCHITZIENNE ET DE SES SINGULARITES

Présentation du chapitre

J'entreprend ici une étude mathématique des fonctions d'énergie que nous prendrons sous la forme :

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n(e^t) \quad t \in \mathbb{R}$$

où les P_n sont des polynômes à coefficients positifs.

Si les z_j^n sont racines distinctes des P_n on peut définir une mesure de répartition de racines :

$$\mu_n = \sum_{x+iy \in \{z_j^n\}} \frac{\alpha_j^n}{n} \delta(x,y)$$

où α_j^n est la multiplicité de la racine z_j^n .

$$\text{On peut écrire : } \frac{1}{n} \log P_n(e^t) = \int_{\mathbb{R}^2} \log((e^t - x)^2 + y^2) d\mu_n(x,y)$$

(P_n est à coefficients positifs et donc à racines conjuguées deux à deux).
et il est bien tentant d'écrire lorsque la mesure limite existe :

$$f(t) = \int_{\mathbb{R}^2} \log((e^t - x)^2 + y^2) d\mu(x,y)$$

Cela est démontré rigoureusement dans certains cas particuliers. Dans un cadre plus général des problèmes se posent :

- 1) En quel sens peut-on parler de mesure limite ?
- 2) Comment intervient la positivité des coefficients car le résultat n'est pas vrai pour un polynôme à coefficients réels quelconques comme le prouve l'exemple suivant :

$$P_n(z) = z^{n-2}(z^2 - 2z + 1 + e^{-2n})$$

les racines sont : $z = 0$ multiplicité $n-2$
 $z = 1 + ie^{-n}$
 $z = 1 - ie^{-n}$ } multiplicité 1

La mesure limite (en bien des sens) ne peut être qu'une masse de Dirac +1 en $(0,0)$. La limite devrait être :

$$f(t) = \int_{\mathbb{R}^2} \log((e^t - x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y) = t$$

Or regardons :

$$\frac{1}{n} \log P_n(1) = \frac{1}{n} \log(e^{-2n}) = -2$$

et

$$f(0) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} P_n(e^0) = -2$$

ce qui ne coïncide pas avec la valeur de l'expression intégrale.

On verra que le point essentiel est que les racines d'un polynôme à coefficients positifs ne peuvent être "aussi près" que l'on veut de l'axe réel positif. Dans cet exemple les racines $1 \pm ie^{-n}$ s'accroissent trop vite au point 1.

Le chapitre commence par un théorème de caractérisation d'une fonction convexe lipschitzienne comme limite d'une suite de fonctions

$$\frac{1}{n} \log P_n(e^t)$$

où les P_n sont des polynômes à coefficients positifs construits à partir de valeur de la fonction. L'originalité de ce procédé d'approximation est que les approximants sont définis dans un voisinage complexe de l'axe réel et que les singularités réelles de la fonction sont points d'accumulation de singularités complexes de la suite des approximants : cette propriété d'accumulation est une conséquence immédiate de l'expression intégrale citée plus haut mais elle a été démontrée directement et est très utilisée en Physique Statistique ([1]), dans le cas où les P_n sont donnés et non pas la fonction f .

La deuxième partie de ce chapitre sera consacrée à l'approximation des singularités de fonctions convexes lipschitziennes illustrée avec quelques exemples.

I. APPROXIMATION D'UNE FONCTION CONVEXE LIPSCHITZIENNE *

I.0. NOTATIONS

Soit E l'ensemble des fonctions f de la variable réelle définie par la propriété (P_E) :

Il existe une suite de polynômes à coefficients positifs (et non tous nuls) $\{P_n^f\}$ et une constante réelle C^f tels que :

$$d^{\circ} P_n^f < n C^f \quad n \in \mathbb{N} \quad \left. \vphantom{d^{\circ} P_n^f} \right\} (P_E)$$

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \quad t \in \mathbb{R}$$

Soit F l'ensemble des fonctions f de la variable réelle définie par la propriété (P_F) :

Il existe $C \in \mathbb{R}$ et $g \in E$ tels que :

$$f(t) = C t + g(t) \quad t \in \mathbb{R} \quad \left. \vphantom{f(t)} \right\} (P_F)$$

I.1. CARACTERISATION DE E Théorème I.1

Soit E l'ensemble des fonctions réelles de la variable réelle vérifiant (P_E) (I.0.). Nous avons :

$$E = \{f \mid f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ convexe, non décroissante, lipschitzienne}\}$$

Démonstration :

i) Montrons d'abord que $f \in E$ vérifie les propriétés - annoncées et pour cela posons :

$$d^{\circ} P_n^f = d_n \quad (< n C^f \quad C^f > 0)$$

$$P_n^f(z) = \sum_{i=0}^{d_n} a_i^n z^i \quad a_i^n > 0$$

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \quad t \in \mathbb{R}$$

* Le reste du chapitre est constitué par le texte de l'article "Un procédé d'approximation d'une fonction convexe lipschitzienne et de ses singularités" à paraître dans RAIRO ANALYSE NUMERIQUE/NUMERICAL ANALYSIS, AFCET (BORDAS DUNOD)

f est convexe

$$P_n^f(e^{\frac{t+u}{2}}) = \sum_{i=0}^{d_n} a_i^n (e^{\frac{t+u}{2}})^i = \sum_{i=0}^{d_n} a_i^n ((e^t)^i)^{1/2} ((e^u)^i)^{1/2}$$

$$0 < P_n^f(e^{\frac{t+u}{2}}) < \left(\sum_{i=0}^{d_n} a_i^n (e^t)^i \right)^{1/2} \left(\sum_{i=0}^{d_n} a_i^n (e^u)^i \right)^{1/2}$$

d'où :

$$\frac{1}{n} \log P_n^f(e^{\frac{t+u}{2}}) < \frac{1}{2n} \log P_n^f(e^t) + \frac{1}{2n} \log P_n^f(e^u)$$

$$f_n\left(\frac{t+u}{2}\right) < \frac{1}{2} f_n(t) + \frac{1}{2} f_n(u)$$

et le résultat en passant à la limite.

f est non-décroissante car les f_n sont non-décroissantes.

f est lipschitzienne

Nous pouvons écrire :

$$f_n(t) - f_n(u) = (t-u) f_n'(\xi) = (t-u) \frac{e^{\xi} (P_n^f)'(e^{\xi})}{n P_n^f(e^{\xi})}, \quad \xi \in (t, u)$$

avec

$$0 < e^{\xi} (P_n^f)'(e^{\xi}) =$$

$$e^{\xi} \sum_{i=1}^{d_n} i a_i^n (e^{\xi})^{i-1} = \sum_{i=1}^{d_n} i a_i^n (e^{\xi})^i < d_n P_n^f(e^{\xi})$$

$$\text{donc : } |f_n(t) - f_n(u)| < |t-u| \frac{d_n}{n} < C^f |t-u|$$

d'où le résultat par passage à la limite.

ii) Réciproquement, considérons une fonction f convexe, non-décroissante, lipschitzienne de constante C et

nous allons construire une suite de polynômes P_n^f à coefficients positifs (non tous nuls) et une constante C^f vérifiant :

$$d^\circ P_n^f < n C^f \quad n \in \mathbb{N}$$

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \quad t \in \mathbb{R}.$$

Soit $I_n = [-\log n, +\log n]$ divisé en n sous-intervalles égaux avec $t_i = -\log n + 2i \frac{\log n}{n}$, $i=0,1,\dots,n$

Sur l'intervalle $[t_i, t_{i+1}]$ considérons l'interpolation linéaire de f :

$$\lambda_i(t) = f(t_i) + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} (t - t_i)$$

$$\lambda_i(t) = \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} t$$

Choisissons $p_i = \mathbb{E} \left(n \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \right)$ (\mathbb{E} étant la fonction partie entière) et posons :

$$\lambda_i(t) = \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} + \frac{p_i}{n} t$$

Pour $t \in [t_i, t_{i+1}]$ nous avons :

$$0 < \lambda_i(t) - f(t) = f(t_i) + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} (t - t_i) - f(t)$$

$$0 < \lambda_i(t) - f(t) = f(t_i) - f(t) + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} (t - t_i)$$

f étant lipschitzienne de constante C :

$$0 < \lambda_i(t) - f(t) < C |t_i - t| + C |t - t_i|$$

$$0 < \lambda_i(t) - f(t) < 4 C \frac{\log n}{n}$$

Il résulte de la convexité de f que :

$$\lambda_i(t) - f(t) < 0 \quad t \notin [t_i, t_{i+1}]$$

Et en conséquence, pour tout point t de I_n nous avons :

$$0 < \max_{i=0, 1, \dots, n-1} \lambda_i(t) - f(t) < \frac{4C \log n}{n} \quad (1)$$

De par la définition de λ_i nous avons :

$$\lambda_i(t) - \lambda_i(t) = \left(\frac{P_i}{n} - \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \right) t$$

$$\text{d'où } |\lambda_i(t) - \lambda_i(t)| < \frac{|t|}{n} < \frac{\log n}{n} \quad t \in I_n$$

et :

$$\left| \max_{i=0, \dots, n-1} \lambda_i(t) - \max_{i=0, \dots, n-1} \lambda_i(t) \right| < \frac{\log n}{n}, \quad t \in I_n \quad (2)$$

Les inégalités (1) et (2) permettent d'écrire :

$$\left| \max_{i=0, 1, \dots, n-1} \lambda_i(t) - f(t) \right| < (4C+1) \frac{\log n}{n}, \quad t \in I_n \quad (3)$$

Ecrivons λ_i sous la forme :

$$\lambda_i(t) = \alpha_i + \frac{P_i}{n} t \quad \left(\alpha_i = \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} \right)$$

et considérons le polynôme :

$$P_n^f(z) = \sum_{i=0}^{n-1} e^{n\alpha_i} z^{P_i}$$

Nous avons d'abord :

$$P_i = \mathbb{E} \left(n \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \right) < \mathbb{E} (n C^f)$$

et donc en posant $C^f = C$ nous avons :

$$\text{d}^\circ P_n^f < n C^f, \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Pour t fixé posons :

$$\lambda_{i_t}(t) = \text{Max}_{i=0,1,\dots,n-1} \lambda_i(t)$$

nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log e^{n \text{Max}_i \lambda_i(t)} &< \frac{1}{n} \log \sum_{i=0}^{n-1} e^{n \lambda_i(t)} = \\ &= \frac{1}{n} \log e^{n \lambda_{i_t}(t)} + \frac{1}{n} \log \sum_{i=0}^{n-1} e^{n(\lambda_i(t) - \lambda_{i_t}(t))} \end{aligned}$$

Ce qui permet d'affirmer

$$\text{Max}_i \lambda_i(t) < \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) < \text{Max}_i \lambda_i(t) + \frac{\log n}{n}$$

et en tenant compte de l'inégalité (3) :

$$\left| \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) - f(t) \right| < (4C+2) \frac{\log n}{n} \quad t \in I_n$$

Ce qui permet de conclure que :

$$\frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \rightarrow f(t) \quad \forall t \in \mathbb{R} \\ n \rightarrow +\infty$$

La convergence étant uniforme sur tout compact de \mathbb{R} .

Remarque :

En général plusieurs fonctionnelles λ_i ont la même pente $\frac{p_i}{n}$ et dans ce cas on ne retiendra que celle dont la valeur α_i est maximale. Ceci nous permet aussi de prendre une subdivision plus fine que le découpage en n sous-intervalles sans augmenter le degré du polynôme mais en améliorant la qualité de l'approximation.

I.2. CARACTERISATION DE F

Théorème I.2

Soit F l'ensemble des fonctions réelles de la variable réelle vérifiant la propriété (P_F) (I.0) . Nous avons :

$$F = \{f \mid f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ convexe , lipschitzienne}\}$$

Démonstration

Soit $f \in F$. Par définition (I.0) il existe $g \in E$ et $C \in \mathbb{R}$ tels que

$$f(t) = C t + g(t) \quad , \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

f est donc convexe et lipschitzienne (somme de deux fonctions convexes lipschitziennes).

Réciproquement, si f est convexe lipschitzienne de constante C la fonction $g \quad t \rightarrow f(t) + C t$ est convexe lipschitzienne et non-décroissante car :

$$g(t_1) - g(t_2) = f(t_1) - f(t_2) + C(t_1 - t_2)$$

$$g(t_1) - g(t_2) < C|t_1 - t_2| + C(t_1 - t_2)$$

et donc $g(t_1) - g(t_2) < 0$ si $t_1 < t_2$.

or : $f(t) = g(t) - C t$

ce qui démontre le résultat .

I.3. ALGORITHMES DE CONSTRUCTION D'UNE SUITE DE POLYNÔMES ASSOCIES

Fonction convexe, lipschitzienne, non décroissante

La démonstration du paragraphe I.1 (ii) donne pour une fonction f convexe non décroissante lipschitzienne un algorithme de construction d'une suite de polynômes $\{P_n^f\}$ à coefficients positifs non tous nuls vérifiant

$$\frac{1}{n} \log p_n^f(e^t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f(t) \quad , \quad t \in \mathbb{R}$$

et $d^\circ p_n^f < n C^f$

où C^f est une constante de lipschitz de f .

Fonction convexe lipschitzienne

Pour f convexe lipschitzienne nous allons montrer comment construire une suite de polynômes $\{p_n^f\}$ à coefficients positifs non tous nuls et une suite convergente de réels $\{c_n^f\}$ tels que :

$$f(t) = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} C_n^f \right) t + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log p_n^f(e^t) \quad , \quad t \in \mathbb{R}$$

Avec les mêmes notations qu'au paragraphe I.1 posons :

$$\left. \begin{aligned} \lambda_i(t) &= \alpha_i + \frac{p_i}{n} t \\ \alpha_i &= \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} \\ p_i &= \mathbb{E} \left(n \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \right) \\ R_n^f(z) &= \sum_{i=0}^{n-1} e^{n \alpha_i} z^{p_i} \end{aligned} \right\} i=0, \dots, n-1$$

Il est trivial de vérifier que :

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log R_n^f(e^t) \quad , \quad t \in \mathbb{R}$$

car la démonstration (I.1 ii) ne fait pas intervenir la croissance de f .

Mais R_n^f n'est plus un polynôme car les p_i peuvent être négatifs et il nous faut poser :

$$P_n^f(z) = \sum_{i=0}^{n-1} e^{\alpha_i} z^{p_i - p_0}$$

$$R_n^f(z) = z^{p_0} P_n^f(z)$$

P_n^f est un polynôme car il résulte de la convexité de f que $p_i > p_0$ $i=1, 2, \dots, n-1$. En écrivant $p_0 : p_0^n$ (car il dépend de n) il reste à montrer que pour tout $t \in \mathbb{R}$:

$$\frac{1}{n} \log (e^t)^{p_0^n} = \frac{p_0}{n} t \rightarrow C t$$

$n \rightarrow +\infty$

ce qui revient à montrer que la suite $\left\{ \frac{p_0^n}{n} \right\}$ converge.

Rappelons que $p_0^n = \mathbb{E} \left(\frac{f(t_1^n) - f(t_0^n)}{t_1^n - t_0^n} \mid n \right)$ avec :

$$t_0^n = -\log n \quad t_1^n = -\log n + \frac{2 \log n}{n}$$

et les formules correspondantes pour $n+1$:

Nous avons donc : $t_0^{n+1} < t_0^n$ et comme la suite $\frac{\log n}{n}$ est décroissante pour $n > 3$: $t_1^{n+1} < t_1^n$

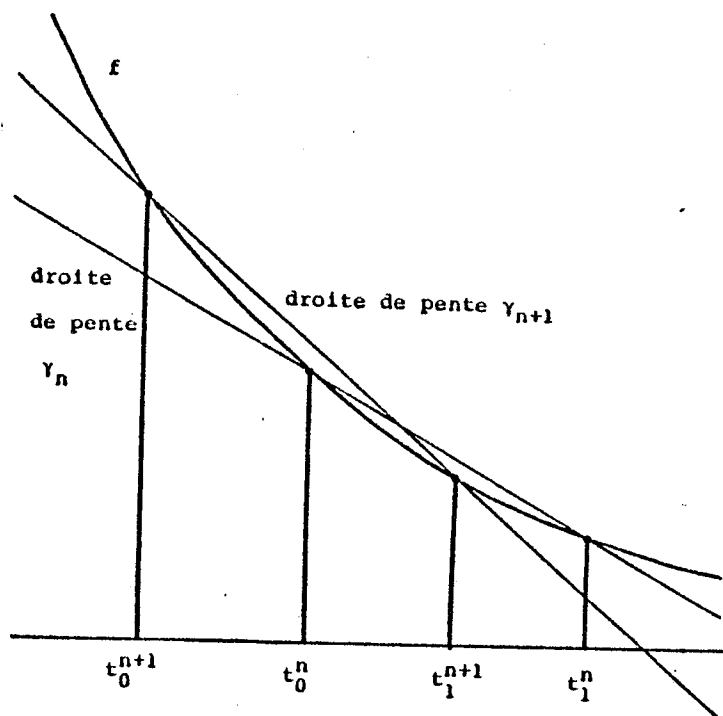


Figure 1

Nous avons compte tenu de la convexité de f (figure 1) :

$$\gamma_{n+1} = \frac{f(t_0^{n+1}) - f(t_1^{n+1})}{t_0^{n+1} - t_1^{n+1}} < \frac{f(t_0^n) - f(t_1^n)}{t_0^n - t_1^n} = \gamma_n$$

La suite $\{\gamma_n\}$ est donc décroissante minorée (car f est lipschitzienne) et convergente. De plus :

$$p_0^n < n \gamma_n < p_0^n + 1$$

d'où

$$\gamma_n - \frac{1}{n} < \frac{p_0^n}{n} < \gamma_n$$

La suite $\left\{\frac{p_0^n}{n}\right\}_{n \in \mathbb{N}}$ est donc convergente.

I.4. VARIANTES DES ALGORITHMES DE BASE

Signalons simplement ici conformément à la remarque faite à la fin du paragraphe I.1 que le nombre de subdivisions peut être pris supérieur à n . Ceci sera fait pour un exemple numérique à la fin de cet article

Il est clair qu'en faisant varier l'intervalle les subdivisions on peut mettre en évidence d'autres algorithmes de construction de P_n^f

II. EXPRESSION INTEGRALE LOCALE D'ELEMENTS DE E et F

II.0. NOTATIONS et GENERALITES

Soit $f \in E$, $\{P_n^f\}$ une suite de polynômes à coefficients positifs non tous nuls vérifiant

$$i(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \quad , t \in \mathbb{R}$$

et C_f un nombre réel vérifiant :

$$\begin{aligned} d^\circ P_n^f &< n C_f & n \in \mathbb{N} \\ |f(t_1) - f(t_2)| &< C_f |t_1 - t_2| & t_1, t_2 \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Posons

$$d^\circ P_n^f = d_n$$

$$P_n^f(z) = a_{d_n}^n \prod_{i=1}^{d_n} (z - z_j^n)$$

$$D_n = \{z_j^n \quad j=1, \dots, d_n\}$$

Nous allons étudier f au voisinage de $t_0 \in \mathbb{R}$ et pour cela

posons $u_0 = e^{t_0}$ et $K = \{(x, y) \in \mathbb{R} : (x - u_0)^2 + y^2 \leq r^2\}$
avec $r < 1/2$ et $r < e t_0$ et $V =]u_0 - r, u_0 + r[$.

Soit μ_n la mesure à support dans K définie par

$$\mu_n = \sum_{\substack{x+iy \in D_n \\ (x,y) \in K}} \frac{\alpha_j^n}{n} \delta(x,y)$$

où α_j^n est la multiplicité de la racine $x+iy$: μ_n est la mesure de répartition uniforme des racines des P_n^f dans K

II.1. Théorème II.1 (énoncé)

Représentation intégrale d'un élément de E ([4])

Soit $f \in E$ et $t_0 \in \mathbb{R}$

Il existe :

- une fonction (réelle de la variable réelle) ϕ , analytique dans un voisinage W de t_0
 - un voisinage (dans \mathbb{R}^2) compact de $(e^{t_0}, 0) : K$
 - une mesure positive bornée μ à support dans K
- tels que :

$$f(t) = \phi(t) + \int_K \log ([e^{t-x}]^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \quad t \in W$$

De plus μ est limite vague d'une sous-suite des mesures μ_n de répartition des racines des $\{P_n^f\}$ dans K

II.2. Décomposition de la fonction f et notations

Considérons le polynôme P_n^f introduit au paragraphe II.0 et scindons-le en deux morceaux :

$$P_n^f(z) = Q_n(z) R_n(z)$$

$$\text{avec } Q_n(z) = \prod_{\substack{x+iy \in D_n \\ (x,y) \in K}} (z-(x+iy))^{\alpha_j^n}$$

$R_n(z)$ correspondant aux racines de P_n^f qui n'appartiennent pas à K . Pour $u \in]0, +\infty[$ et du fait de la symétrie des racines de P_n^f (à coefficients réels positifs) nous avons :

$$\frac{1}{n} \log P_n^f(u) = \frac{1}{n} \log Q_n(u) + \frac{1}{n} \log R_n(u)$$

Et si U désigne le point $(u,0)$, UM la distance euclidienne de U à M :

$$\frac{1}{n} \log Q_n(u) = - \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_n(M)$$

LEMME II.3 :

Pour $u \in V =]u_0 - r, u_0 + r[$ soit $h_n^u(\rho)$ la fonction de répartition radiale des racines de Q_n autour de $(u,0)$ définie pour $\rho \in [0,1]$ par :

$$h_n^u(\rho) = \frac{1}{n} \times \{\text{nombre de racines } z \text{ de } Q_n \text{ telle que } : |z-u| < \rho\}$$

on a :

$$\left. \begin{aligned} 0 < \int_0^\rho \frac{h_n^u(v)}{v} dv < C_1 \rho \\ 0 < \int_0^\rho \log \frac{1}{v} dh_n^u(v) < C_2 \sqrt{\rho} \end{aligned} \right\} \rho \in [0,1], n \in \mathbb{N}$$

où C_1 et C_2 sont deux réels indépendants de u .

Démonstration :

Nous utilisons la propriété suivante ([10]ex.34) :
 si g est une fonction entière (ici un polynôme) avec
 $g(0) \neq 0$, $M(\rho) = \max_{|z| \leq \rho} |g(z)|$ et $N(\rho) =$ nombre de zéros de
 g dans $\{z : |z| < \rho\}$ alors :

$$\int_0^\rho \frac{N(v)}{v} dv < \log M(\rho) - \log |g(0)|$$

Nous prenons $g(z) = P_n^f(u_0+z)$ en remarquant que les racines
 Q_n sont racines de P_n^f .

Nous avons $\max_{|z| < \rho} |g(z)| = P_n(u_0+\rho)$, $0 < \rho < 1$

car P_n^f est à coefficients positifs. Il vient alors :

$$\int_0^\rho \frac{h_n^u(v)}{v} dv < \frac{1}{n} (\log P_n^f(u+\rho) - \log P_n^f(u))$$

Mais $\frac{1}{n} (\log P_n^f(u+\rho) - \log P_n^f(u)) = \frac{\rho}{n} \cdot \frac{P_n^f(u+\xi)}{P_n^f(u+\xi)}$, $\xi \in]0, \rho[$

ce qui peut être majoré par :

$$\frac{d^\circ P_n^f}{n} \times \frac{\rho}{u+\xi} < \frac{d^\circ P_n^f}{n} \frac{\rho}{u_0-r} \leq \rho C_1 \quad \rho \in [0,1]$$

(car $d^\circ P_n^f < n C_f$ d'après les hypothèses II.0).

En ce qui concerne la seconde inégalité, il existe
 $\eta : 0 < \eta < \rho$ tel que :

$$\begin{aligned} \int_0^\rho \log \frac{1}{v} dh_n^u(v) &= \int_\eta^\rho \log \frac{1}{v} dh_n^u(v) = \\ &= \log \frac{1}{\rho} h_n^u(\rho^-) - \log \frac{1}{\eta} h_n^u(\eta^+) + \int_\eta^\rho \frac{h_n^u(v)}{v} dv \\ &< \log \frac{1}{\rho} h_n^u(\rho^-) + C_1 \rho \end{aligned}$$

$$\text{Or } 0 < \log \frac{1}{\rho} h_n^u(\rho^-) = 2h_n^u(\rho^-) \int_{\rho}^{\sqrt{\rho}} \frac{dv}{v} < 2 \int_{\rho}^{\sqrt{\rho}} \frac{h_n^u(v)}{v} dv < 2C_1 \sqrt{\rho}$$

$$\text{d'où : } 0 < \int_0^{\rho} \log \frac{1}{v} dh_n^u(v) < 2C_1 \sqrt{\rho} + C_1 \rho < C_2 \sqrt{\rho} \quad \rho \in [0, 1] .$$

Propriété II.4 :

Soit $u \in V =]u_0 - r, u_0 + r[$, il existe une mesure borélienne positive bornée μ , limite vague d'une sous-suite $\{\mu_{m_n}\}$ des μ_n (mesures de répartition des racines définies au paragraphe II.0), telle que :

$$\int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M) \quad , \quad U = (u, 0) \quad u \in V$$

Démonstration

De la suite $\{\mu_n\}$ de mesures positives uniformément bornées nous pouvons extraire une sous-suite $\{\mu_{m_n}\}$ "vaguement" convergente vers μ

Prouvons d'abord l'existence de $\int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M)$ en étudiant les intégrales $\int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu(M)$, $0 < \varepsilon \leq 1$,

$$\text{avec } \log_{\varepsilon} \frac{1}{v} = \begin{cases} 0 & v > 1 \\ \log \frac{1}{v} & \varepsilon < v < 1 \\ \log \frac{1}{\varepsilon} & 0 < v < \varepsilon \end{cases}$$

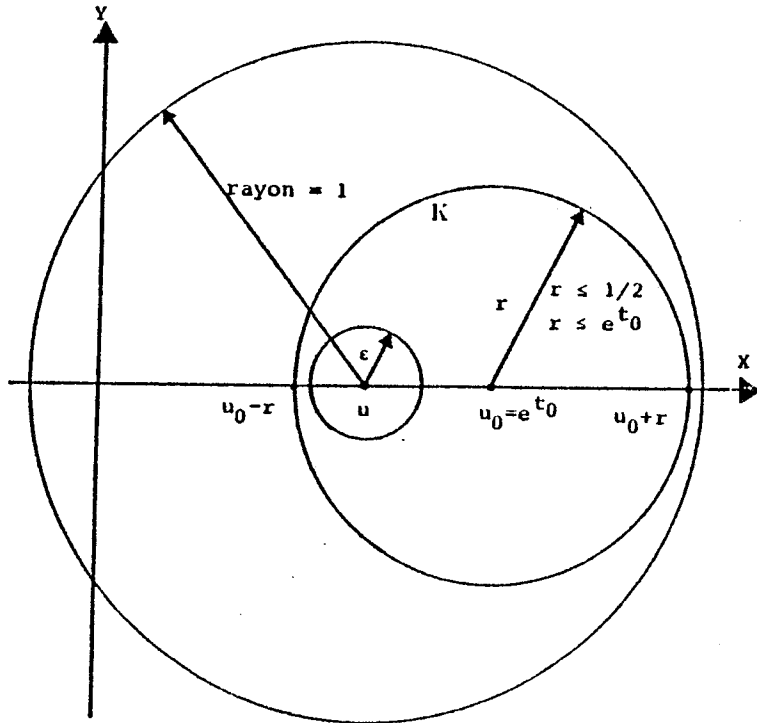


Figure 2

$\log_{\epsilon} \frac{1}{\overline{UM}}$ étant continue à support compact μ_{m_n} et μ à support dans K compact (figure 2) :

$$\int_K \log_{\epsilon} \frac{1}{\overline{UM}} d\mu_{m_n}(M) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_K \log_{\epsilon} \frac{1}{\overline{UM}} d\mu(M)$$

Or

$$\int_K \log_{\epsilon} \frac{1}{\overline{UM}} d\mu_{m_n}(M) = \int_0^1 \log_{\epsilon} \frac{1}{v} dh_{m_n}^u(v)$$

($h_{m_n}^u$ étant définie au lemme II.3)

En appliquant ce lemme :

$$0 < \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) < \int_0^1 \log \frac{1}{v} dh_{m_n}^u(v) < C_2$$

Les intégrales $\int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu(M)$ sont donc uniformément bornées par C_2 ce qui prouve que $\int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M)$ existe (car les $\log_{\varepsilon} \frac{1}{UM}$ positives convergent en croissant vers $\log \frac{1}{UM}$, lorsque ε tend vers 0)

Etudions maintenant la différence :

$$\left| \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \right|$$

que nous pouvons majorer par :

$$\begin{aligned} & \left| \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu(M) \right| + \\ & \left| \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \right| + \\ & \left| \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) - \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \right| \end{aligned}$$

La dernière valeur absolue est égale à :

$$\left| \int_0^{\varepsilon} \left(\log \frac{1}{\varepsilon} - \log \frac{1}{v} \right) dh_{m_n}^u(v) \right|$$

que nous pouvons majorer (en utilisant le lemme II.3) par :

$$\int_0^{\varepsilon} \log \frac{1}{v} dh_{m_n}^u(v) < C_2 \varepsilon^{1/2}$$

$\eta > 0$ étant donné, choisissons $\varepsilon > 0$ tel que :

$$C_2 \varepsilon^{1/2} < \frac{\eta}{3} \quad \text{et}$$

$$\left| \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log_{\varepsilon} \frac{1}{UM} d\mu(M) \right| < \frac{\eta}{3}$$

Ensuite \log_ϵ étant continue à support compact et $\{\mu_{m_n}\}$ vaguement convergente vers μ nous pouvons choisir N_η tel que pour tout $n > N_\eta$:

$$\left| \int_K \log_\epsilon \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log_\epsilon \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \right| < \frac{\eta}{3}$$

ce qui démontre que : $\forall n > N_\eta$

$$\left| \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M) - \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M) \right| < \eta$$

d'où la propriété annoncée .

Propriété II.5

Soit $u \in V =]u_0 - r, u_0 + r[$ et $R_m(u)$ le polynôme défini au paragraphe II.2 ,

il existe une sous-suite $\{m_n\}$ de $\{1, 2, \dots, n\}$, un voisinage V (réel) de $u_0 = e^{t_0}$ et Φ fonction réelle de la variable réelle analytique dans V tels que

$$\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(u) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \Phi(u) \quad u \in V$$

Démonstration :

Rappelons le théorème de Vitali ([2]) :

Si $\{\Phi_n\}$ est une suite de fonctions analytiques sur un domaine S , uniformément bornées sur tout compact de S et convergente sur $Q \subset S$, Q possédant un point d'accumulation dans S , alors Φ_n converge vers une fonction analytique sur S et uniformément sur tout compact de S .

Rappelons (II.0) que $K = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : (x-u_0)^2 + y^2 < r^2 \}$

avec $r < 1/2$ et $r < e^{t_0}$, et $S = \{z \in \mathbb{C} : |z - u_0| < r\}$.

Si nous posons :

$$R_n(z) = a_{d_n}^n \prod_{i=1}^{p_n} (z - w_i^n)(z - \bar{w}_i^n) \prod_{i=1}^{q_n} (z - a_i^n)$$

avec $w_i^n \notin \mathbb{R}$ et $a_i^n \in \mathbb{R}^-$, nous pouvons définir avec la détermination usuelle du logarithme complexe :

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{n} \log a_{d_n}^n + \sum_{i=1}^{p_n} \log (z - w_i^n)(z - \bar{w}_i^n) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{q_n} \log (z - a_i^n)$$

analytique dans S et coïncidant avec $\frac{1}{n} \log R_n(u)$ pour $u \in]u_0 - r, u_0 + r[$. En effet S ne contient aucune racine w_i^n , \bar{w}_i^n et a_i^n car $S \subset K$ et R_n n'a aucune racine dans

$$K = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid (x - u_0)^2 + y^2 < r^2 \}. \text{ De plus :}$$

$$\operatorname{Re} \Phi_n(z) = \frac{1}{n} \log |R_n(z)|$$

$$|\operatorname{Im} \Phi_n(z)| < \frac{1}{n} (p_n + q_n) \pi < \frac{d^{\circ} p_n^f}{n} \pi \leq C^f \pi \quad (1)$$

Soit H un compact de S . Il existe $\eta \in]0, r[$ tel que :

$$\forall z \in H : |z - u_0| < \eta$$

Pour toute racine z_i de R_n et z de H (figure 3),

on a donc :

$$|z - z_i| < |z - u_0| + |u_0 - z_i| < |u_0 - z_i| + \eta$$

et

$$|u_0 - z_i| < |u_0 - z| + |z - z_i| < \eta + |z - z_i|$$

d'où

$$|u_0 - z_i| - \eta < |z - z_i| < |u_0 - z_i| + \eta$$

et

$$1 - \frac{\eta}{|u_0 - z_i|} < \frac{z - z_i}{|u_0 - z_i|} < 1 + \frac{\eta}{|u_0 - z_i|}$$

et puisque $|u_0 - z_i| > r$ il existe donc μ et ν tels que :

$$0 < \mu < 1 < \nu$$

$$\mu < \frac{|z - z_i|}{|u_0 - z_i|} < \nu$$

pour tout $z \in H$ et tout z_i racine de R_n .

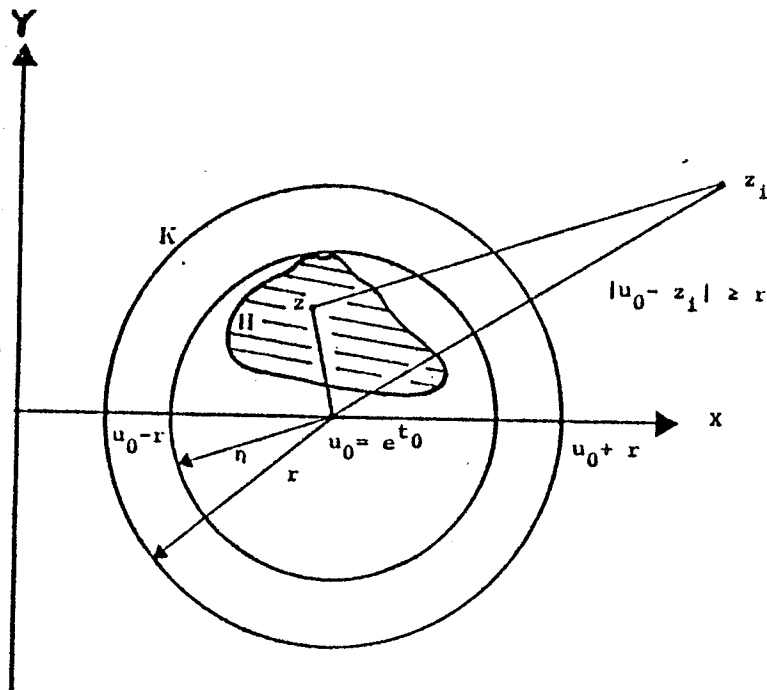


Figure 3

En conséquence $V \subset C \cap H$

$$\begin{aligned} \mu^{n C^f} < \mu^{d^\circ P_n^f} < \mu^{d^\circ P_n^f} < \left| \frac{R_n(z)}{R_n(u_0)} \right| < \nu^{d^\circ R_n} < \nu^{d^\circ P_n^f} < \nu^{n C^f} \\ \frac{1}{n} \log |R_n(u_0)| + C^f \log \mu < \frac{1}{n} \log |R_n(z)| \\ < \frac{1}{n} \log |R_n(u_0)| + C^f \log \nu \end{aligned} \quad (2)$$

Mais nous savons (II.2 et II.4) que pour $u \in V =]u_0 - r, u_0 + r[$ et une sous suite (vaguement convergente vers μ) des mesures de répartition des racines $\{\mu_n\}$:

$$\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(u) = \frac{1}{m_n} \log P_{m_n}^f(u) + \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu_{m_n}(M)$$

et d'autre part :

$$\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(u) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} f(\log u) + \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M)$$

Nous pouvons en tirer deux conclusions :

1°/ $\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(u_0)$ converge et les $\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(z)$ sont donc uniformément bornés pour $z \in C \cap H^n$ compact inclus dans S (Il suffit d'appliquer les inégalités (1) et (2))

2°/ $\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(z)$ converge pour $z \in V =]u_0 - r, u_0 + r[$

Nous pouvons donc appliquer le théorème de Vitali et affirmer que $\frac{1}{m_n} \log R_{m_n}(z)$ converge pour $z \in S$ vers une fonction analytique Φ sur S . Il nous suffit de prendre la restriction de Φ à V pour démontrer la propriété II.5.

II.6 Démonstration du théorème II.1

Avec les résultats des propriétés II.4 et II.5 nous pouvons écrire que pour tout $t_0 \in \mathbb{R}$ il existe

- 1/ une mesure positive μ bornée à support dans

$$K = \{(x, y) ; (x \cdot e^{t_0})^2 + y^2 < r\}$$

limite vague d'une sous-suite de la suite des mesures des répartition des racines des P_n^f situées dans K

- 2/ Une fonction analytique Φ de la variable réelle dans un voisinage $V =]u_0 - r, u_0 + r[$ vérifiant

$$f(\log u) = \Phi(u) - \int_K \log \frac{1}{UM} d\mu(M)$$

$$u \in]u_0 - r, u_0 + r[\\ U = (u, 0)$$

Nous pouvons en conclure l'existence d'un voisinage W de t_0 tel que

$$f(t) = \phi(t) + \int_K \log((x \cdot e^t)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y) \quad t \in W$$

avec $\phi(t) = \Phi(e^t)$ analytique sur W ce qui démontre le théorème.

II 7 Expression intégrale d'un élément de F

Soit $f \in F$ définie par

$$f(t) = Ct + \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t)$$

avec $d^\circ P_n^f < n C^f$ et P_n^f à coefficients positifs. Avec les mêmes notations qu'au paragraphe II.1 on peut énoncer le théorème suivant :

Théorème II.7 : Représentation intégrale d'un élément de F

Soit $f \in F$ et $t_0 \in \mathbb{R}$

Il existe :

- une fonction (réelle de la variable réelle) ϕ analytique dans un voisinage W de t_0
 - un voisinage (dans \mathbb{R}^2) compact de $(e^{t_0}, 0) : K$
 - une mesure positive bornée μ à support dans K
- tels que :

$$f(t) = \phi(t) + \int_K \log ([e^t - x]^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y) \quad , t \in W$$

de plus μ est limite vague d'une sous-suite des mesures de répartition dans K des racines des polynômes P_n^f .

Démonstration :

C'est la même que celle du théorème II.1 la fonction ϕ étant remplacée par $t \rightarrow Ct + \phi(t)$.

III. APPROXIMATION DES SINGULARITES D'UNE FONCTION f CONVEXE LIPSCHITZIENNE

Théorème III : ([3],[4])

Soit $C \in \mathbb{R}$, $C^f \in \mathbb{R}$ et f une fonction réelle de la variable réelle, convexe et lipschitzienne définie par :

$$f(t) = Ct + \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t) \quad t \in \mathbb{R}$$

les P_n^f étant des polynômes à coefficients positifs non tous nuls, vérifiant d° $P_n^f \leq C^f n$ $n \in \mathbb{N}$.

Si $t_c \in \mathbb{R}$ est une singularité de f , alors e^{t_c} est un point d'accumulation dans \mathbb{C} des racines des polynômes P_n^f .

Démonstration :

Par définition t_c sera une singularité de f si et seulement si f (fonction de la variable réelle) n'est pas analytique autour de t_c .

Si e^{t_c} n'est pas point d'accumulation des racines des polynômes P_n^f il existe

$B_\varepsilon = \{(x, y) \mid ((x - e^{t_c})^2 + y^2)^{1/2} < \varepsilon\}$ tel que aucun des polynômes P_n^f ne possède de racines dans B_ε . On peut trouver $K = \{(x, y) \mid ((x - e^{t_c})^2 + y^2)^{1/2} < r\}$, W voisinage de t_c et ϕ analytique sur W tels que :

$$f(t) = \phi(t) + \int_K \log((e^t - x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y) \quad t \in W$$

où μ est limite d'une sous-suite $\{\mu_{m_n}\}$ des mesures de répartitions des racines des polynômes $P_{m_n}^f$ dans K . Or μ_{m_n} est nulle sur B_ε et par conséquent μ aussi. La partie intégrale de l'expression de f est donc analytique autour de t_c donc f aussi.

III.1. Illustration du théorème III

Prenons $f(t) = |t|$, $t \in \mathbb{R}$
 On peut écrire $f(t) = -t + \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n^f(e^t)$
 avec $P_n^f(z) = 1 + z^{2n}$.

Il est clair que le seul point d'accumulation réel positif des racines de P_n^f est $z_c = 1$ correspondant à la singularité $t_c = 0$ de f .

III.2. Recherche des singularités d'une fonction convexe lipschitzienne

La méthode consiste à calculer à partir de valeurs réelles de la fonction f des polynômes P_n^f et d'en étudier les répartitions de racines dans \mathbb{C} . Nous n'avons pas à développer ici une méthode numérique de recherche de points d'accumulation mais les exemples ont pour but de montrer que cette approche est tout à fait raisonnable. D'ailleurs plus qu'un algorithme figé des moyens interactifs de calcul (utilisant un écran graphique par exemple) sont beaucoup plus adaptés au problème.

D'un point de vue numérique la méthode demande seulement l'évaluation des différences premières de la fonction et ceci quel que soit l'ordre de la singularité. De plus, nous n'avons pas utilisé des polynômes de degré supérieur à 40 ce qui est raisonnable pour une bonne procédure de calcul de racines de polynômes.

Exemple numérique 1 :

Nous considérons la fonction convexe lipschitzienne :

$$f(t) = \frac{|t|^{1.5}}{(1+|t|)^{0.5}}$$

qui appartient à $C^1(\mathbb{R})$ mais dont la dérivée seconde est discontinue en $t_c = 0$. Conformément à l'algorithme du paragraphe I 3 nous calculons les polynômes P_n^f pour $n=10$ et $n=20$. Les polynômes obtenus sont de degré 20 et 38 et leur calcul utilise respectivement 11 et 21 évaluations de la fonction f en des valeurs comprises dans $[-\log 10, \log 10]$ et $[-\log 20, \log 20]$.

La figure 4 montre la répartition des racines de P_{10}^f la figure 5 celles de P_{20}^f et la figure 6 superpose les images des racines des polynômes $P_{10}^f, P_{12}^f, P_{14}^f, P_{16}^f, P_{18}^f$ et P_{20}^f .

On remarque qu'une courbe limite coupant nettement

l'axe réel positif en $z_c=1$ (correspondant à $z_c = e^{t_c}$, $t_c=0$) apparait sur ces figures.

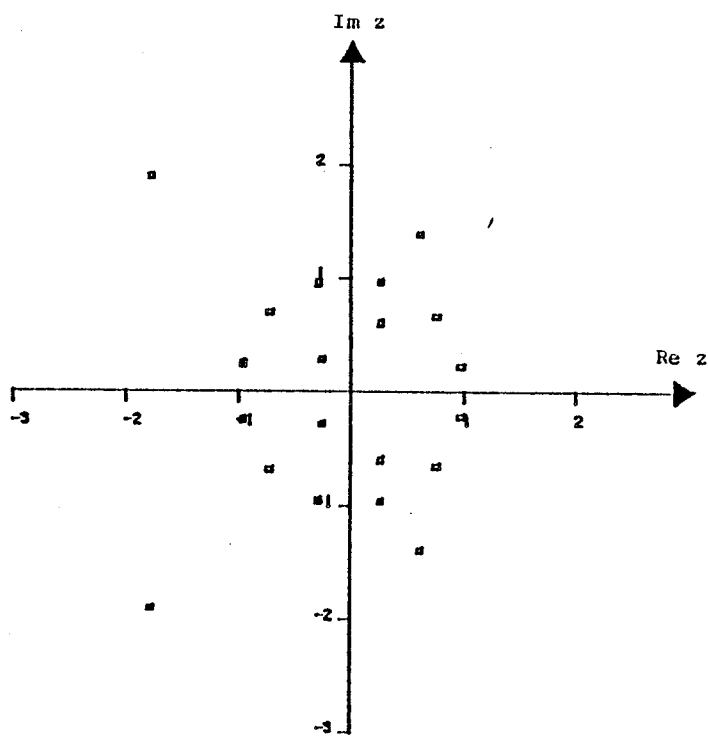


Figure 4 : Racines du polynôme P_{10}^f

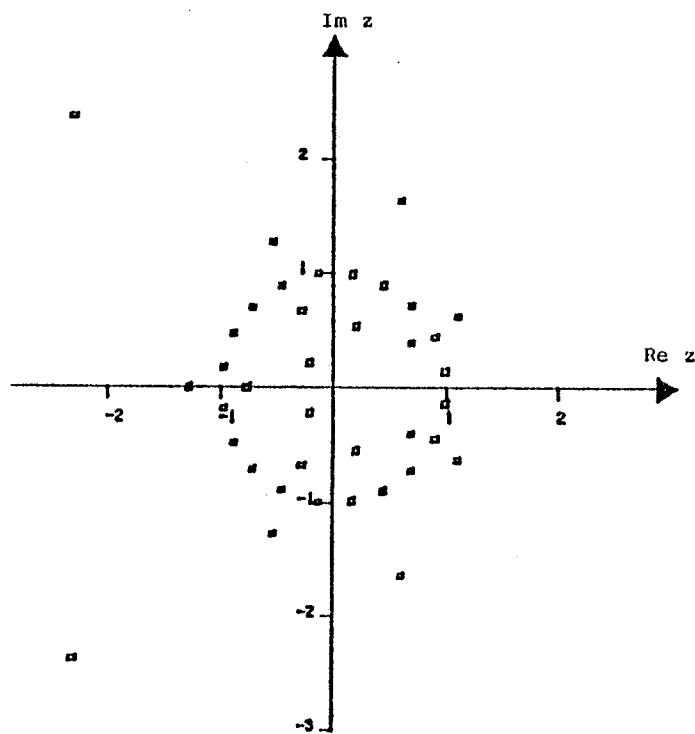


Figure 5 : Racines du polynôme P_{20}^f

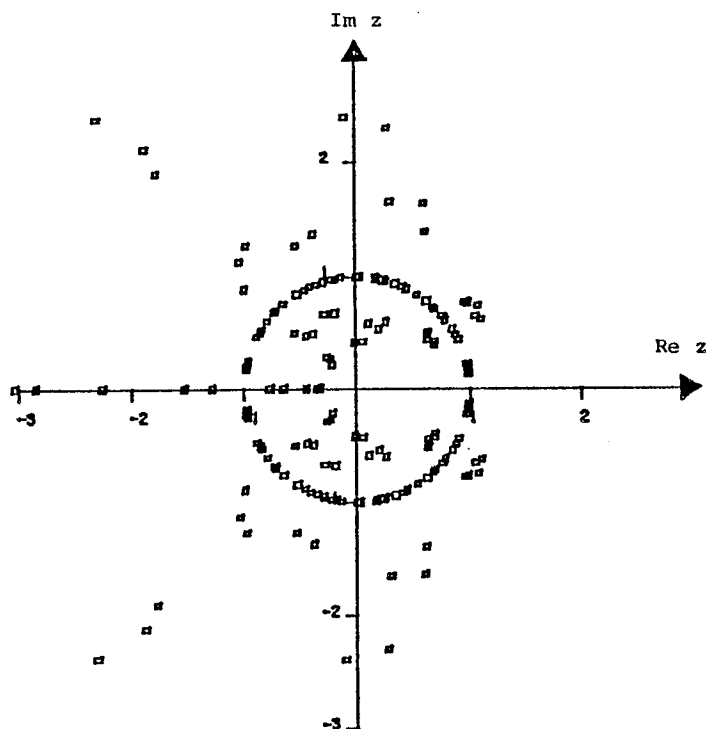


Figure 6 : Superposition de racines de polynômes P_n^f

Exemple numérique 2

Nous considérons la fonction convexe lipschitzienne :

$$g(t) = \frac{t^2}{1+|t|}$$

qui appartient à $C^2(\mathbb{R})$ mais dont la dérivée troisième est discontinue en $t_c = 0$.

De plus, nous appliquons une variante de l'algorithme I.3 en subdivisant l'intervalle $[-\log n, \log n]$ en $4n$ sous-intervalles au lieu de n (voir paragraphe I.4).

Sur la figure 7 sont visualisées les racines du polynôme P_n^g , pour $n=10$ (40 sous intervalles de $[-\log 10, \log 10]$ avec degré de $P_n^g = 18$).

Sur la figure 8 sont visualisées les racines du polynôme P_n^g pour $n=20$ (8 sous-intervalles de $[-\log 20, \log 20]$ avec degré de $P_n^g = 38$).

La figure 9 est la superposition des images des racines des polynômes $P_{10}^g, P_{12}^g, P_{14}^g, P_{16}^g, P_{18}^g$ et P_{20}^g .

De la figure 7 à la figure 8 on voit se dessiner la possibilité d'un point d'accumulation en $z_C = 1$ (correspondant à la singularité $t_C = 0$ de g) qui se voit beaucoup plus clairement sur la figure 9.

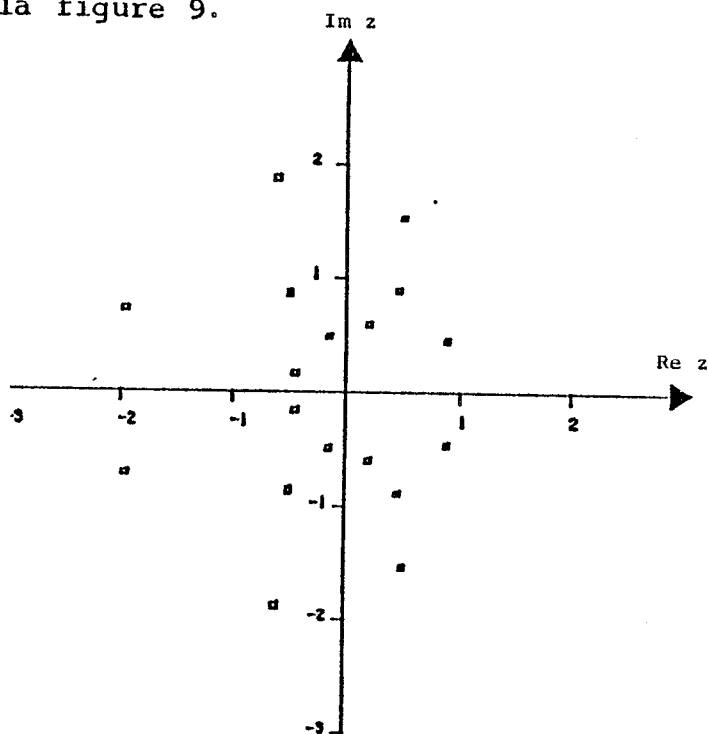


Figure 7 : Racines du polynôme P_{10}^g

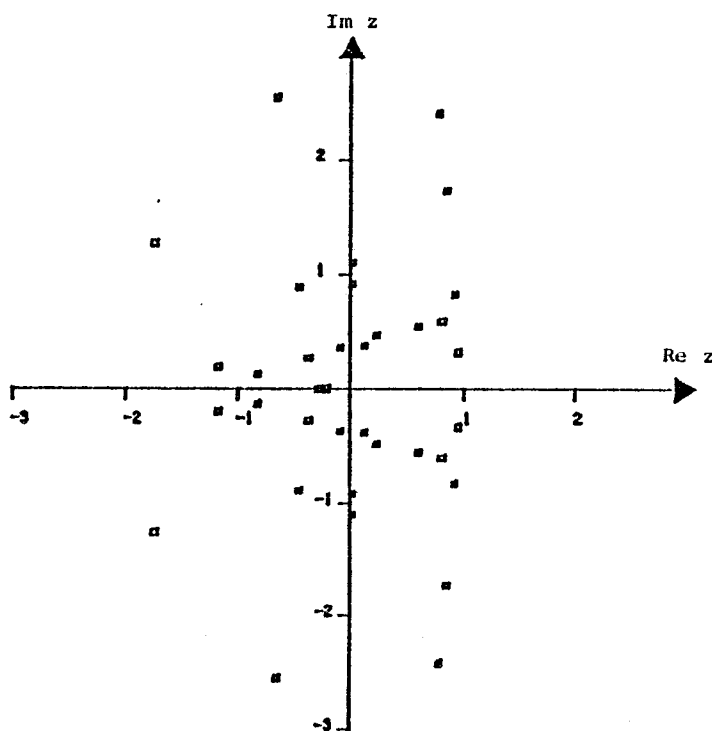


Figure 8 : Racines du polynôme P_{20}^g

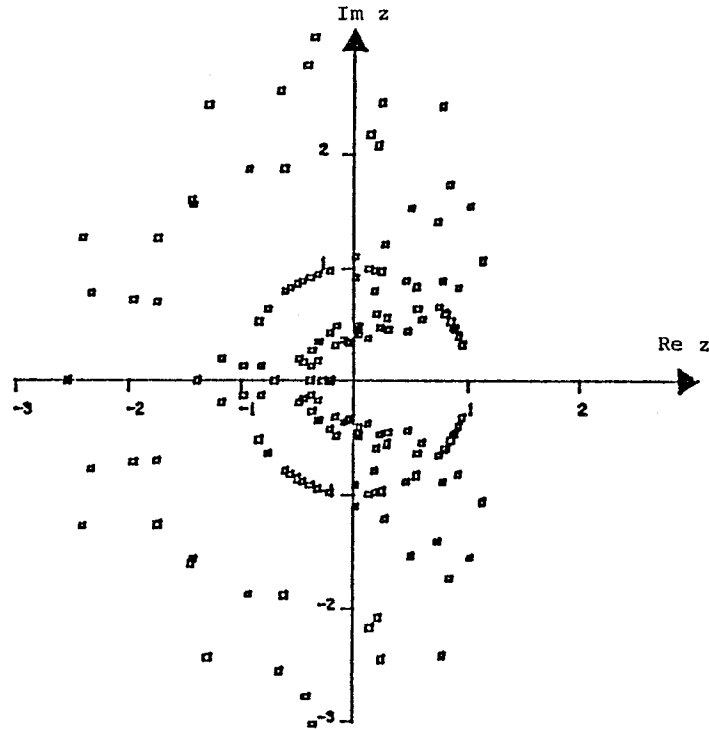


Figure 9 : Superposition de racines de polynômes P_n^q

Exemple numérique 3

Nous prenons la fonction $h(t) = (1+t^2)^{0.5}$ qui est une fonction analytique de $t \in \mathbb{R}$. En prenant n points dans l'intervalle $[-\log n, \log n]$ nous calculons les polynômes $P_{10}^h, P_{12}^h, P_{14}^h, P_{16}^h, P_{18}^h$ et P_{20}^h dont les racines sont superposées sur la figure 10. Contrairement aux exemples 2 et 3 le lieu de répartition des racines semble exclure l'axe réel positif ce qui est conforme à la théorie.

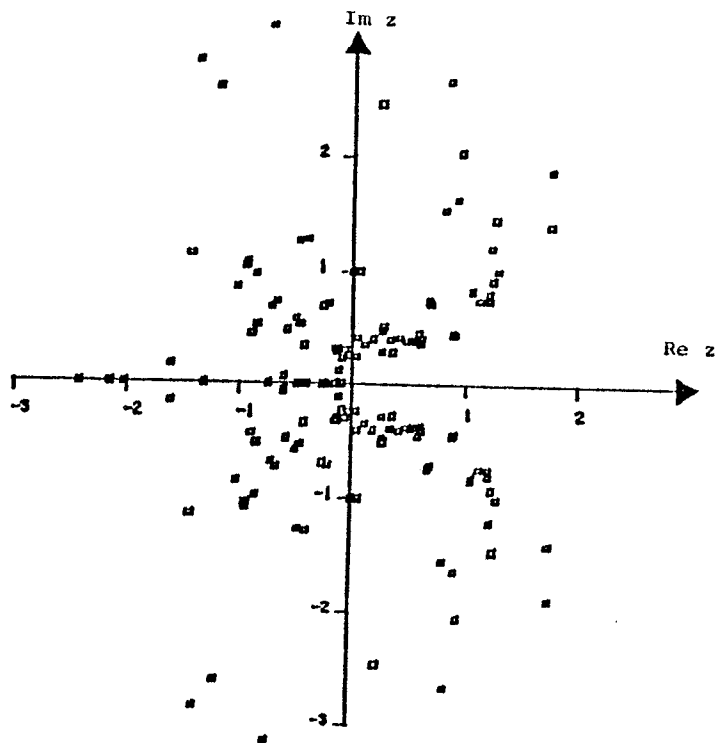


Figure 10 : Superposition de racines de polynômes P_n^h

CONCLUSION

Dans cet article, nous donnons les bases minimum d'une méthode originale d'approximation des singularités d'une fonction convexe lipschitzienne et nous montrons que son utilisation numérique semble raisonnable.

La méthode proposée peut se développer dans plusieurs directions

- 1) Etude des classes d'algorithmes permettant de calculer des suites de polynômes P_n^f .
- 2) Etude des répartitions des racines des P_n^f . Il serait fondamental de savoir s'il existe certaines répartitions

limites universelles attachés à des algorithmes de constructions particuliers. En particulier l'existence de courbes limites est suggérée par les expériences numériques réalisées (ainsi d'ailleurs que par les expériences réalisées par les physiciens ([7],[11]) .

- 3) Possibilité de faire du prolongement analytique d'une fonction convexe définie sur l'axe réel.

Ces trois points sont très liés les uns aux autres.

BIBLIOGRAPHIE

- (1) M.E. FISHER "The nature of critical points" Lecture in theoretical physics 7c. Boulder : University of Colorado Press (1964).
- (2) P. HENRICI : "Applied and computational complex analysis" Vol. II J. Wiley and Sons.
- (3) B. LACOLLE : "Algebraic method for the computation of the partition functions of spin glasses and numerical study of the distributions of zeros". "Critical phenomena in Physics Biology, Chemistry and other fields". Springer Series in Synergetics (1980).
- (4) B. LACOLLE "Potentiel logarithmique et transition de phase". S.A.N.G. n° 338, IMAG.
- (5) T.D. LEE C.N. YANG : "Statistique theory of equation of state and phase transition II . Lattice gas and Ising Model" Physical Review vol 87 number 3 August 1952
- (6) C.M. MARLE : "Mesures et probabilités". Hermann.
- (7) S. ONO, Y. KARAKI, C. KAWABATA : "Statistical thermodynamics of finite Ising Model I". Journal of Phys. Soc. of Japan Vol 25, n° 1 (1968).
- (8) H. POINCARÉ : "Le potentiel Newtonien".
- (9) G. POLYA, G. SZEGO : "Problems and theorems in Analysis". Vol. I, Springer-Verlag.
- (10) G. POLYA, G. SZEGO "Problems and theorems in Analysis". Vol. II, Springer-Verlag.

- (11) M. SUZUKI, C. KAWABATA, S. ONO, Y. KARAKI, M. IKEDA :
"Statistical thermodynamics of finite Ising Model II".
Journal of Phys. Soc. of Japan. Vol. 29, n° 4 (1970).
- (12) A.E. TAYLOR "General theory of functions and Inte-
gration" . Blaisdell Publishing Company (1965).
- (13) G. VALIRON : "Théorie des fonctions" Masson (1966).
- (14) C.N. YANG, T.D. LEE : "Statistical theory of equation of
state and phase transition I. Theory of condensation".
Physical Review , Volume 87, n° 3, August 1952.

CHAPITRE III

FONCTIONS CONVEXES ET LOGARITHMES DE POLYNOMES

ETUDE DES SINGULARITES DES FONCTIONS D'ENERGIE

Présentation du chapitre

Dans la première partie de ce chapitre, je montre comment toute fonction convexe peut s'exprimer comme limite d'une suite de logarithmes de polynômes "généralisés" à coefficients positifs. Malheureusement, la généralisation de l'expression intégrale ne se révèle pas (tout au moins directement) réalisable. Par contre on peut établir des relations de dualité entre une fonction directement reliée aux coefficients des polynômes figurant dans les approximants et la fonction convexe limite.

Si l'on revient à l'application à la Physique, cette relation entre les coefficients des fonctions de partition et l'énergie a préoccupé les physiciens ([6]) sans pourtant recevoir de réponse satisfaisante. Cela est d'ailleurs étonnant car cette relation est inscrite en filigrane dans le livre de Ruelle ([14] p. 114) et qu'elle se révèle un outil pour l'étude des transitions de phase d'ordre 1. (voir même référence). D'autre part l'importance de la convexité dans ce domaine de la physique est bien connue ([3]).

Le théorème I.2.5 donne une réponse assez claire à l'idée de comportement limite des coefficients que l'on peut se faire à la vue des fonctions de partitions calculées au chapitre V par exemple.

De plus, étant données les relations qu'il existe entre une fonction convexe et sa polaire, dans les cas réguliers, la recherche des singularités pourrait se faire sur la polaire et donc directement sur les

coefficients de la fonction de partition qui sont des quantités combinatoires attachées au réseau. Ce genre d'approche n'a semble-t-il pas été exploité.

Dans la seconde partie j'étudie les fonctions définies par les intégrales au chapitre II. Des conditions d'existence des dérivées $p^{\text{ème}}$ et d'analyticit  sont donn es en rapport avec la mesure. Quelques cas particuliers ont  t  examin s en physique ([1], [2], [5], [10],[12], [15], [16] [19] ...), mais une  tude g n rale de la nature des singularit s reste   faire. Le point le plus difficile  tant certainement de faire intervenir le support de la mesure.

I - FONCTIONS CONVEXES ET LOGARITHMES DE POLYNOMES

I.1 - EXPRESSION D'UNE FONCTION CONVEXE A L'AIDE DE LOGARITHMES DE POLYNOMES GENERALISES A COEFFICIENTS POSITIFS

Le théorème qui suit généralise le théorème I.2 du chapitre II.

On appellera *polynôme généralisé* en z une expression formelle en z du type :

$$P(z) = \sum_{i=-p}^q a_i z^i \quad \begin{array}{l} p, q \in \mathbb{N} \\ a_i \in \mathbb{C} \end{array}$$

Les a_i sont les coefficients de P .

THEOREME

Soit E l'ensemble des fonctions f réelles de la variable réelle définie par la propriété (P) :

Il existe une suite de polynômes généralisés à coefficients positifs (et non tous nuls) $\{P_n^f\}$ telle que :

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n(e^t) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

On a :

$$E = \{f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ convexe}\}.$$

Démonstration

Si $f \in E$ $\frac{1}{n} \log P_n(e^t)$ est convexe la fonction limite ponctuelle est donc convexe. (voir chapitre II, paragraphe I.1).

Réciproquement soit f une fonction convexe de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Elle est donc continue.

Soit $t^* \in \mathbb{R}$ et $\varepsilon > 0$.

Soit $I_n = [-\log n, \log n]$ divisé en n sous-intervalles égaux avec :

$$t_i = -\log n + 2i \frac{\log n}{n} \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Supposons que $t^* \in [t_i^*, t_{i+1}^*]$

Si $\lambda_i(t)$ désigne l'interpolation linéaire de f sur $[t_i, t_{i+1}]$ on a :

$$\ell_i(t) = f(t_i) + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} (t - t_i)$$

$$\ell_i(t) = \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} t$$

On peut choisir $N_\epsilon^1 \in \mathbb{N}$ tel que :

$$\forall n \geq N_\epsilon^1 : \bar{t}, \tilde{t} \in [t_{i^*}, t_{i^*+1}] \Rightarrow |f(\bar{t}) - f(\tilde{t})| \leq \epsilon/3$$

Pour t^* on a alors :

$$0 \leq \ell_{i^*}(t^*) - f(t^*) \leq \text{Max}\{f(t_{i^*}), f(t_{i^*+1})\} - f(t^*)$$

d'où

$$0 \leq \ell_{i^*}(t^*) - f(t^*) \leq \epsilon/3$$

De plus pour $i \neq i^*$:

$$\ell_i(t^*) - f(t^*) \leq 0$$

Donc :

$$0 \leq \text{Max}_{i=0,1,\dots,n-1} \ell_i(t^*) - f(t^*) \leq \epsilon/3$$

Remplaçons maintenant $\ell_i(t)$ par :

$$\lambda_i(t) = \frac{t_{i+1} f(t_i) - t_i f(t_{i+1})}{t_{i+1} - t_i} + \frac{p_i}{n} t$$

$$p_i = E \left(n \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \right)$$

$$\text{On a : } |\ell_i(t^*) - \lambda_i(t^*)| \leq \frac{|t^*|}{n} \leq \frac{\log n}{n} \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

Choisissons maintenant $n \geq N_\epsilon^2 \geq N_\epsilon^1$ tel que :

$$n \geq N_\epsilon^2 \Rightarrow \frac{\log n}{n} \leq \epsilon/3$$

Nous avons :

$$\forall n \geq N_\epsilon^2 : \left| \text{Max}_{i=0,1,\dots,n-1} \ell_i(t^*) - \text{Max}_{i=0,1,\dots,n-1} \lambda_i(t^*) \right| \leq \epsilon/3$$

Maintenant en posant :

$$\lambda_i(t) = \alpha_i + \frac{p_i}{n} t$$

considérons le polynôme généralisé :

$$P_n^f(z) = \sum_{i=0}^{n-1} e^{n\alpha_i} z^{p_i}$$

Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log e^{n \operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*)} &\leq \frac{1}{n} \log \sum_{i=0}^{n-1} e^{n\lambda_i(t^*)} \leq \\ &\operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*) + \frac{1}{n} \log \sum_{i=0}^{n-1} e^{n(\lambda_i(t^*) - \operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*))} \\ &\leq \frac{\log n}{n} + \operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*) \end{aligned}$$

Donc pour $n \geq \frac{N^2}{\varepsilon}$:

$$\operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*) \leq \frac{1}{n} \log P_n^f(e^{t^*}) \leq \operatorname{Max}_i \lambda_i(t^*) + \varepsilon/3$$

D'où :

$$\text{Pour } n \geq \frac{N^2}{\varepsilon} : \left| \frac{1}{n} \log P_n^f(e^{t^*}) - f(t^*) \right| \leq \varepsilon$$

ce qui finit de démontrer le théorème. On pourrait de même montrer la convergence uniforme sur tout compact.

I.2 - FONCTION CONVEXE - SUITE DE LOGARITHMES DE POLYNOMES - INTRODUCTION DE LA FONCTION POLAIRE

I.2.1 - Notations [9]

Soit $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$

$$\operatorname{dom}(g) = \{x \in \mathbb{R} : g(x) \neq +\infty\}$$

Soit $\{I_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ une famille de parties finies de \mathbb{Z} et

$$K_n = I_n/n = \{y/n \mid y \in I_n\}$$

On note :

$$g^*(t) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{tx - g(x)\}$$

$$h_n(t) = \max_{x \in K_n} \{tx - g(x)\}.$$

Propriété I.2.2 : Approximation discrète de la polaire

Si g est continue sur $\text{dom}(g) \neq \emptyset$.

Si $K_n \subset \text{dom}(g)$ et "devient dense dans $\text{dom}(g)$ ", c'est-à-dire

$\forall \varepsilon > 0$ et $\forall x \in \text{dom}(g)$:

$$\exists N_{\varepsilon, x} \in \mathbb{N} \text{ tel que } \forall n \geq N_{\varepsilon, x} \exists y \in K_n : |x-y| \leq \varepsilon$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{Alors :} \\ h_n(t) \rightarrow g^*(t) \\ n \rightarrow +\infty \end{array} \right. \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

Démonstration :

1) Cas où $g^*(t) \neq +\infty$

Soit $\varepsilon > 0$. Il existe $x_\varepsilon \in \text{dom}(g)$ tel que :

$$g^*(t) - \varepsilon/3 \leq tx_\varepsilon - g(x_\varepsilon) \leq g^*(t) \quad (1)$$

De plus g étant continue en x_ε il existe $\eta > 0$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} |x - x_\varepsilon| \leq \eta \\ x \in \text{dom}(g) \end{array} \right\} \Rightarrow |g(x) - g(x_\varepsilon)| \leq \varepsilon/3$$

et on peut imposer en plus que :

$$|x - x_\varepsilon| |t| \leq \varepsilon/3$$

En résumé pour $|x - x_\varepsilon| \leq \eta$ on a :

$$|tx_\varepsilon - g(x_\varepsilon) - \{tx - g(x)\}| \leq |t| |x - x_\varepsilon| + |g(x) - g(x_\varepsilon)| \leq 2\varepsilon/3$$

et en tenant compte de (1) :

$$g^*(t) - \varepsilon \leq tx - g(x) \leq g^*(t) + 2\varepsilon/3 < g^*(t) + \varepsilon$$

et d'ailleurs :

$$g^*(t) - \varepsilon \leq tx - g(x) \leq g^*(t).$$

D'après la propriété de K_n nous pouvons choisir N tel que :

$$\forall n \geq N : \exists x \in K_n \quad |x - x_\epsilon| \leq \eta$$

Donc

$$\forall n \geq N : \exists x \in K_n \text{ tel que :}$$

$$g^*(t) - \epsilon \leq tx - g(x) \leq g^*(t)$$

D'où

$$\forall n \geq N : g^*(t) - \epsilon \leq h_n(t) \leq g^*(t)$$

ce qui démontre la première partie.

2) Cas où $g(t) = +\infty$

Soit $\alpha > 0$. Il existe $x_\alpha \in \text{dom}(g)$ tel que :

$$tx_\alpha - g(x_\alpha) \geq 3\alpha$$

Nous pouvons choisir $\eta \geq 0$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} |x - x_\alpha| \leq \eta \\ x \in \text{dom}(g) \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{cases} 1) & |g(x) - g(x_\alpha)| \leq \alpha \\ 2) & |t||x - x_\alpha| \leq \alpha \end{cases}$$

Nous pouvons en déduire que :

$$\left. \begin{array}{l} |x - x_\alpha| \leq \eta \\ x \in \text{dom}(g) \end{array} \right\} \Rightarrow tx - g(x) \geq \alpha$$

Or il existe N tel que :

$$\forall n \geq N \quad \exists x \in K_n : |x - x_\alpha| \leq \eta$$

En conséquence :

$$\forall n \geq N \quad \exists x \in K_n : tx - g(x) \geq \alpha$$

et

$$\forall n \geq N : h_n(t) \geq \alpha$$

ce qui démontre la seconde partie du résultat.

Propriété I.2.3 - Approximation de la fonction polaire et logarithmes de polynômes

Avec les mêmes hypothèses que pour la propriété I.2.2 et en plus

$$\frac{\log |I_n|}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

En posant :

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log \sum_{i \in I_n} (e^t)^i e^{-ng(i/n)}$$

on a :

$$f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} g^*(t) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

Démonstration

Posons : $\text{Max}_{i \in I_n} \{ \frac{i}{n} \cdot t - g(i/n) \} = h_n(t)$

$$= \frac{i_n}{n} \cdot t - g(i_n/n)$$

On a :

$$\frac{1}{n} \log \left((e^t)^{i_n} e^{-ng(i_n/n)} \right) \leq f_n(t) \leq$$

$$\frac{1}{n} \log \left((e^t)^{i_n} e^{-ng(i_n/n)} \right) + \frac{1}{n} \log \sum_{i \in I_n} e^{t \frac{i}{n} - g(i/n) - \left\{ t \frac{i_n}{n} - g\left(\frac{i_n}{n}\right) \right\}}$$

d'où : $h_n(t) \leq f_n(t) \leq h_n(t) + \frac{\log |I_n|}{n}$

Comme $h_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} g^*(t)$

et $\frac{\log |I_n|}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$

Nous avons :

$$f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} g^*(t)$$

Exemple

$$g(t) = \begin{cases} 0 & |t| \leq 1 \\ +\infty & |t| > 1 \end{cases}$$

On a : $g^*(t) = |t|$

$$I_n = [-n, -n+1, \dots, 0, \dots, n-1, n]$$

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log \sum_{i=-n}^{+n} (e^t)^i = \frac{1}{n} \log \frac{(e^t)^{n+1} - (e^t)^{-n}}{e^t - 1} \quad t \neq 0$$

Il est facile de voir que :

$$f_n(t) \rightarrow |t| \quad t \neq 0$$

$$n \rightarrow +\infty$$

et d'ailleurs : $f_n(0) = \frac{1}{n} \log (2n+1) \rightarrow 0$
 $n \rightarrow +\infty$

Propriété I.2.4 - Approximation d'une fonction convexe et logarithmes de polynômes utilisant les valeurs de la fonction polaire

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ convexe et $\text{dom}(f)$ fermé non vide.

Considérons des parties finies I_n de \mathbb{Z} telle que les $K_n = I_n/n$ soient inclus dans $\text{dom}(f^*)$ et "deviennent denses" dans $\text{dom}(f^*)$, et supposons

$$\frac{\log |I_n|}{n} \rightarrow 0$$

$$n \rightarrow +\infty$$

on a :

$$\frac{1}{n} \log \sum_{i \in I_n} e^{-nf^*(\frac{i}{n})} (e^t)^i \rightarrow f(t)$$

$$n \rightarrow +\infty$$

Démonstration :

Avec les hypothèses faites sur f on a $f^{**} = f$ ([.9]), et il suffit donc d'appliquer la propriété I.2.3 avec $g = f^*$ qui est continue sur $\text{dom}(g)$.

Exemple

$$f(x) = |x| \quad f^*(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq 1 \\ +\infty & |x| > 1 \end{cases}$$

$$I_n = \{-n, -n+1, \dots, 0, \dots, n-1, n\}$$

on a :

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log \sum_{k=-n}^{k=+n} (e^t)^k$$

Remarque :

Cette propriété permettrait d'étendre le théorème I.1 à des fonctions convexes dont le domaine se réduit à un intervalle fermé. Malheureusement le procédé de calcul des polynômes n'est plus valable et on perd le caractère algorithmique du théorème.

A titre d'exemple regardons le cas :

$$f(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq 1 \\ +\infty & |x| > 1 \end{cases} \quad f^*(x) = |x|$$

Nous allons définir les approximants pour $n = 2^m$ $m \in \mathbb{N}$.

$$I_{2^m} = \{-m2^m, (-2^m+1)m, \dots, -m, 0, m, \dots, (2^m-1)m, 2^m m\}$$

On vérifie bien que :

$$\frac{\log |I_{2^m}|}{2^m} = \frac{\log(2^{m+1}+1)}{2^m} \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0 \quad \text{et } I_{2^m}/2^m \text{ devient dense dans } \mathbb{R}$$

Le polynôme recherché est :

$$P_{2^m}(e^t) = \sum_{k=-2^m}^0 e^{-2^m f^*\left(\frac{km}{2^m}\right)} (e^t)^{km} + \sum_{k=0}^{2^m} e^{-2^m f^*\left(\frac{km}{2^m}\right)} (e^t)^{km} - 1$$

Que l'on peut écrire :

$$P_{2^m}(e^t) = \sum_{k=0}^{2^m} \{((e^{-t-1})^m)^k + ((e^{t-1})^m)^k\} - 1$$

$$P_{2^m}(e^t) = \frac{(e^{-t-1})^{m(2^m+1)} - 1}{(e^{-t-1})^m - 1} + \frac{(e^{t-1})^{m(2^m+1)} - 1}{(e^{t-1})^m - 1} - 1 \quad t \neq 1 \text{ et } t \neq -1$$

La dernière expression permet de montrer que

$$|t| > 1 \Rightarrow \frac{1}{2^m} \log P_{2^m}(e^t) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$$

Si $t > 1$ on met par exemple en facteur $(e^{t-1})^{m(2^m+1)}$ et on montre que la limite est celle de $\frac{1}{2^m} \log (e^{t-1})^{m(2^m+1)}$ donc $+\infty$.

Si $t < -1$ on fait le même raisonnement avec e^{-t-1} .

Si $t \in]-1,1[$ on a $-1-t < 0$ et $t-1 < 0$
donc

$$P_{2^m}(e^t) \rightarrow 1 \quad \text{et donc}$$

$$\frac{1}{2^m} \log P_{2^m}(e^t) \rightarrow 0$$

Pour les cas $t = \pm 1$ on considère le polynôme sous sa première forme.
Par exemple pour $t = 1$:

$$P_{2^m}(e^t) = \sum_{k=0}^{2^m} ((e^{-2})^m)^{k+1} - 1$$

On voit très facilement que :

$$t=1 \quad 1 \leq P_{2^m}(e^t) \leq (2^m+1) \times 2^{-1}$$

ce qui permet d'affirmer que :

$$t=1 \quad \frac{1}{2^m} \log P_{2^m}(e^t) \rightarrow 0$$

THEOREME 1.2.5. - Approximation d'une fonction convexe et logarithmes de polynômes. Propriété asymptotique des "coefficients des polynômes".

Soit I_n des sous-ensembles finis de \mathbb{Z} et $(a_n^i)_{i \in I_n}$ des ensembles finis de réels strictement positifs. Posons :

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log \sum_{i \in I_n} a_n^i (e^t)^i \quad (1)$$

Supposons qu'il existe $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ telle que :

$$f_n(t) \rightarrow f(t) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

Supposons qu'il existe $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ continue sur $\text{dom}(g)$ et telle que :

$$\text{Max}_{i \in I_n} \left| \frac{1}{n} \log a_n^i + g(i/n) \right| \rightarrow 0 \quad (2)$$

Supposons que $K_n = I_n/n$ sont inclus dans $\text{dom}(g)$ et "devienne dense" dans $\text{dom}(g)$ et

$$\frac{\log |I_n|}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

Alors :

$$g^* \equiv f$$

Démonstration

Soient $t \in \mathbb{R}$ et $\varepsilon > 0$.

D'après (2) il existe N_ε tel que :

$$\forall n \geq N_\varepsilon : -g(i/n) - \varepsilon/2 \leq \frac{1}{n} \log a_n^i \leq -g(i/n) + \varepsilon/2 \quad \forall i \in I_n$$

d'où :

$$\frac{i}{n} \cdot t - g(i/n) - \varepsilon/2 \leq \frac{1}{n} \log a_n^i + \frac{i}{n} \cdot t \leq \frac{i}{n} \cdot t - g(i/n) + \varepsilon/2 \quad \forall i \in I_n$$

et :

$$\begin{aligned} \max_{i \in I_n} \left\{ \frac{i}{n} t - g(i/n) \right\} - \varepsilon/2 &\leq \max_{i \in I_n} \left\{ \frac{1}{n} \log a_n^i + \frac{i}{n} t \right\} \\ &\leq \max_{i \in I_n} \left\{ \frac{i}{n} \cdot t - g(i/n) \right\} + \varepsilon/2 \end{aligned}$$

Et en posant :

$$\begin{aligned} h_n(t) &= \max_{i \in I_n} \{ t \cdot i/n - g(i/n) \} \\ \left| \max_{i \in I_n} \left\{ \frac{1}{n} \log a_n^i + t \cdot \frac{i}{n} \right\} - h_n(t) \right| &\leq \varepsilon/2 \end{aligned}$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \max_{i \in I_n} \frac{1}{n} \log a_n^i e^{t \cdot i} &= \max_{i \in I_n} \left\{ \frac{1}{n} \log a_n^i + t \cdot \frac{i}{n} \right\} \\ \text{et} \quad \left| \max_{i \in I_n} \frac{1}{n} \left\{ \log a_n^i + t \cdot \frac{i}{n} \right\} - \frac{1}{n} \log \left\{ \sum_{i \in I_n} a_n^i e^{t \cdot i} \right\} \right| &\leq \frac{\log |I_n|}{n} \end{aligned}$$

et on a donc

$$|h_n(t) - f_n(t)| \leq \varepsilon/2 + \frac{\log |I_n|}{n}$$

On peut donc choisir n_ϵ tel que :

$$\forall n \geq n_\epsilon \quad |h_n(t) - f_n(t)| \leq \epsilon$$

Or

$$f_n(t) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} f(t) \text{ par hypothèse}$$

et

$$h_n(t) \rightarrow g^*(t) \text{ par application de la propriété I.2.3.}$$

D'où :

$$f \equiv g^*.$$

Note : curieusement, sans le placer dans le cadre de l'analyse convexe, D. Ruelle ([14]) montre un résultat analogue (avec $-g^*$) pour prouver l'existence de transition de phase d'ordre 1.

Exemple

$$\text{Soit } I_n = \{-n, n\} \quad a_n^1 = 1 = a_n^2$$

$$g(t) = \begin{cases} 0 & t = -1 \text{ ou } t = 1 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \log \{ (e^t)^{-n} + (e^t)^n \}$$

On a :

$$f_n(t) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} |t| = f(t)$$

et on vérifie bien que : $g^* = f$

mais évidemment $g^{**} = f^* \neq g$

Si nous avions pris :

$$g(t) = \begin{cases} 0 & t \in [-1, 1] \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

et

$$I_n = \{-n, -n+1, \dots, 1, 0, 1, \dots, n-1, n\}$$

$$a_n^i = 1 \quad i = -n, -n+1, \dots, n-1, n$$

Nous aurions eu :

$$f_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=-n}^{+n} (e^t)^i \rightarrow |t| = f(t)$$

et effectivement :

$$f = g^*$$

$$f^* = g$$

II - ETUDE DES SINGULARITES DES FONCTIONS D'ENERGIE

II.1 - INTRODUCTION

Pour une fonction d'énergie définie par :

$$t \rightarrow \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log P_n(e^t)$$

nous avons pu, au chapitre II, isoler les singularités éventuelles autour d'un point t_0 réel dans une partie intégrale :

$$f(t) = \int_K \log((e^t - x)^2 + y^2) d\mu(x, y)$$

ou K est un voisinage compact de $(e^{t_0}, 0)$ dans \mathbb{R}^2 et μ limite vague d'une sous suite des mesures de répartition des racines des polynômes P_n .

La propriété établie jusqu'à présent est "tout ou rien" car elle implique l'analyticité de la fonction en cas de nullité de la mesure limite.

Dans ce paragraphe nous abordons le domaine très difficile de relier les propriétés de la mesure μ à la nature des singularités de f . C'est d'ailleurs un problème de potentiel ([13]).

Je donnerai d'abord deux théorèmes fournissant des conditions suffisantes de l'existence des dérivées $p^{\text{ème}}$ de f . Un autre théorème montrera que des mesures non nulles peuvent donner des fonctions f analytiques.

Le problème de conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence de singularités de types donnés n'est pas abordés ici. En dehors d'exemples simples traités au coup par coup en physique ([1] [2] [5] [10]

[12] [15] [16] [19]...) l'approche mathématique de ce problème est très difficile car elle fait surtout intervenir la nature du support de la mesure.

II.2 EXISTENCE DES DERIVEES DE L'ENERGIE

II.2.1 - Remarque sur la continuité de l'énergie

La fonction f d'énergie, définie par :

$$f(t) = \int_K \log ((e^t - x)^2 + y^2) d\mu(x, y)$$

était forcément continue d'après sa définition ce qui n'est évidemment pas vraie si la mesure positive μ est quelconque. On peut toutefois remarquer que les mesures μ construites possédaient des propriétés assurant la convergence uniforme des intégrales dans un voisinage de t_0 ce qui assurait la continuité (Chapitre II, paragraphe II). Dans les théorèmes qui suivent la continuité sera assurée par les hypothèses faites sur la mesure μ .

THEOREME II.2.2. - Critère de convergence normale

Soient $t_0 \in \mathbb{R}$, $p \in \mathbb{N}^*$, K un voisinage compact de $(e^{t_0}, 0)$ dans \mathbb{R}^2 et μ une mesure positive à support dans K .

Si la fonction : $(x, y) \rightarrow \frac{1}{|y|^p}$ est μ -intégrable alors la fonction f :

$$t \rightarrow \int_K \log ((e^t - x)^2 + y^2) d\mu(x, y)$$

existe et est p -fois dérivable dans un voisinage de t_0 .

Démonstration

Nous allons étudier :

$$g(u) = \int_K \log ((u-x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y)$$

et choisissons I intervalle ouvert de \mathbb{R} contenu dans K . Nous allons montrer

l'existence et la continuité de g et de ses dérivées d'ordre $1, 2, \dots, p$ dans I ce qui démontrera le résultat annoncé pour la fonction f ($f(t) = g(e^t)$).

Considérons les fonctions :

$$K \longrightarrow \tilde{\mathbb{R}} \\ (x, y) \rightarrow \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2}$$

Pour simplifier supposons que le diamètre de K est plus petit ou égal à 1. On a pour $u \in I$:

$$|\log((u-x)^2 + y^2)^{1/2}| \leq \left| \log |y| \right| \leq \frac{1}{|y|}$$

La fonction $\frac{1}{|y|}$ étant supposée μ -intégrable, le théorème usuel sur les fonctions définies par des intégrales de Lebesgue ([11] [17] [18]) nous assure l'existence et la continuité de la fonction g sur I .

De plus :

$$\frac{\partial}{\partial u} \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} = \frac{u-x}{(u-x)^2 + y^2} = -\operatorname{Re} \frac{1}{x-u+iy}$$

et plus généralement :

$$\frac{\partial^k}{\partial u^k} \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} = -\operatorname{Re} \frac{(k-1)!}{(x-u+iy)^k}$$

Il vient donc :

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial u^k} \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} \right| \leq \frac{(k-1)!}{|y|^k}$$

Les fonctions (à valeurs dans $\tilde{\mathbb{R}}$) :

$$(x, y) \rightarrow \frac{1}{|y|^k} \quad k = 1, 2, \dots, p$$

étant μ -intégrables par hypothèse il suffit d'appliquer p -fois le théorème de dérivation sous le signe somme relatif aux intégrales de Lebesgue pour prouver que g est p -fois dérivable et que :

$$\frac{d^k}{du^k} g(u) = \int_K \frac{\partial}{\partial u^k} \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y)$$

$$u \in I$$

$$k = 1, 2, \dots, p$$

De plus les fonctions :

$$I \rightarrow \tilde{\mathbb{R}}$$

$$u \rightarrow \frac{\partial^k}{\partial u^k} \log((u-x)^2+y^2) = -\operatorname{Re} \frac{(k-1)!}{(x-u+iy)^k}$$

sont continues μ -presque partout (le segment I est de mesure nulle) pour $k = 1, 2, \dots, p$ ce qui assure la continuité des dérivées $g^{(k)}(u)$ $u \in I$ $k = 1, 2, \dots, p$.

THEOREME II.2.3 - (Critère de convergence uniforme)

Soient $t_0 \in \mathbb{R}$ et $p \in \mathbb{N}^*$

Soient I un intervalle ouvert de \mathbb{R}^+ contenant e^{t_0} , K voisinage compact d'intérieur non vide de \mathbb{R}^2 contenant I et μ une mesure positive bornée à support dans K .

S'il existe une famille Δ_ε $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ de parties mesurables, d'intérieur non vide de \mathbb{R}^2 contenant I , et une application $\phi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ vérifiant :

$$\forall u \in I: \int_{\Delta_\varepsilon(\sqrt{(x-u)^2+y^2})^p} \frac{d\mu(x,y)}{d\mu(x,y)} \leq \phi(\varepsilon)$$

et

$$\begin{aligned} \phi(\varepsilon) &\rightarrow 0 \\ \varepsilon &\rightarrow 0^+ \end{aligned}$$

Alors la fonction f :

$$t \xrightarrow{f} \int_K \log((e^t-x)^2+y^2) d\mu(x,y)$$

existe et est p -fois continuellement dérivable dans un voisinage de t_0 .

Démonstration

La démonstration suit la démarche classique à la convergence uniforme ([18]). Nous en donnons les grandes lignes.

Tout d'abord nous étudions à la place de f la fonction :

$$g(u) = \int_K \log((u-x)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y)$$

et nous allons montrer qu'elle existe et est p-fois continuellement dérivable sur I. La relation $f(t) = g(e^t)$ nous donnera la conclusion.

De plus pour simplifier les calculs nous supposons que le diamètre de K est inférieur à 1 ce qui entraîne :

$$\log((x-u)^2+y^2)^{1/2} \leq 0$$

$$|\log((x-u)^2+y^2)^{1/2}| \leq \frac{1}{\sqrt{(x-u)^2+y^2}} \leq \frac{1}{(\sqrt{(x-u)^2+y^2})^p}$$

L'existence de $g(u)$ $u \in I$ est en fait contenu dans les hypothèses.

Continuité de g

On peut écrire pour $u, u_0 \in I$

$$\begin{aligned} |g(u)-g(u_0)| &\leq \left| \int_{K \setminus \Delta_\epsilon} (\log((x-u)^2+y^2)^{1/2} - \log((x-u_0)^2+y^2)^{1/2}) d\mu(x,y) \right. \\ &\quad \left. + \left| \int_{\Delta_\epsilon} \log((x-u)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \right| \right. \\ &\quad \left. + \left| \int_{\Delta_\epsilon} \log((x-u_0)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \right| \right. \end{aligned}$$

D'où :

$$|g(u)-g(u_0)| \leq \int_{K \setminus \Delta_\epsilon} \left| \log \frac{((x-u)^2+y^2)^{1/2}}{((x-u_0)^2+y^2)^{1/2}} \right| d\mu(x,y) + 2\phi(\epsilon)$$

Pour $\eta > 0$ choisissons $\phi(\epsilon) \leq \eta/4$

La fonction : $u \rightarrow \log((x-u)^2+y^2)^{1/2}$ converge uniformément vers $\log((x-u_0)^2+y^2)^{1/2}$ quand $u \rightarrow u_0$ pour $K \setminus \Delta_\epsilon$ car $K \setminus \Delta_\epsilon$ est un compact ne contenant pas I.

On peut choisir δ tel que :

$$|u-u_0| \leq \delta \Rightarrow \left| \log \frac{((x-u)^2+y^2)^{1/2}}{((x-u_0)^2+y^2)^{1/2}} \right| \times \mu(K \setminus \Delta_\epsilon) \leq \eta/2 \quad (x,y) \in K \setminus \Delta_\epsilon$$

et nous avons alors :

$$|u-u_0| \leq \delta \Rightarrow |g(u)-g(u_0)| \leq \eta \quad (x,y) \in K \setminus \Delta_\epsilon$$

Dérivabilité de g $p \geq 1$.

$$\text{On a } \frac{\partial^k}{\partial u^k} \log((x-u)^2+y^2)^{1/2} = -Re \frac{(k-1)!}{(x-u+iy)^k}$$

d'où :

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial u^k} \log((x-u)^2+y^2)^{1/2} \right| \leq \frac{(k-1)!}{(\sqrt{(x-u)^2+y^2})^k}$$

L'existence et la continuité de :

$$h(u) = \int_K \frac{\partial}{\partial u} \log((x-u)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \quad u \in I$$

sont donc assurées par les hypothèses.

Nous allons montrer que :

$$\begin{aligned} \int_{u_0}^u h(v) dv &= \int_K \log((x-u)^2+y^2)^{1/2} - \int_K \log((x-u_0)^2+y^2)^{1/2} \\ &= g(u) - g(u_0) \end{aligned}$$

Ce qui prouvera que g est dérivable et $g'(u) = h(u)$ $u \in I$.

Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \int_{u_0}^u h(v) dv &= \int_{u_0}^u \left(\int_{K-\Delta_\epsilon} \frac{\partial}{\partial v} \log((x-v)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \right) dv \\ &\quad + \int_{u_0}^u \left(\int_{\Delta_\epsilon} \frac{\partial}{\partial v} \log((x-v)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \right) dv \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \int_{u_0}^u h(v) dv &= \int_{K-\Delta_\epsilon} \left(\int_{u_0}^u \frac{\partial}{\partial v} \log((x-v)^2+y^2)^{1/2} dv \right) d\mu(x,y) \\ &\quad + \int_{u_0}^u \left(\int_{\Delta_\epsilon} \frac{\partial}{\partial v} \log((x-v)^2+y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \right) dv \end{aligned}$$

D'où :

$$\int_{u_0}^u h(v)dv - g(u) + g(u_0) = \int_{\Delta_\varepsilon} \log((x-u)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \\ + \int_{\Delta_\varepsilon} \log((x-u_0)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y) \\ + \int_{u_0}^u \int_{\Delta_\varepsilon} \frac{\partial}{\partial v} \log((x-v)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y)$$

et

$$\left| \int_{u_0}^u h(v)dv - g(u) + g(u_0) \right| \leq 2\phi(\varepsilon) + |u - u_0| \phi(\varepsilon)$$

Ceci pour tout $\varepsilon > 0$ d'où :

$$\int_{u_0}^u h(v)dv = g(u) - g(u_0)$$

ce qui démontre le résultat.

La démonstration pour les dérivées d'ordres supérieures est la même et on a :

$$\frac{d^k}{du^k} \int_K \log((x-u)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y) = \int_K -\operatorname{Re} \frac{(k-1)!}{(x-u+iy)^k} d\mu(x,y)$$

Application II.2.4

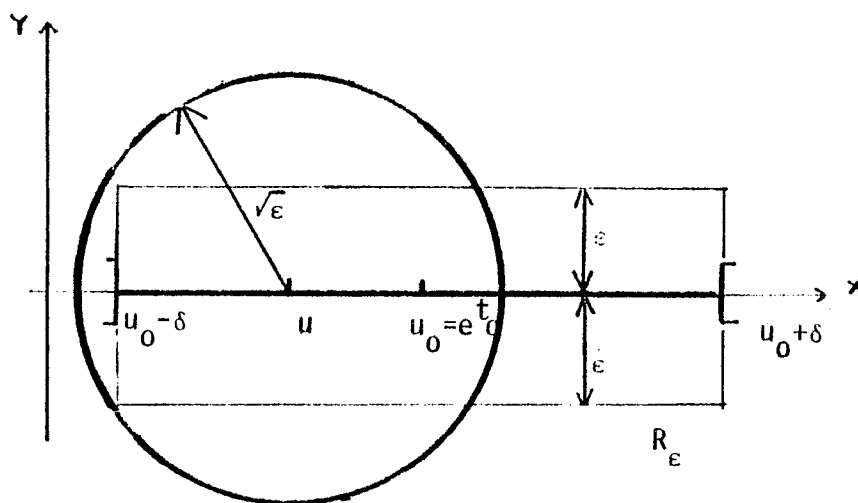
Nous allons montrer un exemple dans lequel le critère de convergence uniforme permet de conclure alors que le critère de convergence normale ne le permet pas.

Supposons que μ admette une densité $\gamma(x,y)$ bornée dans un voisinage K compact de $(e^{t_0}, 0)$.

La fonction :

$$t \rightarrow \int_K \log((e^t - x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x,y)$$

est alors continuellement dérivable dans un voisinage de t_0 .



Posons : $I =]u_0 - \delta, u_0 + \delta[\quad (c \in K)$

R_ϵ le rectangle fermé matérialisé sur le dessin.

$B_u^{\sqrt{\epsilon}}$ la boule de centre $(u, 0)$ et de rayon $\sqrt{\epsilon}$

$$\Delta_\epsilon = K \cap R_\epsilon$$

$$\int_{\Delta_\epsilon} \frac{\gamma(x,y)}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} dx dy = \int_{B_u^{\sqrt{\epsilon}} \cap K \cap R_\epsilon} \frac{\gamma(x,y)}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} dx dy + \int_{(R_\epsilon \setminus B_u^{\sqrt{\epsilon}}) \cap K} \frac{\gamma(x,y)}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} dx dy$$

La densité $\gamma(x,y)$ étant bornée on a :

$$\left| \int_{B_u^{\sqrt{\epsilon}} \cap K \cap R_\epsilon} \frac{\gamma(x,y)}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} dx dy \right| \leq M \int_{B_u^{\sqrt{\epsilon}} \cap R_\epsilon} \frac{dx dy}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} = 2\pi M \sqrt{\epsilon}$$

et

$$\left| \int_{(R_\epsilon \setminus B_u^{\sqrt{\epsilon}}) \cap K} \frac{\gamma(x,y)}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} dx dy \right| \leq \frac{M}{\sqrt{\epsilon}} \int_{R_\epsilon} dx dy \leq 4\delta M \sqrt{\epsilon}$$

D'où :

$$\left| \int_{\Delta_\epsilon} \frac{\gamma(x,y) dx dy}{\sqrt{(x-u)^2 + y^2}} \right| \leq L \sqrt{\epsilon}$$

ce qui prouve le résultat.

Or pour $\gamma(x,y) = 1$ par exemple

$$(x,y) \rightarrow \frac{1}{|y|}$$

n'est pas intégrable dans un voisinage de l'axe réel (positive). Le critère de convergence normale est donc insuffisant.

II.3 - UNE CONDITION D'ANALYCITE DE L'ENERGIE

II.3.1 - THEOREME (énoncé)

Soit $f : t \rightarrow \int_K \log((e^t - x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y)$ où K est un voisinage compact de $(e^{t_0}, 0)$.

Si μ admet une densité analytique dans un voisinage de $(e^{t_0}, 0)$ alors f est analytique dans un voisinage de t_0 .

II.3.2 - Schéma de la démonstration

En posant : $g(u) = \int_K \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y)$.

Nous avons $f(t) = g(e^t)$.

Nous allons donc montrer que g est analytique dans un voisinage de $e^{t_0} = u_0$. Par une translation de u_0 nous sommes ramenés à l'étude de :

$$h(u) = \int_K \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} d\mu(x, y)$$

au voisinage de $(0,0)$ où μ admet une densité $\gamma(x, y)$ vérifiant :

$$\gamma(x, y) = \sum_{n, m \geq 0} a_{n, m} x^n y^m$$

Il existe $x_0 \neq 0$ et $y_0 \neq 0$ tels que $\sum_{n, m} a_{n, m} x_0^n y_0^m$ soit convergente.

Soient $0 < h < \rho < \min\{|x_0|, |y_0|\}$, $I =]-h, h[$ et $B = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq \rho^2\}$. Nous allons étudier $S(u) = \int_B \log((u-x)^2 + y^2)^{1/2} \gamma(x, y) dx dy$ et montrer que cette fonction est analytique au voisinage de 0. Pour cela nous allons montrer qu'il existe M et $\delta \in \mathbb{R}^+$ tels que :

$$|S^{(p)}(u)| \leq M p! \delta^p \quad \forall u \in I$$

ce qui est une condition nécessaire et suffisante d'analyticit  [18].

II.3.3. - LEMME

$$\begin{aligned}
S'(u) &= \int_B \frac{\partial}{\partial u} (\log \sqrt{(u-x)^2+y^2}) \gamma(x,y) \, dx \, dy = \\
&\int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial}{\partial x} (\gamma(x,y)) \, dx \, dy \\
&- \int_{\partial B} (\log \sqrt{(u-x)^2+y^2}) \gamma(x,y) \, dy
\end{aligned}$$

Démonstration

$\gamma(x,y)$ est bornée sur B et nous pouvons donc appliquer la propriété II.2.3. On remarque de plus que :

$$\frac{\partial}{\partial u} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} = - \frac{\partial}{\partial x} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2}$$

et il suffit alors d'appliquer la formule élémentaire de Green-Riemann ([18]) :

$$\begin{aligned}
\int_B \frac{\partial}{\partial x} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} (\gamma(x,y)) \, dx \, dy &= \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) \, dy \\
&= - S'(u) + \int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial}{\partial x} \gamma(x,y) \, dx \, dy
\end{aligned}$$

Le fait que la fonction : $(x,y) \rightarrow (\log \sqrt{(u-x)^2+y^2}) \gamma(x,y)$

devienne infini en $(u,0)$ n'est pas gênant car si Δ_ϵ^u désigne la boule fermée de centre $(u,0)$ et de rayon ϵ on a :

$$\begin{aligned}
\int_{\Delta_\epsilon} \frac{\partial}{\partial u} (\log \sqrt{(u-x)^2+y^2}) \gamma(x,y) \, dx \, dy &\rightarrow 0 \\
&\epsilon \rightarrow 0 \\
\int_{\Delta_\epsilon} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) \, dx \, dy &\rightarrow 0 \\
&\epsilon \rightarrow 0 \\
\int_{\partial \Delta_\epsilon} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) \, dy &\rightarrow 0 \\
&\epsilon \rightarrow 0
\end{aligned}$$

II.3.4 - LEMME

Pour $p \in \mathbb{N}^*$ on a :

$$\begin{aligned}
S^{(p)}(u) &= \int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial^p}{\partial x^p} \gamma(x,y) \, dx \, dy - \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial^{p-1}}{\partial x^{p-1}} \gamma(x,y) \, dy \\
&- \int_B \sum_{i=1}^{p-1} \frac{\partial^i}{\partial x^i} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial^{p-i-1}}{\partial x^{p-i-1}} \gamma(x,y) \, dy
\end{aligned}$$

Démonstration

Il suffit de remarquer dans l'égalité du lemme II.3.3 que l'on peut écrire :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial u} \int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial}{\partial x} \gamma(x,y) \, dx dy \\ &= \int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x,y) \, dx dy \\ & - \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial}{\partial x} \gamma(x,y) dy \end{aligned}$$

par application de ce même lemme avec la densité $\frac{\partial}{\partial x} \gamma(x,y)$. De plus le second terme dans l'expression de $S'(u)$ du lemme II.3.3 est une intégrale de bord, donc

$$\frac{\partial}{\partial u} \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) dy = \int_{\partial K} \frac{\partial}{\partial u} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) dx dy \quad u \in I$$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned} S^{(2)}(u) &= \int_B \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma(x,y) dx dy \\ & - \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \frac{\partial}{\partial x} \gamma(x,y) dy \\ & - \int_{\partial B} \frac{\partial}{\partial u} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \gamma(x,y) dy \end{aligned}$$

et la formule annoncée se démontre par récurrence.

II.3.5. - Quelques majorations

$$1) \quad \exists M_1, \delta_1 \in \mathbb{R}^+ : \left| \frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) \right| \leq M_1 j! \delta_1^j \quad \begin{array}{l} j = 0, 1, 2, \dots \\ (x,y) \in B \end{array}$$

$$2) \quad \exists \delta_2 \in \mathbb{R}^+ : \left| \frac{\partial^j}{\partial u^j} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \right| \leq (j-1)! \delta_2^j \quad \begin{array}{l} j = 0, 1, 2, \dots \\ (x,y) \in \partial B \\ u \in I \end{array}$$

Démonstration

1) On sait que $\sum a_{n,m} x_0^n y_0^n$ converge, $|a_{m,n} x_0^n y_0^n|$ est donc borné par $\alpha \geq 0$

$$\gamma(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{m=0}^{\infty} a_{n,m} y^m \right) x^n \quad (x,y) \in B$$

$$\frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) = \sum_{n=j}^{\infty} \left(\sum_{m=0}^{\infty} a_{n,m} y^m \right) n(n-1)\dots(n-j+1)x^{n-j}$$

$$\frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) = \sum_{n=j}^{\infty} \left(\sum_{m=0}^{\infty} a_{n,m} \left(\frac{y}{y_0}\right)^m y_0^m \right) n(n-1)\dots(n-j+1) \left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-j} \frac{x_0^n}{x_0^j}$$

d'où :

$$\left| \frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) \right| \leq \alpha \sum_{n=j}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} n(n-1)\dots(n-j+1) \left| \frac{y}{y_0} \right|^m \left| \frac{x}{x_0} \right|^{n-j} \frac{1}{|x_0^j|}$$

or :

$$\left| \left(\frac{y}{y_0}\right) \right| \leq \frac{h}{\rho} < 1, \left| \frac{x}{x_0} \right| \leq \frac{h}{\rho} < 1$$

d'où :

$$\left| \frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) \right| \leq \frac{\alpha}{|x_0|^j} \frac{1}{1-\frac{h}{\rho}} \sum_{n=j}^{\infty} n(n-1)\dots(n-j+1) \left(\frac{h}{\rho}\right)^{n-j}$$

$$\left| \frac{\partial^j}{\partial x^j} \gamma(x,y) \right| \leq \frac{\alpha}{|x_0|^j} \frac{1}{1-\frac{h}{\rho}} \left(\frac{1}{1-\frac{h}{\rho}}\right)^{(j)}_{u=\frac{h}{\rho}} \leq \frac{\alpha}{|x_0^j| \left(1-\frac{h}{\rho}\right)} \frac{j!}{\left(1-\frac{h}{\rho}\right)^{j+1}}$$

d'où le résultat avec $M_1 = \frac{\alpha}{\left(1-\frac{h}{\rho}\right)^2} \delta_1 = \frac{1}{|x_0-x_0 \frac{h}{\rho}|}$

2) On a déjà remarqué que :

$$\left| \frac{\partial^j}{\partial u^j} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \right| = \left| \operatorname{Re} \frac{(j-1)!}{(x-u+iy)^j} \right| \leq \frac{(j-1)!}{|x-u+iy|^j}$$

Or si $u \in I$ et $(x,y) \in \partial B$ $|x-u+iy| \geq \rho-h$ d'où le résultat avec $\delta_2 = \frac{1}{\rho-h}$

II.3.6. - Démonstration du théorème

Commençons par majorer $\left| \sum_{j=1}^{p-1} \frac{\partial^j}{\partial u^j} \log \sqrt{(u-x)^2+y^2} \cdot \frac{\partial^{p-j-1}}{\partial x^{p-j-1}} \gamma(x,y) \right|$ par

$$\sum_{j=1}^{p-1} (j-1)! \delta_2^j M_1 (p-j-1)! \delta_1^{p-j-1} \text{ pour } (x,y) \in \partial B \quad u \in I$$

ce que nous écrivons :

$$\delta_2 M_1 \sum_{j=1}^{p-1} (j-1)! \delta_2^{j-1} (p-2-(j-1))! \delta_1^{p-2-(j-1)}$$

nous pouvons encore écrire cette quantité sous la forme :

$$\delta_2 M_1 (p-2)! \sum_{j=0}^{p-2} \frac{j! \delta_1^j (p-2-j)! \delta_2^{p-2-j}}{(p-2)!}$$

$$\leq p! \frac{\delta_2 M_1}{p(p-1)} (\delta_1 + \delta_2)^{p-2} = \frac{\delta_2 M_1}{p(p-1)} \frac{1}{(\delta_1 + \delta_2)} p! (\delta_1 + \delta_2)^p$$

Nous en déduisons immédiatement qu'il existe α_1 et β_1 tels que

$$\left| \int_{\partial B} \sum_{j=1}^{p-1} \frac{\partial^j}{\partial u^j} \log \sqrt{(u-x)^2 + y^2} \frac{\partial^{p-j-1}}{\partial x^{p-j-1}} \gamma(x,y) dx dy \right| \leq \alpha_1 p! \beta_1^p$$

De plus il vient immédiatement que

$$\left| \int_B \log \sqrt{(u-x)^2 + y^2} \frac{\partial^p}{\partial x^p} \gamma(x,y) dx dy \right| \leq M_1 p! \delta_1^p \int_B |\log \sqrt{(u-x)^2 + y^2}| dx dy$$

or $\int_B \log \sqrt{(u-x)^2 + y^2} dx dy$ est une fonction continue de u .

Il est aisé de voir que $\int_B |\log \sqrt{(u-x)^2 + y^2}| dx dy$ est donc bornée pour $u \in I$ et il existe α_2 et β_2 tels que :

$$\left| \int_B \log \sqrt{(u-x)^2 + y^2} \frac{\partial^p}{\partial x^p} \gamma(x,y) dx dy \right| \leq \alpha_2 p! \beta_2^p$$

Enfin :

$$\left| \int_{\partial B} \log \sqrt{(u-x)^2 + y^2} \frac{\partial^{p-1}}{\partial x^{p-1}} \gamma(x,y) dx dy \right| \leq$$

$$M_1 (p-1)! \delta_1^{p-1} \int_{\partial B} |\log \sqrt{(u-x)^2 + y^2}| dy$$

et puisque $(x-u)^2 + y^2 \geq (\rho-h)^2$ il existe donc α_3 et β_3 tels que la quantité ci-dessus soit majorée par : $\alpha_3 p! \beta_3^p$.

-Il vient donc : $|S^{(p)}(u)| \leq (\alpha_1 \beta_1^p + \alpha_2 \beta_2^p + \alpha_3 \beta_3^p) p!$
 $u \in I$

et nous avons donc : $|S^{(p)}(u)| \leq M p! \delta^p$ avec

$$\delta = \text{Max}\{\beta_1, \beta_2, \beta_3\} \quad m = \{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3\}$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. ABE
Singularity of Specific heat in the second order phase transition.
Progress in theoretical Physics, Vol. 38, n° 2, August 1967.
- [2] M.E. FISHER
The nature of critical points. Lectures in theoretical Physics 7 c.
Boulder : University of Colorado Press 1964.
- [3] R.B. ISRAEL
Convexity in the theory of lattice gases
Princeton Series in Physics. 1979
- [4] G. JONES
Complex Temperatures and Phase Transitions. Journal of Mathematical
Physics.
Volume 7, number 11, november 1966.
- [5] S. KATSURA
Distribution of roots of the complex temperature plane
Prog. Theor. Phys. Vol. 88 (1967), n° 6
- [6] S. KATSURA
On the theory of Cooperative Phenomena
Prog. Theor. Physic. Vol. 11, n° 4-5, April May 1964
- [7] B. LACOLLE
Problème d'existence et de calcul numérique de transition de phase.
S.A.N.G. n° 318
- [8] B. LACOLLE
Potentiel logarithmique et Transition de phase . S.A.N.G. N° 338
- [9] P.J. LAURENT
Approximation Optimisation - Hermann
- [10] T.D. LEE, C.N. YANG
Statistical theory of equation of state and phase transitions II.
Lattice gas and Ising model.
Physical Review Vol. 87, number 3, august 1952.
- [11] C.M. MARLE
Mesures et Probabilités - Hermann
- [12] S. ONO, Y. KARAKI, M. SUZUKI, C. KAWABATA
Statistical thermodynamics of finite Ising model
Journal of Physical Society of Japan, Vol. 25, n° 1 (1968)
- [13] H. POINCARÉ
Le potentiel Newtonien

- [14] D. RUELLE
Statistical Mechanics.
The Mathematics Physics monograph series. W.A. Benjamin.
- [15] M. SUZUKI
Note on singularity of specific heat in the second order phase transition
Progress in theoretical Physics. Vol. 38, n° 6, Dec. 1967.
- [16] M. SUZUKI, C. KAWABATA, S. ONO, Y. KARAKI, M. IKEDA
Statistical thermodynamics of finite Ising Model II
Journal of the physical Society of Japan, Vol. 29, n° 4 october 1970
- [17] A.E. TAYLOR
General theory of functions and integration
Blaisdell Publishing Company 1965.
- [18] G. VALIRON
Théorie des fonctions.
Masson 1966
- [19] C.N. YANG, T.D. LEE
Statistical theory of equations of state and phase transitions I
Theory of condensation.
Physical Review volume 87, n° 3, august 1952.

CHAPITRE IV

MATRICES DE TRANSFERT ET FONCTIONS DE PARTITION

INTRODUCTION

A ce chapitre commence une partie plus algébrique de ce travail. Après avoir montré le rôle fondamental des fonctions de partition, de leurs racines, de leurs coefficients dans l'étude des singularités de la fonction d'énergie nous allons étudier ces fonctions de partitions et leurs constructions.

Le procédé le plus adapté à la construction des fonctions de partition est celui des matrices de transfert. Ce procédé très classique en physique ([3] [5] [10]) est généralement utilisé de deux manières. La première correspond au cas où l'on peut diagonaliser effectivement les matrices et elle mène à des solutions analytiques ; l'exemple classique en est le modèle d'Ising (voir chapitre VI). D'autres exemples seront trouvés dans [5] tome I. La seconde manière consiste à localiser les racines des fonctions de partitions. Les théorèmes généraux sur la localisation des racines des polynômes ([4] [6] [8] [13] [16] [17] [23]), ne sont pas d'un grand secours. L'idée de faire apparaître la structure physique d'où provient le polynôme a permis à Lee et Yang d'établir un célèbre théorème de localisation de racines ([14] [25]).

L'idée de chercher des théorèmes de localisation propres aux fonctions de partition a été reprise par T. Asano ([2]) et D. Ruelle ([15] [18] [19] [20]) et bien d'autres. De très nombreux résultats ont été trouvés ([1] [9] [11] [12] [21] [22]...).

Ce chapitre est consacré à la construction des fonctions de partition à l'aide des matrices de transfert et à l'étude mathématique de ces matrices qui sont des matrices polynomiales à coefficients positifs, ainsi que des

polynômes que l'on peut construire à partir de sommes et produits de matrices de ce type. Un théorème de localisation est établi dans un cas assez général. Le reste du chapitre est consacré à l'étude des racines de polynômes de la forme :

$$\text{Trace } (M_p(z))^P$$

où les $M_p(z)$ sont des matrices polynomiales. La généralisation d'un théorème utilisé en physique pour les systèmes unidimensionnels ([3] [7] [24]), est donné, ainsi que l'explicitation de cas particuliers et des exemples visant à montrer la richesse du problème.

I - MATRICES DE TRANSFERT : DEFINITION ET FORMES TENSORIELLES POUR DES MODELES A SPINS D'ISING

I.1 - LES MODELES D'INTERACTIONS ET LES MATRICES DE TRANSFERT [3]

I.1.1. - Cas homogène

Considérons un système élémentaire pouvant prendre n états numérotés de 1 à n . Associons à l'état i un nombre $E(i)$: l'énergie du système dans l'état i . Ce nombre sera un entier relatif par exemple.

A un système élémentaire on peut associer la fonction :

$$\sum_{i=1}^n z^{E(i)}$$

qui n'est autre, sous une forme simplifiée, que la fonction de partition.

Considérons maintenant le système formé de p systèmes élémentaires de type précédent :



Il peut prendre n^p états. L'énergie associée à l'état (i_1, i_2, \dots, i_p) sera égale à la somme :

1) des énergies de chaque sous système

$$E(i_1) + E(i_2) + \dots + E(i_p)$$

2) d'énergies d'interactions de chaque sous-système avec le suivant, le dernier interagissant avec le premier :

$$E'(i_1, i_2) + E'(i_2, i_3) + \dots + E'(i_{p-1}, i_p) + E'(i_p, i_1)$$

La fonction de partition associée serait :

Note : Pour des raisons évidentes dues à la physique du problème on posera souvent $z = e^{-\beta}$

$$S_p(z) = \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_p) \in \{1, 2, \dots, n\}^p} z^{(E(i_1) + E(i_2) + \dots + E(i_p) + E'(i_1, i_2) + E'(i_2, i_3) + \dots + E'(i_{p-1}, i_p))}$$

Si on considère la matrice $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ définie par son terme (i, j) :

$$z^{E(i) + E'(i, j)} = z^{n_{i, j}}$$

On a :

$$S_p(z) = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_p} z^{n_{i_1, i_2} + n_{i_2, i_3} + \dots + n_{i_{p-1}, i_p} + n_{i_p, i_1}}$$

$$S_p(z) = \text{trace}(M(z))^p$$

Cette matrice $M(z)$ sera appelée *matrice de transfert*.

Exemple

Considérons la chaîne de p systèmes à deux états avec :

$$E(1) = E(2) = 0$$

$$E'(1, 1) = E'(2, 2) = 0$$

$$E'(1, 2) = E'(2, 1) = 1$$

$$M(z) = \begin{pmatrix} 1 & z \\ z & 1 \end{pmatrix}$$

et on a :

$$\text{trace}(M(z))^p = (1+z)^p + (1-z)^p$$

I.1.2 - Cas non homogène

Nous pouvons considérer des systèmes S_k différents :

S_k prend n_k états. L'énergie interne de S_k dans l'état i_k est $E_k(i_k)$.

L'énergie d'interactions, de S_k dans l'état i_k et S_{k+1} dans l'état i_{k+1} est

$$E'_k(i_k, i_{k+1})$$

En construisant les matrices $M_k(z) \in \mathcal{M}_{n_k, n_{k+1}}(\mathbb{R}[z])$ de terme (i_k, i_{k+1}) :

$$z^{E_k(i_k) + E'_k(i_k, i_{k+1})}$$

on a :

$$z^{E_1(i_1)+E_2(i_2)+\dots+E_p(i_p)+E'(i_1,i_2)+E'(i_2,i_3)+\dots+E'(i_p,i_1)}$$

$$i_1 \in \{1, 2, \dots, n_1\}$$

$$\vdots$$

$$i_p \in \{1, 2, \dots, n_p\}$$

égal à : $\text{Trace}(M_1(z) M_2(z) \dots M_p(z))$

Les différentes matrices $M_i(z)$ seront aussi appelées *matrices de transfert*.

I.1.3 - Factorisation des matrices de transfert

Dans le cas le plus général du paragraphe I.1.2 on peut écrire M_k sous la forme d'un produit de deux matrices :

$$M_k(z) = A_k(z) B_k(z)$$

$$A_k(z) \in \mathcal{M}_{n_k, n_k}(\mathbb{R}[z])$$

où $A_k(z)$ est une matrice diagonale définie par : $A_k(i_k, i_k) = z^{E_k(i_k)}$

$$\text{où } \begin{cases} B_k(z) \in \mathcal{M}_{n_k, n_{k+1}}(\mathbb{R}[z]) \\ B_k(i_k, i_{k+1}) = \bar{z}^{E'_k(i_k, i_{k+1})} \end{cases}$$

I.2 - EXPRESSION DES MATRICES DE TRANSFERT POUR DES MODELES DE TYPE D'ISING FORME TENSORIELLE ([5][10])

Ces formes particulières de matrices de transfert seront surtout utilisées dans les chapitres V et VI mais elles s'introduisent naturellement dans le cadre présenté ci-dessus.

I.2.1 - Numérotation des états d'un système de n spins

Un sous-système sera un système de n spins à valeurs ± 1 . Ce sous-système prendra donc 2^n états.

La numérotation se fait par récurrence. Les états d'un système d'un seul spin sera :

Etat 1 : +1

Etat 2 : -1

Pour deux spins on prendra la numérotation suivante :

Etat 1 : +1 +1

Etat 2 : -1 +1

Etat 3 : +1 -1

Etat 4 : -1 -1

\uparrow \uparrow
 1er spin 2ème spin

Plus généralement pour un système de n spins on considèrera les états où le dernier spin vaut +1 suivis des états où le dernier spin vaut -1.

I.2.2. - Matrice de Pauli. Produit de Kronecker

On pose

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbb{1} &= 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1 \\
 S_r &= 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ S \ 0 \ \dots \ 0 \ 1 && n \text{ produits} \\
 C_r &= 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ C \ 0 \ \dots \ 0 \ 1 \\
 &\qquad\qquad\qquad r^{\text{ème}} \text{ position}
 \end{aligned}$$

Les produits \otimes étant définis par :

$$B = (b_{ij}) \quad A \otimes B = (b_{ij}A)$$

Propriété I.2.2

S_r est une matrice diagonale et

$S_r(i,i)$ = valeur du spin r dans l'état i

$$C_r(i,j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ et } j \text{ ne diffèrent que du spin } r \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

pour $r = 1, 2, \dots, n$ et $i, j = 1, 2, \dots, 2^n$

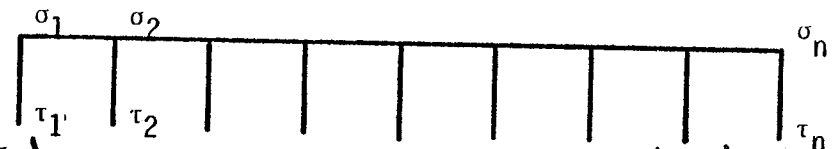
Démonstration

Elle est évidente d'après la numérotation des états de spins choisie.
Donnons plutôt un exemple pour un système à deux spins cité plus haut.

$$S_1 = S \otimes 1 = \begin{pmatrix} +1 & & & \\ & -1 & 0 & \\ & 0 & +1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad S_2 = 1 \otimes S = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & 0 & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_1 = C \otimes 1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad C_2 = 1 \otimes C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Exemple 1 : Interaction entre deux chaînes de n spins



Soit $\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \sigma_n \end{pmatrix}$ l'état de la première chaîne et $\tau = \begin{pmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \vdots \\ \tau_n \end{pmatrix}$ l'état de la seconde.

Par rapport au paragraphe I on prendra $z = e^{-\beta}$

On suppose l'énergie interne de la première chaîne donnée par :

$$- \sum_{r=1}^n J_r \sigma_r \sigma_{r+1} \quad (\sigma_{n+1} = \sigma_1) \quad J_r = \pm 1$$

Il est facile de voir la matrice qui correspond aux états internes du système de la première chaîne peut se décomposer en un produit de n matrices diagonales chacune étant affectée à une liaison. La matrice correspondant à la r^{ème} liaison est :

$$(\text{ch}(\beta J_r)) \mathbf{1} + (\text{sh}(\beta J_r)) S_r S_{r+1}$$

et la première matrice sera :

$$A = \prod_{r=1}^n ((\text{ch } \overset{\circ}{J}_r) \mathbb{1} + (\text{sh } \overset{\circ}{J}_r) S_r S_{r+1}) \quad (*)$$

Si l'énergie d'interaction entre deux lignes est donnée par :

$$- \sum_{r=1}^n \overset{v}{J}_r \sigma_r \tau_r$$

on remarque que la seconde matrice sera :

$$B = \prod_{r=1}^n (\exp(\beta \overset{v}{J}_r) \mathbb{1} + \exp(-\beta \overset{v}{J}_r) C_r) \quad (*)$$

En effet regardons le terme $B(i,j)$ de ce produit commutatif. Il peut s'écrire :

$$\sum_{k_1, k_2, \dots, k_{n-1}} B_1(i, k_1) B_2(k_1, k_2) \dots B_n(k_{n-1}, j)$$

où B_r désigne la matrice du produit où figure $\overset{v}{J}_r$.

On voit qu'il n'y a qu'un seul terme de cette somme qui n'est pas nul.

Regardons en effet $B_1(i, k_1)$ par exemple. Il n'y a que deux termes $B_1(i, k_1) \neq 0$. $B_1(i, i) = \exp(\beta \overset{v}{J}_1)$ et un terme $B_1(i, k) = \exp(-\beta \overset{v}{J}_1)$ où k est le numéro de l'état qui diffère que du spin numéro 1 de l'état i .

Le choix de $B_1(i, i)$ ou $B_1(i, k)$ est imposé par le fait que i et j diffèrent ou non du spin 1. En effet si le mauvais choix est fait on sera amené par la suite à prendre un terme nul.

Il en résulte que si i et j diffèrent par la valeur des spins i_1, i_2, \dots, i_m ($M = \{i_1, i_2, \dots, i_m\}$), $B(i, j)$ sera :

$$\prod_{r \notin M} \exp(\beta \overset{v}{J}_r) \prod_{r \in M} \exp(-\beta \overset{v}{J}_r)$$

qui est égal à :

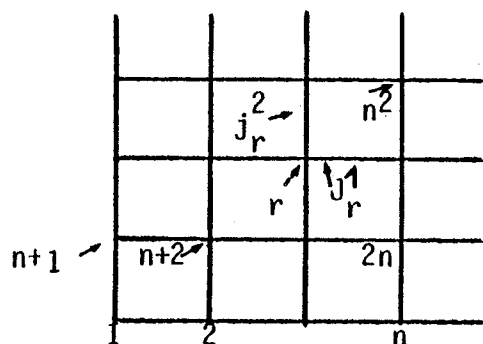
$$\exp\left(\sum_{r \notin M} \beta \overset{v}{J}_r - \sum_{r \in M} \beta \overset{v}{J}_r\right)$$

ce qui est bien le résultat attendu.

(*) les produits sont commutatifs .

Exemple 2 : Réseau cubique

On considère un réseau cubique dont la tranche comporte n^2 spins et dont les liaisons sont numérotées de la façon suivante :



Les matrices correspondantes sont (avec toujours $z=e^{-\beta}$) :

$$A = \prod_{r=1}^{n^2} ((\text{ch}\beta J_r^1)\mathbb{1} + (\text{sh}\beta J_r^2)S_r S_{r+1}) ((\text{ch}\beta J_r^2)\mathbb{1} + (\text{sh}\beta J_r^2)S_r S_{r+n})$$

$$B = \prod_{r=1}^{n^2} (\exp(\beta J_r^y)\mathbb{1} + \exp(-\beta J_r^y)C_r)$$

où J_r^y désigne la valeur de la liaison entre les sites r des deux tranches.

Exemple 3 : Introduction d'un champ magnétique (chapitre I paragraphe II.2.1)

Illustrons ceci sur une chaîne de spins.

Si l'énergie interne d'une tranche devient :

$$- \sum_r J_r^o \sigma_r \sigma_{r+1} - H \sum_r \sigma_r$$

et si on prend $z = e^{-\beta}$

on voit qu'il suffit de transformer le produit A en produit :

$$\prod_{r=1}^n ((\text{ch}\beta J_r^o)\mathbb{1} + (\text{sh}\beta J_r^o)S_r S_{r+1}) ((\text{ch}\beta H)\mathbb{1} + (\text{sh}\beta H)S_r)$$

II - MATRICES POLYNOMIALES A COEFFICIENTS POSITIFS

II.1 - LE CADRE DE L'ETUDE

Nous allons étudier des matrices $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ définies par

$$M(z) = (z^{n_{i,j}}) \quad n_{i,j} \in \mathbb{N} \quad i, j = 1, \dots, n$$

Les matrices $M(z)$ du paragraphe précédent se transforment en de telles matrices en multipliant par une puissance de z convenable, sans perdre aucune généralité du problème.

Le problème physique est toujours l'étude de la fonction :

$$f(t) = \lim_{p \rightarrow +\infty} \frac{1}{p} \log \text{Trace} (M(e^t))^p$$

Il est connu depuis longtemps que cette fonction de t est indéfiniment différentiable (et même analytique) pour $t \in \mathbb{R}$. L'argument en est ([3]) que $f(t) = \log \lambda_1(t)$ ou $\lambda_1(t)$ est la plus grande valeur propre de la matrice $M(e^t)$. $M(e^t)$ étant positive et irréductible, d'après le théorème de Perron-Frobenius, $\lambda_1(t)$ est donc unique et strictement positive. La perte d'analyticité ne pourrait avoir lieu qu'en cas d'égalité des valeurs propres de plus grand module ce qui est exclus.

Ce résultat de non existence de transition de phase pour des systèmes qui ne s'accroissent que dans un sens, unidimensionnels, est bien connu.

Une autre façon de résoudre ce problème serait d'étudier les racines des polynômes (ch.II Théorème III) :

$$\text{Trace} (M(z))^p$$

et de montrer qu'il ne peut y avoir accumulation de racines sur l'axe réel positif. Cette approche se révèle fructueuse car elle peut se généraliser à des produits de matrices qui ne sont pas toutes égales et donc à des systèmes unidimensionnels non réguliers : l'argument du théorème de Perron-Frobenius n'étant plus valable pour ce genre de matrices.

II.2 - ETUDE DES RACINES DE $S_p(z) = \text{Trace } (M(z))^p$

II.2.1 - Notation - Objectif

Nous avons $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$

avec

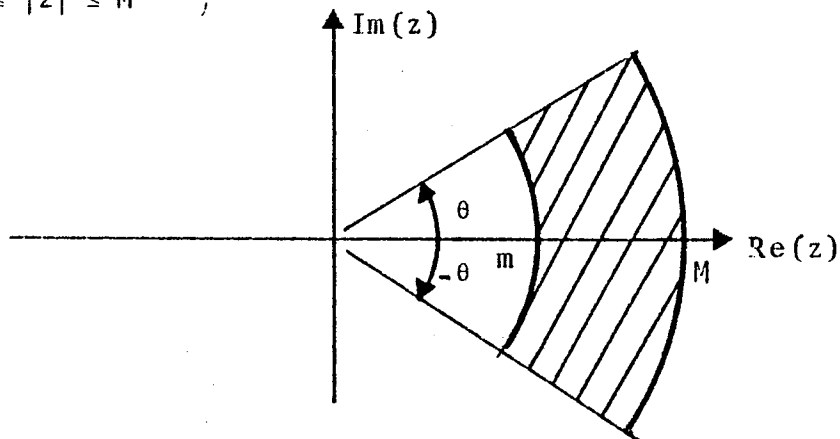
$$M_{i,j}(z) = z^{n_{i,j}} \quad n_{i,j} \in \mathbb{N}$$

$$S_p(z) = \text{trace } (M(z))^p$$

Nous allons montrer que pour tout $z \in \mathbb{R}_*^+$ il existe un voisinage dans \mathbb{C} de z tel que aucun des polynômes $S_p(z)$ n'admette de racine dans ce voisinage.

Plus précisément nous montrerons que pour tout m et M réels vérifiant $0 < m \leq M$, il existe $\theta \in \mathbb{R}_*^+$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} -\theta \leq \text{Arg } z \leq \theta \\ m \leq |z| \leq M \end{array} \right\} \Rightarrow S_p(z) \neq 0 \quad \forall p \in \mathbb{N}$$

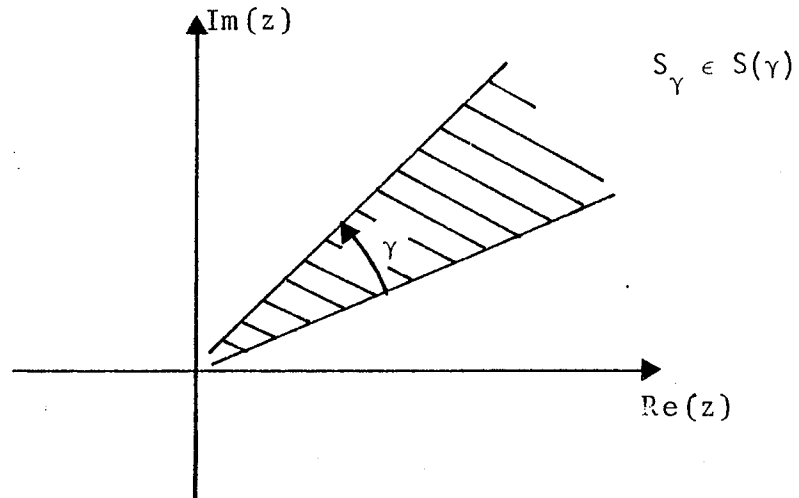


L'idée est de remarquer que pour z réel positif $(M(z))^p$ reste à termes réels positifs et d'essayer de généraliser à z "presque réel positif". "En gros" on montre que tous les éléments de $(M(z))^p$ restent d'arguments voisins (mais non d'arguments nuls).

II.2.2 - Quelques propriétés de combinaisons linéaires et de nombres complexes

Notation

$S(\gamma)$ désigne l'ensemble des secteurs S_γ fermés d'ouverture γ privés de l'origine.



Problème 1

Soient n nombres complexes donnés appartenant à un secteur $S_\theta \in S(\theta)$ avec $0 < \theta < \pi/2$: $z_j = r_j e^{i\theta_j}$. $j = 1, \dots, n$

Pour tout ϕ positif vérifiant $\phi + \theta < \pi/2$ nous voulons localiser les nombres :

$$\sum_{j=1}^n z_j e^{i\phi_j}$$

sous les contraintes $0 \leq \phi_j \leq \phi$, $j = 1, \dots, n$.

Nous avons la propriété suivante :

Propriété 1

Avec les hypothèses précédentes il existe $S_\phi \in S(\phi)$ tel que

$$\sum_{j=1}^n z_j e^{i\phi_j} \in S_\phi, \quad \forall \phi_j \in [0, \phi], \quad j = 1, \dots, n$$

Démonstration

Par une rotation on se ramène au cas où $\theta_j \in [0, \theta]$ et

$$\sum_{j=1}^n z_j e^{i\phi_j} = \sum_{j=1}^n r_j e^{i(\theta_j + \phi_j)} = \sum_{j=1}^n (r_j \cos(\theta_j + \phi_j) + ir_j \sin(\theta_j + \phi_j))$$

Il est clair que les parties réelles et imaginaires sont respectivement décroissantes et croissantes (en ϕ_j). Le nombre complexe de plus grand argument que l'on peut obtenir est

$$\sum_{j=1}^n z_j e^{i\phi}$$

et celui de plus petit argument

$$\sum_{j=1}^n z_j$$

ce qui prouve le résultat (la somme ne pouvant évidemment être nulle).

A noter que le secteur s'appuie sur le "centre de gravité" z_G des z_j et son transformé par rotation de ϕ .

Problème 2

Nous nous donnons toujours les $z_j \in S_\theta$ ($\theta < \pi/2$) et nous étudions le lieu des points :

$$\sum_{j=1}^n m_j z_j$$

sous les contraintes : $0 < m \leq m_j \leq M$, $j = 1, \dots, n$.

Propriété 2

Il existe un secteur $S_{k\theta} \in S(k\theta)$ avec $0 < k < 1$ tel que :

$$\sum_{j=1}^m m_j z_j \in S_{k\theta}, \quad \forall m_j \in [m, M] \quad j = 1, 2, \dots, m$$

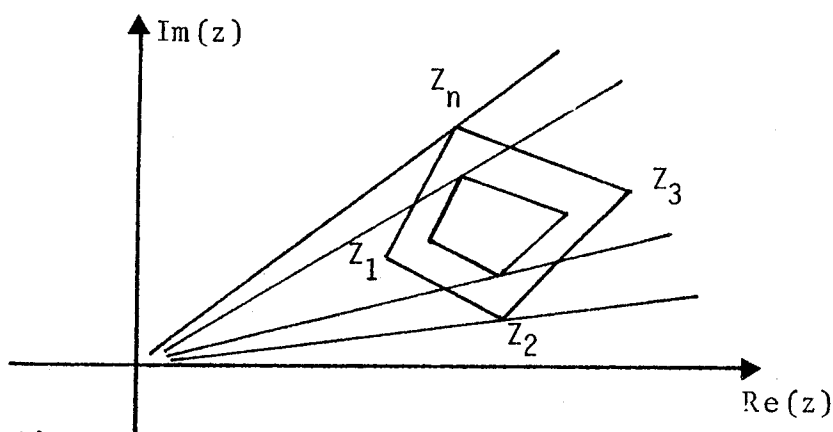
k étant fonction de θ , m et M .

Idée qualitative de la démonstration

Etudions $\frac{1}{\sum_j m_j} (\sum_j m_j z_j) = \sum_j \xi_j z_j$ avec $\xi_j = \frac{m_j}{\sum_j m_j}$

On a : $0 < \xi \leq \frac{m}{(n-1)M+m} \leq \xi_j \leq \frac{M}{(n-1)m+M} = \bar{\xi}$

Or le lieu des points $\sum \xi_j z_j$, $0 < \xi \leq \xi_j \leq \bar{\xi}$ est un polygone strictement inscrit dans l'enveloppe convexe des ξ_j . Les points $\sum m_j z_j$ sont donc dans un cône strictement inscrit dans S_θ .

Démonstration

On se ramène par rotation au cas $\theta_j \in [0, \theta]$ et on étudie l'argument $\phi(m)$ de $\sum_j m_j z_j$. La tangente de cet argument est :

$$\operatorname{tg}(\phi_m) = T(m_1, \dots, m_p) = \frac{\sum_j m_j r_j \sin \theta_j}{\sum_j m_j r_j \cos \theta_j}$$

son minimum est réalisé pour (v_1, \dots, v_n) et son maximum pour (μ_1, \dots, μ_n) . L'écart entre le maximum ϕ_μ et le minimum ϕ_ν vérifie

$$\operatorname{tg}(\phi_\mu - \phi_\nu) = \frac{\operatorname{tg} \phi_\mu - \operatorname{tg} \phi_\nu}{1 + \operatorname{tg} \phi_\mu \operatorname{tg} \phi_\nu}$$

ce qui égal à :

$$\frac{(\sum_j v_j r_j \cos \theta_j)(\sum_j \mu_j r_j \sin \theta_j) - (\sum_j \mu_j r_j \cos \theta_j)(\sum_j v_j r_j \sin \theta_j)}{(\sum_j v_j r_j \cos \theta_j)(\sum_j \mu_j r_j \cos \theta_j) + (\sum_j v_j r_j \sin \theta_j)(\sum_j \mu_j r_j \sin \theta_j)}$$

ce qui s'écrit :

$$\frac{\sum_{i < j} r_i r_j (v_i \mu_j - v_j \mu_i) \sin(\theta_j - \theta_i)}{\sum_{i < j} v_i \mu_i r_i^2 + \sum_{i < j} r_i r_j (v_i \mu_j + v_j \mu_i) \cos(\theta_j - \theta_i)}$$

Il est clair que

$$0 \leq \operatorname{tg}(\phi_\mu - \phi_\nu) \leq \frac{\sum_{i < j} r_i r_j (v_i \mu_j - v_j \mu_i) \sin(\theta_j - \theta_i)}{\sum_{i < j} r_i r_j (v_i \mu_j + v_j \mu_i) \cos(\theta_j - \theta_i)}$$

$$0 \leq \operatorname{tg}(\phi_\mu - \phi_\nu) \leq (\operatorname{Max}_{i,j} \left| \frac{v_i \mu_j - v_j \mu_i}{v_i \mu_j + v_j \mu_i} \right|) \operatorname{tg} \theta$$

$$0 \leq \operatorname{tg}(\phi_\mu - \phi_\nu) \leq \operatorname{Max}_{i,j} \left| \frac{\left(\frac{v_i}{v_j} \times \frac{\mu_j}{\mu_i}\right) - 1}{\left(\frac{v_i}{v_j} \times \frac{\mu_j}{\mu_i}\right) + 1} \right| \operatorname{tg} \theta$$

$$0 \leq \operatorname{tg}(\phi_\mu - \phi_\nu) \leq \frac{\left(\frac{M}{m}\right)^2 - 1}{\left(\frac{M}{m}\right)^2 + 1} \operatorname{tg} \theta$$

ce qui prouve le résultat (la combinaison linéaire ne pouvant toujours pas être nulle).

THEOREME II.2.2 : Localisation en "secteur" de combinaisons linéaires de nombres complexes.

Soient n nombres complexes donnés z_j appartenant à S_θ ($\in S(\theta)$) avec $0 < \theta < \pi/2$. L'ensemble des nombres $\sum_{j=0}^n z_j \alpha_j$ sous les contraintes

$$0 \leq \operatorname{Arg} \alpha_j \leq \phi \quad \phi + \theta \leq \pi/2$$

$$0 < m \leq |\alpha_j| \leq M$$

est contenu dans un secteur $S_{\phi+k\theta}$ avec $0 < k < 1$, k étant fonction de θ , m et M .

Démonstration

Elle n'est que la concaténation des propriétés 2 (appliquée à $\sum z_j |\alpha_j|$) et 1 (appliquée à $\sum z_j |\alpha_j| e^{i \operatorname{arg} \alpha_j}$), le centre de gravité des $z_j |\alpha_j|$ ayant même argument que $\sum z_j |\alpha_j|$.

II.2.3 - Application aux matrices de transfert : itéré d'un vecteur par une matrice de transfert.

Soient $V = (V_j) \in \mathbb{C}^n$, $M(z) = (z^{n_{i,j}}) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ et S_θ un secteur de $S(\theta)$ vérifiant :

$$0 < \theta < \pi/2 \quad V_i \in S_\theta \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$n_{i,j} \in \mathbb{N} \quad |z| \in [\alpha, \beta] \quad 0 < \alpha \leq \beta \quad \underline{\text{donnés}}$$

} (H)

Propriété 1 (Hypothèse H)

Il existe γ tel que si $0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma$ alors toutes les composantes de $M^p(z) V$ appartiennent à un même secteur S_θ^p dépendant de p mais d'ouverture invariante.

Démonstration

$$M(z) V = \left(\sum_j z^{n_{ij}} V_j \right)$$

Or les n_{ij} étant en nombre fini et $|z|$ borné il existe m et M :
 $0 < m \leq M$ tels que :

$$0 < m \leq |z^{n_{ij}}| \leq M, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, n$$

et de plus : $\forall \phi > 0, \exists \gamma : 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma \Rightarrow 0 \leq \text{Arg } z^{n_{ij}} \leq \phi$
 $i=1, \dots, n, j=1, \dots, n$

En utilisant le théorème II.2.2 il suffit de choisir γ pour que

$$\phi + k\theta \leq \theta, \quad \phi \leq (1-k)\theta$$

et toutes les composantes de $M(z) V$ appartiendront à un même secteur S_θ^1 .
 Le reste de la démonstration se fait par récurrence.

Propriété 2 (Hypothèse H)

Il existe γ tel que si $0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma$ alors toutes les composantes de $V^T M^p(z)$ appartiennent à un même secteur S_θ^p (dépendant de p mais d'ouverture invariante).

Démonstration identique à celle de la propriété 1.

THEOREME II.2.3 Localisation en secteurs des termes de $(M(z))^p$

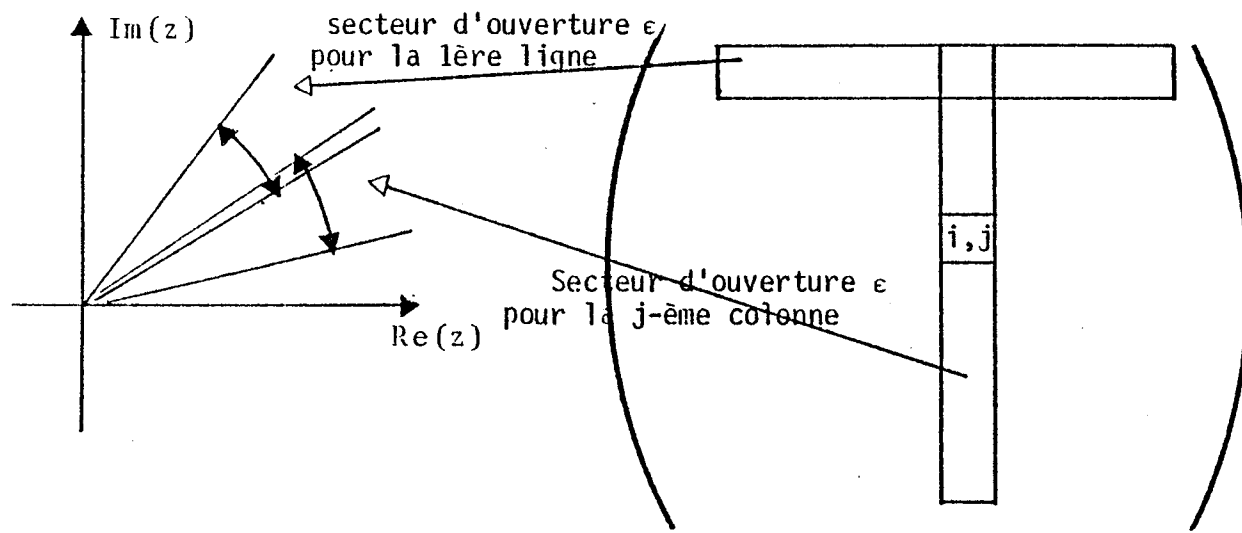
Soit $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ $M(z) = (z^{n_{i,j}})$ $n_{i,j} \in \mathbb{N}$

$\forall \theta \in]0, \pi/2[$, $\forall \alpha, \beta : 0 < \alpha < \beta$ $\exists \gamma$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \forall p \text{ il existe un secteur } S_{\theta}^p \text{ contenant tous les} \\ \text{éléments de } M^p(z) \end{array} \right.$$

Démonstration

Posons $\epsilon = \theta/3$. On peut choisir comme vecteur V une colonne (ou une ligne) de $M(z)$ et montrer qu'il existe γ tel que pour $0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma$ tous les composantes d'une même colonne (ou d'une même ligne) de $M^p(z)$ se situent dans un même secteur d'angle ϵ (dépendant de la ligne ou de la colonne).



on voit immédiatement que tous les éléments de $M^p(z)$ sont dans un secteur $S_{3\epsilon}^p$, par transitivité.

Corollaire du théorème II.2.3 : Exclusion des racines de Trace $M^p(z)$

Soit $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ $M(z) = (z^{n_{i,j}})$ $n_{i,j} \in \mathbb{N}$

$\forall \alpha, \beta : 0 < \alpha < \beta$, $\exists \gamma$ tel que

$$\alpha \leq |z| \leq \beta$$

$$-\gamma \leq \text{Arg } z \leq \gamma$$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \leq |z| \leq \beta \\ -\gamma \leq \text{Arg } z \leq \gamma \end{array} \right\} \Rightarrow \text{trace } M^p(z) \neq 0, \forall p \in \mathbb{N}$$

Démonstration

Pour $\theta \in]0, \pi/2[$ et α, β on choisit $\gamma > 0$ d'après la même démarche que dans le théorème II.2.3. Les z considérés sont tels que tous les éléments de $(M(z))^p$ soient dans un même secteur d'angle θ . La somme des éléments diagonaux ne peut donc pas être nulle.

(car ils appartiennent tous à un même secteur d'angle $< \pi/2$).

Le résultat est vrai pour $\text{Arg } z \in [-\gamma, 0]$ car le polynôme est à coefficients réels.

II.3 - GENERALISATIONS

II.3.1 - Matrices dont les coefficients sont des polynômes à coefficients positifs

Soit $M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ les coefficients $M_{i,j}(z)$ étant des polynômes à coefficients réels positifs et non tous identiquement nuls.

On peut énoncer l'équivalent du théorème II.2.3

THEOREME II.3.1

$\forall \theta \in]0, \pi/2[, \forall \alpha, \beta : 0 < \alpha \leq \beta \quad \exists \gamma > 0$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow \text{pour tout } p \text{ il existe un secteur } S_{\theta}^p \text{ contenant tous les éléments de } (M(z))^p$$

Démonstration

Pour $\text{Arg } z = 0$ et $\alpha \leq |z| \leq \beta$ on constate :

- 1) $\text{Arg } M_{i,j}(z) = 0 \quad i, j = 1, \dots, n$
- 2) Il existe m_0 et $M_0 : 0 < m_0 \leq M_0$ tels que :

$$m_0 \leq |M_{i,j}(z)| \leq M_0 \quad i, j = 1, \dots, n$$

Par continuité on peut donc affirmer :

- 1) Pour tout $\phi > 0$ il existe $\gamma_{\phi} > 0$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma_{\phi} \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow 0 \leq \text{Arg } M_{i,j}(z) \leq \phi \quad i, j = 1, \dots, n$$
- 2) Il existe $\gamma_1 > 0$ et $m, M : 0 < m \leq M$ tels que :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma_1 \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow m \leq |M_{i,j}(z)| \leq M \quad i, j = 1, \dots, n$$

La démonstration se copie alors sur celle du théorème II.2.3.

Corollaire

Avec les mêmes hypothèses on peut énoncer :

$\forall \alpha, \beta : 0 < \alpha < \beta \quad \exists \gamma \in \mathbb{R}$ tel que

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \leq |z| \leq \beta \\ -\gamma \leq \text{Arg } z \leq \gamma \end{array} \right\} \Rightarrow \text{trace } M^p(z) \neq 0$$

II.3.2. - Produits de matrices à coefficients monomiaux

Nous pouvons considérer une suite de matrices $M_k(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$ à coefficients monomiaux

$$M_k(z) = (z^{n_{i,j}^k}) \quad n_{i,j}^k \in \mathbb{N}$$

La généralisation du théorème II.2.3 est alors :

THEOREME II.3.2

Si les $n_{i,j}^k$ sont uniformément bornés en i, j, k , alors pour tout $\theta \in]0, \pi/2[$, pour tout α et β vérifiant : $0 < \alpha \leq \beta$ il existe $\gamma > 0$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \text{Arg } z \leq \gamma \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Tous les termes de la matrice } (M_p(z))^p \text{ sont dans un même secteur } S_\theta^p.$$

Démonstration

Elle est identique à celle du théorème II.2.3.

Corollaire

Avec les mêmes hypothèses on peut énoncer :

$\forall \alpha, \beta \quad 0 < \alpha < \beta \quad \exists \gamma \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \leq |z| \leq \beta \\ -\gamma \leq \text{Arg } z \leq \gamma \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Trace } (M_p^p(z)) \neq 0$$

II.3.3. - Produits de matrices à coefficients monomiaux. Matrices de tailles variables

Nous pouvons énoncer le même théorème qu'au paragraphe précédent en prenant des matrices :

$$M_k(z) \in \mathcal{M}_{n_k, m_k}(\mathbb{R}[z])$$

$$M_k(z) = (z^{n_{i,j}^k}) \quad n_{i,j}^k \in \mathbb{N}$$

avec la condition de compatibilité sur les produits :

$$m_k = n_{k+1} \quad k \in \mathbb{N}$$

THEOREME

Si les $n_{i,j}^k$ sont uniformément bornés en i, j, k , alors pour tout $\theta \in]0, \pi/2[$, pour tout α et β vérifiant

$$0 < \alpha \leq \beta$$

il existe $\gamma > 0$ tel que

$$\left. \begin{array}{l} 0 < \text{Arg } z \leq \gamma \\ \alpha \leq |z| \leq \beta \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Tous les termes du produit } M_1(z)M_2(z)\dots M_p(z) \text{ sont dans un même secteur } S_\theta^p, \text{ pour tout } p \in \mathbb{N}$$

Corollaire

Avec les mêmes hypothèses on peut énoncer :

$\forall \alpha, \beta \quad 0 < \alpha < \beta \quad : \exists \gamma > 0 \quad \text{tel que :}$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \leq |z| \leq \beta \\ -\gamma < \text{Arg } z < \gamma \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Trace } (M_1(z) M_2(z) \dots M_p(z)) \neq 0$$

III - AUTRES LOCALISATION DES RACINES DE $\text{trace}(M_p(z))^p$

III.1 - LOCALISATION DES RACINES DE $\text{Trace}(M(z))^p$

Plaçons nous dans le cas où :

$$M(z) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R}[z])$$

et notons $\lambda_1(z), \lambda_2(z), \dots, \lambda_n(z)$ les valeurs propres de la matrice $M(z)$ rangées par ordre de modules décroissants :

$$|\lambda_1(z)| \geq |\lambda_2(z)| \geq \dots \geq |\lambda_n(z)|$$

Il peut y avoir ambiguïté pour la détermination de $\lambda_i(z)$ en cas d'égalité de module mais il suffit de trouver une détermination de $\lambda_i(z)$ parmi les différentes possibilités.

Dans le théorème qui suit on précise une propriété utilisée couramment en physique ([7]).

THEOREME III.1

Soient $S_p(z)$ $p \in \mathbb{N}$ les polynômes définis par :

$$S_p(z) = \text{trace}(M(z))^p$$

et R_p l'ensemble des racines de $S_p(z)$. On a :

$$\bigcup_{n \in \mathbb{N}} \bigcap_{k \geq n} R_k \subseteq \{z \in \mathbb{C} : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)|\} = \mathcal{E}$$

En particulier les points d'accumulation des racines des polynômes $S_p(z)$ sont contenus dans \mathcal{E} .

Démonstration

Soit $\alpha \in [0,1[$. Posons :

$$\Gamma_\alpha = \{z \in \mathbb{C} : \alpha |\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| \geq 0\}$$

$$\gamma_\alpha = \left(\Gamma_\alpha = \{z \in \mathbb{C} : |\lambda_1(z)| \geq |\lambda_2(z)| \geq \alpha |\lambda_1(z)| \} \right)$$

On a : $\bigcup_{\alpha \in [0,1[} \gamma_\alpha = \{z \in \mathbb{C} : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)|\}$

Soit $\alpha \in [0,1[$ et $z \in \Gamma_\alpha$. On a :

$$S_p(z) = (\lambda_1(z))^p \left\{ 1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{\lambda_i(z)}{\lambda_1(z)} \right)^p \right\}$$

(on ne peut avoir $\lambda_1(z) = 0$). D'où :

$$|S_p(z)| \geq |\lambda_1(z)|^p \{1 - (n-1)\alpha^p\}$$

Il existe $p(\alpha) \in \mathbb{N}$ tel que :

$$1 - (n-1)\alpha^p > 0 \quad \forall p \geq p(\alpha)$$

Pour $p \geq p(\alpha)$ on a donc :

$$R_p \cap \Gamma_\alpha = \emptyset$$

d'où :

$$R_p \subset \gamma_\alpha \quad \forall p \geq p(\alpha)$$

et γ_α étant fermée :

$$\overline{\bigcup_{p \in \mathbb{N}} \bigcup_{k \geq p} R_k} \subset \overline{\bigcup_{k \geq p(\alpha)} R_k} \subset \gamma_\alpha$$

Ceci est vrai pour tout $\alpha \in [0,1[$ et on a le résultat :

Exemple

$$M(z) = \begin{pmatrix} 1 & z \\ z & 1 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres sont $1 \pm z$. Pour que ces deux valeurs propres soient de même module il faut et il suffit que l'on puisse écrire :

$$1+z = (1-z)e^{i\phi}$$

$$z(1+e^{i\phi}) = e^{i\phi} - 1$$

ce qui est équivalent à

$$z \cos \phi/2 = i \sin \phi/2$$

On voit donc que $\mathcal{L} = \{ix : x \in \mathbb{R}\}$

Sur cet exemple on peut trouver effectivement les racines de :

$$\text{trace}(M(z))^P = (1+z)^P + (1-z)^P$$

Soient $e^{i\phi_k} = e^{\frac{i\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p}}$ pour $k = 0, 1, \dots, p-1$ les racines $p^{\text{ème}}$ de -1 .

Les racines de $(1+z)^P + (1-z)^P = 0$ sont donc données par

$$(1+z) = (1-z)e^{i\phi_k}$$

ce qui donne tout calcul fait :

$$z = i \operatorname{tg}\left(\frac{\pi}{2p} + \frac{k\pi}{p}\right) \quad k = 0, 1, \dots, p-1 \quad k \neq \frac{p-1}{2}$$

Remarque

Notons qu'en dépit de sa simplicité de formulation le problème de l'étude du lieu

$$\mathcal{L} = \{z \in \mathbb{C} : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)|\}$$

est très vite très compliqué même sur des exemples précis. Sur un exemple de physique ([24]) on pourra juger de cette complexité mais aussi de la "richesse" du problème en ce sens que les lieux \mathcal{L} peuvent avoir des formes très variées.

III.2 - GENERALISATION DU THEOREME III.1

D'un point de vue mathématique, la généralisation du théorème III "se passe" bien. Malheureusement l'utilisation du résultat est très délicate et ne permet pas à priori de traiter des exemples que l'on ne traite pas par d'autres méthodes, comme nous le verrons dans le paragraphe III.3.

L'aspect positif de ce théorème est certainement de montrer que l'on ne peut raconter "n'importe quoi" sur un problème aussi général et que les généralisations "intuitives" du théorème III sont en général fausses.

III.2.1 - Notations

Soit $\{M_p(z)\}_{p \in \mathbb{N}}$ une famille de matrices, $M_p(z) \in \mathcal{M}_{m(p), m(p)}(\mathbb{R}[z])$.
La taille des matrices $m(p)$ dépend de p .

On pose :

$$\text{rang}(M_p(z)) = r(p)$$

$\lambda_1^{(p)}(z), \lambda_2^{(p)}(z), \dots, \lambda_{m(p)}^{(p)}(z)$ désignent les valeurs propres de $M_p(z)$ rangées par modules décroissants (ou égaux, l'ambiguïté n'est pas gênante).

On pose :

$$\Gamma_\alpha^p = \{z \in \mathbb{C} : \alpha |\lambda_1^{(p)}(z)| > |\lambda_2^{(p)}(z)| \geq |\lambda_3^{(p)}(z)| \geq \dots \geq |\lambda_{m(p)}^{(p)}(z)|\}$$

$$\gamma_\alpha^p = \bigcup \Gamma_\alpha^p$$

$$S_p(z) = \text{Trace } (M_p(z))^p$$

$$R_p = \{z \in \mathbb{C} : S_p(z) = 0\}$$

$$\mathcal{R} = \overline{\bigcup_{p \geq p} \bigcup_{k \geq p} R_p}$$

III.2.2. THEOREME

Si $\lim_{p \rightarrow +\infty} \alpha^p r(p) = 0$ pour tout $\alpha \in [0, 1[$

Alors $\mathcal{R} \subseteq \overline{\bigcup_{\alpha \in [0, 1[} \bigcup_{p \geq p} \bigcup_{k \geq p} \gamma_\alpha^k}$

(Ce théorème s'applique en particulier lorsque $r(p) \sim_{p \rightarrow +\infty} p^a$ $a > 0$).

Démonstration

Soit $\alpha \in [0, 1[$ et $p \in \mathbb{N}$.

Choisissons $z \in \bigcup_{k \geq p} \gamma_\alpha^k$

Nous avons donc : $\alpha |\lambda_1^{(k)}(z)| > |\lambda_2^{(k)}(z)| \quad \forall k \geq p$

et en particulier : $\lambda_1(z) \neq 0 \quad \forall k \geq p$

De plus :

$$S_k(z) = (\lambda_1^{(k)}(z))^k \left\{ 1 + \sum_{i=2}^{r(k)} \frac{\lambda_i^{(k)}(z)}{\lambda_1^{(k)}(z)} \right\}$$

$$|S_k(z)| \geq |\lambda_1^{(k)}(z)|^k \{1 - (r(k)-1)\alpha^k\}$$

Puisque : $\alpha^k r(k) \rightarrow 0$
 $k \rightarrow +\infty$

à partir d'un rang $p(\alpha)$ $S_k(z)$ ne peut plus s'annuler pour $z \in \bigcap_{k \geq p} \Gamma_\alpha^k$

Donc :

$$\bigcup_{k \geq p} R_p \subset \bigcap_{k \geq p} \Gamma_\alpha^k \quad \text{pour } p \geq p(\alpha)$$

$$\bigcup_{k \geq p} R_p \subset \bigcup_{k \geq p} \gamma_\alpha \quad \text{pour } p \geq p(\alpha)$$

d'où

$$\mathcal{R} \subset \bigcap_{k \geq p} \bigcup_{k \geq p} \gamma_\alpha$$

et ceci pour tout $\alpha \in [0,1[$.

IV - QUELQUES EXEMPLES

Je vais traiter quelques exemples pour illustrer les différentes propriétés et théorèmes de ce chapitre.

IV. 1 - LEMME

Une condition nécessaire et suffisante pour que l'équation du second degré:

$$z^2 - pz + q \quad p, q \in \mathbb{C}$$

admette deux racines de mêmes modules z_1 et $z_2 = z_1 e^{i\phi}$ ($\phi \in \mathbb{R}$) est que :

$$p^2 = 4q \cos^2 \phi/2$$

On peut résumer la condition nécessaire et suffisante pour que les deux racines soient de même module par : il existe $a \in [0,4]$
 $p^2 = aq$.

Démonstration

Soient z_1 et $z_2 = z_1 e^{i\phi}$ $\phi \in \mathbb{R}$

On a : $p = z_1 + z_2 = z_1(1 + e^{i\phi})$

$$q = z_1 z_2 = z_1^2 e^{i\phi}$$

mais $p = 2 z_1 e^{i\phi/2} \cos \phi/2$

d'où $p^2 = 4q \cos^2 \phi/2$

Réciproquement, considérons l'équation :

$$z^2 - pz + q = 0$$

avec

$$p^2 = 4q \cos^2 \phi/2$$

On a :

$$\Delta = p^2 - 4q = -4q \sin^2 \phi/2$$

Soit t la racine de q qui vérifie

$$p = 2 \cdot \cos \phi/2 \cdot t$$

on a :

$$\Delta = (-2 \cdot i \cdot \sin \phi/2 \cdot t)^2$$

et

$$(z_1, z_2) = (t e^{-i\phi/2}, t e^{+i\phi/2})$$

donc on a bien

$$z_2 = z_1 e^{i\phi}$$

IV.2 - DES EXEMPLES

Les deux premiers exemples traitent de la localisation de racines de polynômes $\text{trace}(M_p(z))^p$. Le dernier exemple est une application à la localisation des racines de polynômes définis par une relation de récurrence linéaire.

Exemple 1

Soient $\{\ell_p\}_{p \in \mathbb{N}}$ $\{m_p\}_{p \in \mathbb{N}}$ deux suites à valeurs entières vérifiant
 $m_p/\ell_p = k \in \mathbb{R}_+^*$ $\forall p \in \mathbb{N}$.

On considère les matrices :

$$M_p(z) = \begin{pmatrix} z & \dots & z & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ z & \dots & z & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

$\xleftrightarrow{\ell_p} \quad \xleftrightarrow{m_p}$

En posant :

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

La matrice $M_p(z)$ peut se mettre sous la forme :

$$M_p(z) = z uu^T + uv^T + vu^T + vv^T$$

La matrice $M_p(z)$ est de rang 2 et les vecteurs propres sont dans le plan des u, v .

Pour trouver les valeurs propres il suffit d'exprimer $M_p(z)u, M_p v$ dans la base u, v . Ceci donne la matrice 2×2 :

$$\begin{pmatrix} z\ell_p & m_p \\ \ell_p & m_p \end{pmatrix}$$

qui, au coefficient multiplicatif près ℓ_p , a mêmes valeurs propres que :

$$\begin{pmatrix} z & k \\ 1 & k \end{pmatrix}$$

solutions de $(z-\lambda)(k-\lambda)-k = 0$

$$\lambda^2 - \lambda(k+z) + k(z-1) = 0$$

D'après le lemme IV.1 une condition nécessaire et suffisante pour que cette équation admette deux solutions de même module est qu'il existe $a \in [0,4]$ tel que :

$$(k+z)^2 = a k(z-1)$$

Éliminons le cas $z=1$ qui implique $k = -1$.

Regardons maintenant la condition :

$$\frac{(k+z)^2}{k(z-1)} \in \mathbb{R}$$

qui peut se mettre sous la forme

$$(k+z)^2 \overline{(z-1)} = \overline{(k+z)}^2 (z-1)$$

ce qui est équivalent à :

$$(z-1)\overline{(z-1)} = \overline{(k+z)}^2 \quad \text{ou} \quad z \in \mathbb{R}$$

En précisant que $a \in [0,4]$, on montre facilement que $z \in \mathbb{R}$ ne peut convenir, ce qui implique que z appartient au cercle de centre 1 et de rayon $k+1$.

De plus si on pose maintenant :

$$z = 1 + (k+1)e^{i\theta}$$

la condition :

$$0 \leq \frac{(k+z)^2}{k(z-1)} \leq 4$$

est équivalente à : $\cos^2 \theta/2 \leq \frac{k}{k+1}$

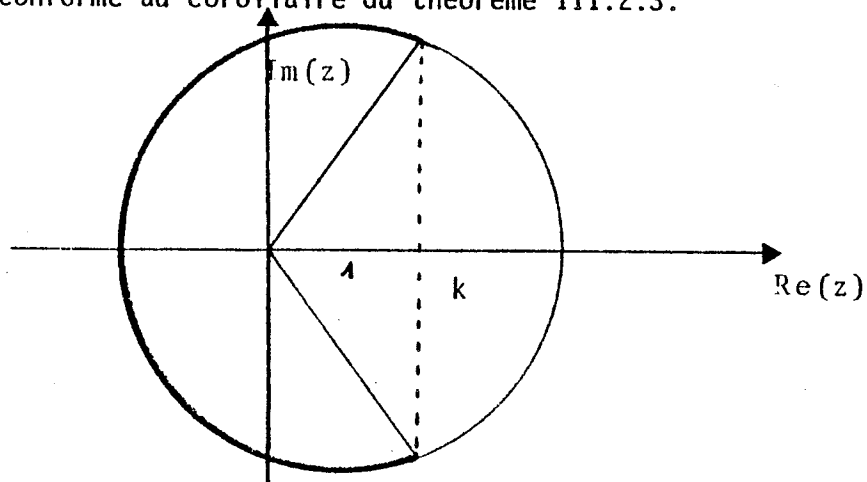
où $\cos \theta \leq \frac{k-1}{k+1}$

Cette condition peut s'exprimer aussi par :

$$\operatorname{Re} z \leq k$$

ce qui donne la localisation illustrée par le schéma suivant.

Notons que l'exclusion d'une partie du cercle au voisinage de l'axe réel positif est conforme au corollaire du théorème III.2.3.



Exemple 2

Considérons la matrice :

$$M_p(z) = \begin{pmatrix} z^{d_p} & \dots & z^{d_p} & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ z^{d_p} & \dots & z^{d_p} & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \dots & 1 & z^{d_p} & \dots & z^{d_p} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 & z^{d_p} & \dots & z^{d_p} \end{pmatrix} \begin{matrix} \updownarrow \ell_p \\ \updownarrow m_p \end{matrix}$$

$\xleftarrow{\ell_p}$ $\xleftarrow{m_p}$

avec $d_p, \ell_p, m_p \in \mathbb{N}_*$ pour tout p .

En posant $u = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{matrix} \updownarrow \ell_p \\ \updownarrow m_p \end{matrix}$ et $v = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ $\begin{matrix} \updownarrow \ell_p \\ \updownarrow m_p \end{matrix}$

On a : $M_p(z) = z^{d_p}(uu^T + vv^T) + uv^T + vu^T$.

Les deux valeurs propres non nulles de cette matrice sont celles de la matrice :

$$\begin{pmatrix} \ell_p z^{d_p} & m_p \\ \ell_p & m_p z^{d_p} \end{pmatrix}$$

donc solution de :

$$\lambda^2 - \lambda(\ell_p + m_p) z^{d_p} + \ell_p m_p (z^{2d_p-1}) = 0$$

Regardons $S_p(z) = \text{trace}(M_p(z))^p$.

D'après le lemme III.3.3. une condition nécessaire et suffisante pour que les deux racines z_1 et z_2 vérifient :

$$z_2 = z_1 e^{i\phi} \quad \phi \in \mathbb{R} \text{ est que :}$$

$$p^2 = 4 \cos^2(\phi/2) q$$

On peut d'ailleurs en déduire de plus que si $\lambda_1(z)$ et $\lambda_2(z)$ doivent vérifier $\lambda_1^p(z) + \lambda_2^p(z) = 0$ il faut et il suffit que :

$$\phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, 1, \dots, p-1$$

Dans notre exemple cela donne :

$$(\ell_p + m_p)^2 z^{2d_p} = 4\ell_p m_p (z^{2d_p-1}) \cos^2 \phi/2$$

ou

$$z^{2d_p} ((\ell_p + m_p)^2 - 4\ell_p m_p \cos^2 \phi/2) = -4\ell_p m_p \cos^2 \phi/2$$

Le coefficient de z^{2d_p} ne peut être nul que si $\cos^2(\phi/2) = 1$ ce qui est impossible car le second membre serait égal à $-4\ell_p m_p$.

L'ensemble des points z tels que $\lambda_1^p(z) + \lambda_2^p(z) = 0$ est donc donné par :

$$z^{2d_p} = \frac{-4\ell_p m_p \cos^2 \phi/2}{(\ell_p + m_p)^2 - 4\ell_p m_p \cos^2 \phi/2} \quad \phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, \dots, p-1$$

Proposons

et en posant

$$\gamma_p = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\ell_p}{m_p}} + \sqrt{\frac{m_p}{\ell_p}} \right) \geq 1$$

$$z^{2d_p} = - \frac{\cos^2 \phi/2}{\gamma_p^2 - \cos^2 \phi/2} \quad \phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, \dots, p-1$$

La discussion se poursuit avec des hypothèses supplémentaires, mais dans tous les cas, si $\cos^2 \phi/2 = 0$ (ce qui ne peut se produire que pour p impair), $z = 0$ est racine d'ordre $2d_p$.

d_p constant.

Les z cherchés se répartissent suivant d_p rayons vecteurs faisant les angles :

$$\frac{\pi}{d_p} + \frac{2k\pi}{d_p} \quad k = 0, 1, \dots, d_p - 1$$

Les modules sont donnés par :

$$r_p^\phi = \left(\frac{\cos^2 \phi/2}{\gamma_p^2 - \cos^2 \phi/2} \right)^{1/2 d_p} \quad \phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, 1, \dots, p-1$$

La répartition limite dépend du comportement de la suite $\{\gamma_p\}$. Examinons le cas où $\gamma_p = \gamma$ est constant.

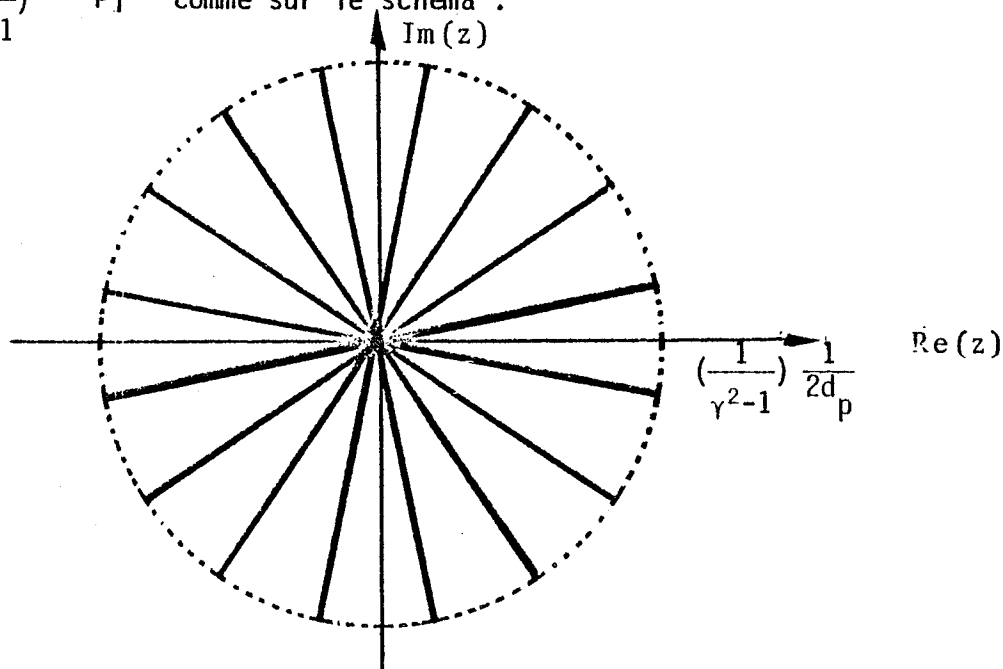
$$\underline{\gamma = 1} \quad r_p^\phi = (\cot^2 \phi/2)^{1/2 d_p} \quad \phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, 1, \dots, p-1$$

et les racines se répartissent sur tout le rayon vecteur de 0 à $+\infty$.

$\gamma > 1$

Sur chaque rayon vecteur les racines se répartissent sur les segments :

$$\left[0, \left(\frac{1}{\gamma^2 - 1} \right)^{1/2 d_p} \right] \quad \text{comme sur le schéma :}$$



De plus on pourrait mettre en évidence une densité limite sur chacun des rayons vecteurs.

La non-accumulation de racines sur l'axe réel positif pourrait être prévu par le théorème II.3.2 et son corollaire car d_p est constant.

Examinons maintenant des cas où il peut y avoir accumulation de racines sur l'axe réel positif.

$$d_p = p^\mu \quad \mu > 0 \quad (\text{ou } d_p \sim p^\mu \quad p \rightarrow +\infty)$$

Si $\cos \phi/2 = 0$ (ce qui se produit pour p impair)

$$z = 0 \text{ est racine d'ordre } 2d_p$$

◆ Cas $\gamma_p \rightarrow \gamma$
 $p \rightarrow +\infty$

Pour $\cos \phi/2 \neq 0$ nous avons pour le module r_p des racines z :

$$\frac{1}{\left(\frac{\ell}{\cos \phi/2}\right)^2 - 1} \leq r_p^{2d_p} \leq \frac{1}{\left(\frac{1}{\cos \phi/2}\right)^2 - 1}$$

Car on peut trouver $\ell \geq 1$ tel que $\gamma_p \in [1, \ell]$ pour tout p .

$$\frac{(\cos \phi/2)^2}{k^2 - \cos^2 \phi/2} \leq r_p^{2d_p} \leq (\cotg \phi/2)^2$$

$$\frac{\cos^2 \phi/2}{k^2} \leq r_p^{2d_p} \leq \frac{1}{\sin^2 \phi/2}$$

Puisque $\phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p}$ $k = 0, 1, 2, \dots, p-1$

$$\text{on a : } \frac{(\sin^2 \frac{\pi}{2p})}{k^2} \leq r_p^{2d_p} \leq \left(\frac{1}{\sin^2 \frac{\pi}{2p}}\right)$$

Il est facile de voir que $(\sin^2 \frac{\pi}{2p})^{1/2d_p}$ a pour limite 1 si $d_p = p^\mu$ $\mu > 0$.

En effet :

$$\log(\sin^2 \frac{\pi}{2p})^{1/d_p} = \frac{1}{2d_p} \log \sin \frac{\pi}{2p} = \frac{1}{2p^\mu} \log \sin \frac{\pi}{2p} \rightarrow 0$$

$p \rightarrow +\infty$

De plus la répartition angulaire devient uniforme .

◆ Cas $\gamma_p \rightarrow +\infty$
 $p \rightarrow +\infty$

Nous avons :

$$r_p^{2d} = \frac{\cos^2 \phi/2}{\gamma_p^2 - \cos^2 \phi/2}$$

$$\log r_p = \frac{1}{2p^\mu} \log (\cos^2 \phi/2) - \frac{1}{2p^\mu} \log \gamma_p^2 - \frac{1}{2p^\mu} \log (1 - (\frac{\cos \phi/2}{\gamma_p})^2)$$

et rappelons

$$\phi = \frac{\pi}{p} + \frac{2k\pi}{p} \quad k = 0, 1, \dots, p-1$$

Or :

$$\frac{1}{p^\mu} \log (\cos^2 \phi/2) \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} 0 \quad \text{uniformément en les } p \text{ et } k$$

$$\log (1 - \frac{(\cos \phi/2)^2}{\gamma_p}) \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} 0 \quad \text{uniformément en les } p \text{ et } k$$

Il reste donc à étudier le terme $-\frac{1}{p^\mu} \log \gamma_p$

Si $\frac{1}{p^\mu} \log \gamma_p \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} 0$ il y a répartition uniforme sur le cercle unité.

Si $\frac{1}{p^\mu} \log \gamma_p \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} r$ il y a répartition uniforme sur le cercle de rayon e^{-r}

Si $\frac{1}{p^\mu} \log \gamma_p \xrightarrow{p \rightarrow +\infty} \infty$ Toutes les racines se concentrent à l'origine.

Localisation de racines de polynômes définis par une relation de récurrence linéaire

Exemple : Ordre 2

La relation de récurrence :

$$p_{n+1}(z) = \alpha(z) p_n(z) + \beta(z) p_{n-1}(z)$$

$$p_0, p_1, \alpha, \beta \in \mathbb{C}[z]$$

se met sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} p_{n+1}(z) \\ p_n(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(z) & \beta(z) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n(z) \\ p_{n-1}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(z) & \beta(z) \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} p_1(z) \\ p_0(z) \end{pmatrix}$$

Soient $\lambda_1(z), \lambda_2(z)$ les valeurs propres de la matrice

$$\begin{pmatrix} \alpha(z) & \beta(z) \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Posons :

$$\gamma = \{z : \lambda_1(z) = \lambda_2(z)\}$$

$$\Gamma_\alpha = \{z : \alpha |\lambda_1(z)| > |\lambda_2(z)|\} \quad \alpha \in [0,1[$$

$$\Gamma_\alpha = \gamma_\alpha = \{z : |\lambda_2(z)| \geq \alpha |\lambda_1(z)|\} \quad \alpha \in [0,1[$$

$$R_n = \{z : p_n(z) = 0\}.$$

Si $z \notin \gamma$, la matrice est diagonalisable et on peut écrire :

$$p_n(z) = \mu(z) \lambda_1^n(z) + \gamma(z) \lambda_2^n(z)$$

$$\text{Posons : } \gamma^1 = \{z : \mu(z) = 0\}$$

$$D_m = \{z : |\gamma(z)| \leq m\}$$

Choisissons $z \in \Gamma_\alpha \cap (\Gamma \cup \Gamma')$. On a :

$$p_n(z) = \lambda_1^n(z) (\mu(z) + (\frac{\lambda_2(z)}{\lambda_1(z)})^n \gamma(z))$$

et

$$|p_n(z)| \geq |\lambda_1^n(z)| (|\mu(z)| - \alpha^n |\gamma(z)|)$$

Il existe donc $n(\alpha, m) \in \mathbb{N}$ tel que :

$$|p_n(z)| > 0 \quad \forall n \geq n(\alpha, m) \quad \forall z \in D_m$$

z ne peut donc être racine de p_n .

Donc :

$$D_m \cap \left(\bigcup_{n \geq n(\alpha, m)} R_n \right) \subseteq \Gamma_\alpha \cup \Gamma \cup \Gamma' \quad \text{et ceci } \forall m \geq 0$$

Et en conséquence :

$$\overline{\bigcup_{n \geq n} R_k} \subseteq \Gamma_\alpha \cup \Gamma \cup \Gamma' \quad \alpha \in [0, 1[$$

De plus comme $\bigcup_{\alpha \in [0, 1[} \Gamma_\alpha = \{z : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)|\}$

on peut conclure

$$\overline{\bigcup_{n \geq n} R_k} \subseteq \{z : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)|\} \cup \Gamma'$$

car γ est contenue dans le premier ensemble.

Examinons de plus près $\Gamma' = \{z : \mu(z) = 0\}$.

Pour $z \in \Gamma'$ nous avons :

$$\begin{aligned} p_0(z) &= \gamma(z) \\ p_1(z) &= \gamma(z) \lambda_2(z) \\ p_2(z) &= \gamma(z) \lambda_2^2(z) \\ &\vdots \\ p_n(z) &= \gamma(z) \lambda_2^n(z) \end{aligned}$$

On voit donc que : $p_n(z) = 0 \Leftrightarrow p_1(z) = 0$.

Si $p_0(z)$ est nul ceci entraîne :

$$z \in \{z : p_1(z) = p_0(z) = 0\}.$$

Si $p_0(z)$ est non nul nous avons :

$$p_2(z) = 0 = \alpha(z) p_1(z) + \beta(z) p_0(z) = \beta(z) p_0(z) = 0$$

donc

$$z \in \{z : p_1(z) = \beta(z) = 0\}.$$

Notons

$$\mathcal{D} = \{z : p_1(z) = p_2(z) = 0\}$$

$$\cup \{z : p_1(z) = \beta(z) = 0\}.$$

Nous pouvons donc affirmer

$$\overline{\bigcup_{n \geq n} R_n} \subset \mathcal{D} \cup \{z : |\lambda_1(z)| = |\lambda_2(z)| = 0\}.$$

Exemple

$$p_{n+1}(z) = (Az+B) p_n(z) - Cp_{n-1}(z) \quad A, B, C \in \mathbb{C} \quad A \neq 0$$

La matrice est :

$$\begin{pmatrix} Az+B & -C \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

son équation caractéristique :

$$\lambda^2 - \lambda(Az+B) + C = 0$$

Pour que $\lambda_1(z)$, $\lambda_2(z)$ soient de mêmes modules il faut et il suffit que

donc

Noton

$$(Az + B)^2 = Ca \quad a \in [0,4]$$

$$Az + B = \sqrt{C}\alpha \quad \alpha \in [-2,2]$$

$$z = \left(\frac{\sqrt{C}}{A}\right)\alpha - \frac{B}{A} \quad \alpha \in [-2,2]$$

ce qui donne un segment de \mathbb{C} , auquel on rajoute éventuellement ∞).

Polynômes de Tchebyshev

$$A = 2 \quad B = 0 \quad C = 1$$

$$z = \frac{\alpha}{2} \quad \alpha \in [-2,2]$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Y. ABE, S. KATSURA
 "Distribution of zeros of the partition function in the complex temperature plane II".
 Prog. Theor. Phys. 43, 1402-1403 (1970).
- [2] T. ASANO
 "The rigorous theorems for the Heisenberg ferromagnets"
 J. Phys. Soc. Japan. 29, 350-359 (1970).
- [3] N.L. BIGGS
 "Interaction models"
 London Mathematical Society Lecture Notes Series.
- [4] J. DIEUDONNE
 "La théorie analytique des polynômes à une variables".
 Mémorial des Sciences Math. Vol. 93 1938.
- [5] C. DOMB and M.S. GREEN
 "Phase Transitions and Critical Phenomena".
- [6] ERDÖS
 "On the distribution of roots of polynomials"
 Annals of Maths.
 Vol. 51 January 1950.
- [7] M.E. FISHER
 "Yang-Lee yedge Behavior in one-dimensional systems"
 Sup. Prog. Thero. Phys., n° 69, 1980.
- [8] N. GASTINEL
 "Quelques localisations des racines de polynômes à coefficients positifs".
 Séminaire Analyse Numérique de Grenoble - n° 350.
- [9] J. GINIBRE
 One some recent work of Dubrushin.
 Dans "systèmes à un nombre infini de degré de libertés".
 pp. 163-175. Colloque C.N.R.S. n° 181 (Paris 1970).
- [10] H.A. KRAMERS and G.H. WANNIER
 Phys. Rev., 60, 252-263 (1941)

- [11] O.J. HEILMANN
"Location of the zeros of the grand partition function of certain classes of lattice gases"
Stud. In App. Maths : 50, 385 (1971)
- [12] O.J. HEILMANN, E.H. LIEB
"Theory of monodimer systems"
Communication in Math. Phys. 25, 190-232 (1972)
- [13] HENRICI
"Applied and computational complex analysis".
Vol. 1
- [14] T.D. LEE, C.N. YANG
"Statistical theory of equations of State and Phase transitions II.
Phys. Rev. 87, 410-419 (1952).
- [15] E.H. LIEB, D. RUELLE
"A property of zero of the partition function for Ising spin systems"
J. Math. Phys. 13, 781-784 (1972)
- [16] M. MARDEN
"The geometry of the zeros of a polynomial in a complex variable"
Amer. Math. Society, Survey n° 3 New York 1949
- [17] G. POLYA, G. SZEGÖ
"Problems and Theorems in Analysis"
Vol. II. Springer Verlag 1976
- [18] D. RUELLE
"Some remarks on the location of zeros of the partition function for lattice systems".
Comm. Math. Phys. 31, 265-277 (1973)
- [19] D. RUELLE
"Quelques résultats rigoureux récents en Mécanique Statistique :
Séminaire donné à l'Ecole Polytechnique en 1972".
- [20] D. RUELLE
"Extension of the Lee-Yang circle Theorem".
Phys. Rev. Letters 26, 303-304 (1971)

- [21] L.K. RUNNELS, J.B. HULBORD
"Applications of the Lee-Yang Ruelle Theory to hard-core lattice gases".
J. Stat. Phys. 6, 1-20 (1972).
- [22] M. SUZUKI, M.E. FISHER
"Zeros of the partition function for the Heisenberg and general Ising models".
J. Math. Phys. : 12, 235-246 (1971)
- [23] WALSH
"On the location of the critical points"
Amer. Math. Society 1950.
- [24] K. YAMADA, H. NAKANO and M. YAMASHITA
Prog. Theor. Physics, Vol. 65 n° 5 (1981)
- [25] C.N. YANG, T.D. LEE
"Statistical Theory of equations of state and phase transitions" I
Phys. Rev. 87, 404-409 (1952)

CHAPITRE V

CALCUL FORMEL DE FONCTIONS DE PARTITION EN PHYSIQUE STATISTIQUE

Présentation

Ce chapitre (et le suivant) illustre une démarche fondamentale du mathématicien appliqué : réaliser un calcul sur un problème relativement précis et bien cerné en l'occurrence celui des fonctions de partition de modèles à deux et trois dimensions. Ce travail comporte une étude théorique dont le but essentiel est de concevoir des algorithmes qui réalisent les calculs demandés. Dans les exemples présentés, les volumes de calcul sont si importants que l'élaboration des algorithmes doit toujours se faire avec pour objectif principal de réduire le temps de calcul au maximum. On pourrait croire que c'est effectivement toujours le cas mais ce problème est souvent pensé en complexité d'algorithmes et la différence se fait essentiellement entre algorithmes polynomiaux et ceux qui ne le sont pas. Dans nos exemples dont certains ne peuvent se résoudre en temps polynomial (en la taille de problème) on est à la recherche de l'algorithme qui réduit le temps de calcul : gagner la moitié du temps sur 1 heure de CPU est très concret.

Le calcul des fonctions de partition se fait en utilisant l'expression par matrices de transfert en particulier les formes tensorielles du chapitre IV (paragraphe I.2). En premier lieu une étude de ces matrices permet, pour chaque exemple, de construire la base de matrices la plus adaptée au calcul. La deuxième difficulté de ce calcul réside dans le fait que les fonctions de partitions font intervenir des entiers extrêmement grands. J'ai puisé dans les concepts mathématiques habituels au calcul formel l'idée de reconstitution formel de polynômes par interpolation sur des corps finis.

Enfin, je précise que j'ai effectivement réalisé les programmes qui permettent de réaliser ces algorithmes : d'ailleurs sans cela l'étude précédente n'aurait aucun sens. Cette réalisation a pris énormément de temps mais il faut savoir que ce n'est qu'au prix d'une optimisation extrême de certaines portions cruciales des programmes que les résultats ont pu être obtenus. Ce genre de travail est la partie (malheureusement trop) cachée de l'iceberg... Une thèse n'étant pas une brochure technique je présente simplement en annexe à ce chapitre la source d'un programme pour le problème à deux dimensions.

Notons pour finir que les algorithmes peuvent s'adapter à des réseaux différents le point essentiel étant de conserver les spins d'Ising.

Note : Le reste du chapitre est constitué par le texte du Rapport de Recherche IMAG n° 411 "Calcul formel de fonctions de Partition en mécanique statistique".

INTRODUCTION

Le présent rapport donne les grandes lignes de méthodes de calcul de certaines fonctions de partition en physique statistique, le problème étant un problème de combinatoire énumérative. Les résultats obtenus concrétisent un long travail de préparation ([2][4][7][8][9]).

Le succès des méthodes élaborées est dû à une confrontation permanente de notions mathématiques et des considérations de programmation très proches de la machine utilisée. Il s'agit en fait de trouver une formulation d'un problème permettant une programmation très performante d'un calcul excessivement coûteux.

Il faut noter aussi qu'il existe "théoriquement" des méthodes plus performantes pour traiter certains problèmes particuliers où l'existence d'algorithmes "polynomiaux" a été prouvée ([3]) alors que l'algorithme proposé est "exponentiel". Il reste cependant que de tels algorithmes "polynomiaux" n'ont pas pu donner encore des réalisations pratiques et que les résultats obtenus dans ce rapport concernent les plus gros problèmes du genre traités à ce jour. Ceci permettra de réaliser des expériences inédites en physique.

I - LE PROBLÈME BIDIMENSIONNEL

I.1. DESCRIPTION

Considérons un réseau régulier possédant m lignes et n colonnes : ce réseau possède $m \times n$ "noeuds" ou "sites" occupés par des spins de valeur ± 1 interagissant entre plus proches voisins .

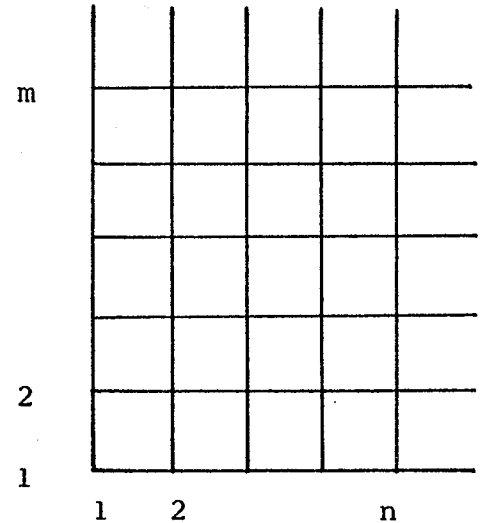
A une configuration de spins :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \sigma_{mn} \end{pmatrix} \in \{-1, 1\}^{m \times n}$$

on associe

$$E(\sigma) = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

où (i,j) décrit l'ensemble des sites voisins et $J_{ij} = \pm 1$ désigne la valeur de l'interaction entre les sites i et j .



Nous recherchons l'expression "formelle" de

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} e^{-\beta E(\sigma)}$$

(la fonction de partition du système) ou de manière équivalente :

$$P(e^{-\beta}) = (e^{-\beta})^{2m \times n} Z(\beta)$$

$P(e^{-\beta})$ étant un polynôme en $e^{-\beta}$ dont nous recherchons les coefficients.

I.2. PROBLÈME DU TEMPS DE CALCUL

L'énumération des états de spins σ n'a pas permis de dépasser des échantillons de taille 6×6 ([7][12][15]). Pour éviter l'énumération nous avons adopté une expression matricielle de $Z(\beta)$ que nous détaillerons plus tard.

I.3. RECONSTITUTION FORMELLE DU POLYNÔME

Nous verrons que la méthode proposée demande beaucoup de place mémoire et ne permet pas de manipuler globalement le polynôme : nous le restituerons par interpolation. De plus les coefficients du polynôme sont des entiers positifs très grands dépassant la taille maximum permise par les langages usuels.

Pour ces deux raisons, nous avons choisi d'utiliser des "arithmétiques modulaires".

II - RECONSTITUTION DU POLYNÔME

II.1. ARITHMÉTIQUE MODULAIRE ([1])

Théorème chinois sur le reste.

Soient p_0, p_1, \dots, p_{n-1} des nombres premiers entre eux
 et $p = \prod_{i=0}^{n-1} p_i$.

Nous pouvons représenter tout entier u , $0 \leq u < p$
 de façon unique par l'ensemble de ses restes u_0, u_1, \dots, u_{n-1}
 où $u \equiv u_i \pmod{p_i}$, $0 \leq i < n$.

RECONSTITUTION D'UN NOMBRE PAR SES RESTES

Soient p_0, p_1, \dots, p_{n-1} des nombres premiers entre eux
 et des restes u_0, u_1, \dots, u_{n-1} .

Soient

$$p = \prod_{i=0}^{n-1} p_i$$

$$c_i = p/p_i$$

$$d_i = c_i^{-1} [p_i]$$

$$(d_i c_i \equiv 1 [p_i] \quad 0 \leq d_i < p_i)$$

et u l'unique entier vérifiant :

$$0 \leq u < p$$

$$u \equiv u_i [p_i] \quad 0 \leq i < n$$

$$\text{Alors } u \equiv \sum_{i=0}^{n-1} c_i d_i u_i \quad [p]$$

REMARQUE

La reconstitution du nombre p , s'il dépasse la capacité de la machine, demande une représentation particulière des entiers, et des algorithmes de multiplication, division, addition, ... les programmes correspondants ont été écrits dans [2].

II.2. RECONSTITUTION DU POLYNÔME

Le problème est ramené à calculer les coefficients des polynômes P modulo des nombres premiers $p = p_0, \dots, p_{n-1}$.

Pour cela nous allons reconstituer formellement le polynôme $P(z)$ en le considérant comme un polynôme sur $\mathbb{Z} / p_i \mathbb{Z}$.

Choisissons $x_0, x_1, \dots, x_r \in \mathbb{Z} / p_i \mathbb{Z}$, $x_k \neq x_j$, et $r \geq \text{degré } P$ (ce qui implique de $p_i > r$).

Supposons connus : $y_j = P(x_j) \pmod{p_i}$
 $j = 0, \dots, r$
 $0 \leq y_j < p_i$

PROPRIETE (Démonstration dans [2])

Il existe un polynôme unique $P_i(z)$ à coefficients dans $\mathbb{Z} / p_i \mathbb{Z}$ qui vérifie

$$P_i(x_j) = y_j \pmod{p_i}$$

$$j = 0, \dots, r$$

$$d^0 P_i \leq r$$

Le polynôme P_i peut être construit par un procédé classique d'interpolation (différences divisées par exemple).

PROPRIETE

Le polynôme P_i précédent étant unique ses coefficients sont donc les restes modulo p_i des coefficients du polynôme P .

PRATIQUE DE LA RECONSTITUTION DU POLYNÔME P

Nous choisissons des nombres premiers p_0, p_1, \dots, p_{n-1} pour lesquels nous calculons les polynômes P_0, P_1, \dots, P_{n-1} en utilisant un procédé d'interpolation. Les valeurs dont nous avons besoin sont donc les valeurs modulo les p_i du polynôme $P(z)$, $z \in \mathbb{Z} / p_i \mathbb{Z}$ en un certain nombre de point z . Nous montrerons comment réaliser ce calcul de base.

III - FORMULATION MATRICIELLE ([5][6][8])

III.1. NOTATIONS

$$\text{Posons : } 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad c = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Pi = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1$$

$$S_r = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes S \otimes \dots \otimes 1$$

$$C_r = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes C \otimes \dots \otimes 1$$

\uparrow \uparrow
 r^{ème} terme n^{ème} terme

pour $r = 1, 2, \dots, n$

(par convention $S_{n+1} = S_1$).

III.2. PÉRIODICITÉ EN LIGNES

Considérons le cas où les sites de la m^{ème} ligne interagissent avec les sites de la première ligne dans la même colonne. On peut écrire : ([5])

$$Z(\beta) = \text{Trace } (A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m B_m)$$

avec :

$$A_k = \prod_{r=1}^n (\text{ch}(\beta J_k^{Or}) \Pi + \text{sh}(\beta J_k^{Or}) S_r S_{r+1})$$

$$B_k = \prod_{r=1}^n (\exp(\beta J_k^{Vr}) \Pi + \exp(-\beta J_k^{Vr}) C_r)$$

où J_k^{Or} désigne la valeur ± 1 de la liaison entre les r^{ème} et (r+1)^{ème} sites de la k^{ème} ligne et J_k^{Vr} la valeur (± 1) de la liaison entre les r^{ème} sites des lignes k et k+1. Les valeurs n+1 et m+1 correspondent à 1 par périodicité.

Pour obtenir $P(e^{-\beta}) = Z(\beta) (e^{-\beta})^{2mn}$ nous remplaçons A_k par :

$$\prod_{r=1}^n (e^{-\beta} \operatorname{ch}(\beta J_k^O r) \mathbb{1} + e^{-\beta} \operatorname{sh}(\beta J_k^O r) S_r S_{r+1})$$

et B_k par :

$$\prod_{r=1}^n (e^{-\beta} e^{\beta J_k^Y r} \mathbb{1} + e^{-\beta} e^{-\beta J_k^Y r} C_r)$$

La variable qui intervient est donc maintenant $z = e^{-2\beta}$ (à laquelle nous donnerons une valeur dans $\mathbb{Z} / p \mathbb{Z}$).

Pour effectuer le produit nous allons utiliser une base particulière du sous-espace engendré par les matrices considérées.

Posons :

$$S_r S_{r+1} = T_r, \quad r=1, 2, \dots, n-1$$

et considérons les matrices :

$$T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} T_{n-2}^{\alpha_{n-2}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} C_{n-1}^{\beta_{n-1}} \dots C_1^{\beta_1}$$

avec $\alpha_i, \beta_i = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$ $\bar{\alpha}$ désignant la négation de α

Nous noterons ces matrices Γ_i avec :

$$i = \overline{\alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_1 \beta_n \beta_{n-1} \dots \beta_1}$$

(représentation binaire).

T_r anticommute avec C_r et C_{r+1} et commute avec les autres C_i et T_i ($T_r^2 = \mathbb{1}$), C_r anticommute avec T_{r-1}, T_r et commute avec les autres C_i et T_i ($C_r^2 = \mathbb{1}$). Donc :

$$T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_r^{\alpha_r} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_1^{\beta_1} T_r = + T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_r^{\bar{\alpha}_r} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_1^{\beta_1}$$

$$T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_r^{\beta_r} \dots C_1^{\beta_1} C_r = T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_r^{\bar{\beta}_r} \dots C_1^{\beta_1}$$

Le produit $A_1 B_1 \dots A_m B_m$ peut se mettre sous la forme :

$$\prod_{\ell=1}^{2mn} (a_\ell \mathbb{1} + b_\ell U_\ell)$$

Les U_ℓ étant des matrices du type T_r ou C_r . Les propriétés multiplicatives des matrices de base avec les U_ℓ permettent de programmer facilement le produit de proche en proche. Notons aussi que la seule matrice de la base de trace non nulle est $\Gamma_0 = \mathbb{1}$ (trace $\Gamma_0 = 2^n$) ce qui permettra de calculer trace $(A_1 B_1 \dots A_m B_m)$ le produit étant exécuté sur la base des Γ_i .

III.3. NON PÉRIODICITÉ EN LIGNES

Dans le cas où il n'existe aucune interaction entre les sites de la 1^{ère} et de la m^{ème} ligne, la valeur de $Z(\beta)$ est égale à la somme des éléments de la matrice : $A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m$ ([8]) B_m étant absente.

V désignant le vecteur de \mathbb{R}^{2^n} dont toutes les composantes sont égales à +1 il faut calculer :

$$V^T A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m V$$

Nous allons montrer comment effectuer facilement le produit :

$$V^T A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m$$

en travaillant sur la base constituée par les 2^{n-1} vecteurs :

$$V^T T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} T_{n-2}^{\alpha_{n-2}} \dots T_1^{\alpha_1}$$

Les règles de multiplication par les matrices T_r et C_r sont extrêmement simples :

$$V^T T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_r^{\alpha_r} \dots T_1^{\alpha_1} T_r = V^T T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_r^{\bar{\alpha}_r} \dots T_1^{\alpha_1}$$

$$V^T T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_r = \pm V^T T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1}$$

et permettent de réaliser de proche en proche $V^T A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m$.

III.4. PÉRIODICITÉ, ANTIPÉRIODICITÉ DES SPINS

Les interactions entre les 1^{ère} et n^{ème} colonnes sont introduites par les matrices :

$$\text{ch}(\beta J_n^{O_r}) \mathbb{1} + \text{sh}(\beta J_n^{O_r}) S_1 S_n$$

Elles peuvent ne pas exister.

Pour imposer aux spins de la première colonne d'être égaux à ceux de la dernière colonne il suffit de prendre les

$J_n^{O_r} = +\infty$ et de "normaliser" ce qui revient à prendre la matrice :

$$(1/2 \mathbb{1} + 1/2 S_1 S_n)$$

Pour imposer aux spins de la première colonne d'être opposés à ceux de la dernière colonne il suffit de prendre

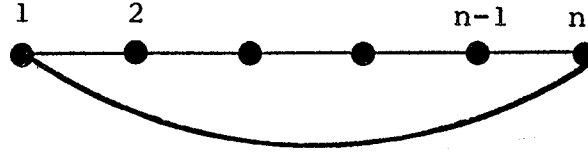
$J_n^{O_r} = -\infty$ et la matrice :

$$\prod_{r=1}^n (1/2 \mathbb{1} - 1/2 S_1 S_n)$$

EXEMPLE

$m=1$ non périodique en ligne.

1) Chaîne de n sites et liaisons positives, périodique



$$Z(\beta) = V^T ((\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_1 S_2) (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_2 S_3) \dots (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_{n-1} S_n)) V$$

$$Z(\beta) = (\text{ch}\beta)^n V^T V + (\text{sh}\beta)^n V^T V = 2^n ((\text{ch}\beta)^n + (\text{sh}\beta)^n)$$

2) Pas de liaison entre le 1^{er} et le dernier site mais les spins sont identiques :

$$Z(\beta) = V^T (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_1 S_2) (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_2 S_3) \dots (1/2 \mathbb{1} + 1/2 S_{n-1} S_n) V$$

$$Z(\beta) = 2^{n-1} \{ (\text{ch}\beta)^{n-1} + (\text{sh}\beta)^{n-1} \}$$

3) Pas de liaison entre le premier et le dernier site mais les spins sont opposés

$$Z(\beta) = V^T (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_1 S_2) (\text{ch}\beta \mathbb{1} + \text{sh}\beta S_2 S_3) \dots (1/2 \mathbb{1} - 1/2 S_{n-1} S_n) V$$

$$Z(\beta) = 2^{n-1} \{ (\text{ch}\beta)^{n-1} - (\text{sh}\beta)^{n-1} \}$$

IV - ÉTUDE DE LA COMPLEXITE DE CALCUL DE P

IV.1. PÉRIODICITÉ

Pour effectuer le calcul du produit matriciel

$$\prod_{\ell=1}^{2mn} (a_{\ell} \mathbb{1} + b_{\ell} U_{\ell})$$

sur la base choisie il faut de l'ordre de $O(mn 2^{2n-1})$

opérations car la base comporte 2^{2n-1} éléments.

Pour calculer un $P_i(z)$ de degré $2mn$ il faut $2mn + 1$ points d'interpolation. En négligeant la reconstitution du polynôme dans laquelle il n'y a pas de facteur exponentiel ceci nous donne pour le calcul de $P_i(z)$ une complexité de $O(m^2 n^2 2^{2n})$.

IV.2. NON PÉRIODICITÉ

La base de vecteurs sur laquelle nous travaillons ne comporte plus que 2^{n-1} vecteurs et la complexité est de l'ordre de $O(m^2 n^2 2^n)$.

V - RÉSULTATS NUMÉRIQUES

V.1. CAS PÉRIODIQUE

V.1.1. RÉALISATION PRATIQUE DE L'ALGORITHME.

Le programme a été réalisé en FORTRAN et est exploité sur l'IBM 3033 du CNUSC.

PLACE MEMOIRE

Une base de matrices Γ_i comporte 2^{2n-1} éléments.

PROPRIÉTÉ DU POLYNÔME

Pour réduire le nombre d'évaluations du polynôme nous tenons compte éventuellement :

- des propriétés de symétrie du polynôme
- de changement de variables : polynôme en $e^{-2\beta}$ voire $e^{-4\beta}$
- de relations particulières : $P(1) = 2^n$.

REALISATION DU PRODUIT MATRICIEL

Nous réalisons de proche en proche le produit

$$\prod_{\ell=1}^L (a_{\ell} \mathbb{I} + b_{\ell} U_{\ell})$$

que nous mettrons sous la forme :

$$\left(\prod_{\ell=1}^L a_{\ell} \right) \prod_{\ell=1}^L (\mathbb{I} + b_{\ell}/a_{\ell} U_{\ell})$$

et il nous faut réaliser efficacement les produits par des facteurs :

$$\mathbb{I} + \gamma C_r$$

$$\mathbb{I} + \gamma T_r$$

de façon à éviter au maximum les calculs d'adresses et les déterminations de signe.

PRODUIT PAR $\mathbb{I} + \gamma C_r$

Nous voulons réaliser le produit :

$$\sum_{i=0}^{2^{2n-1}} A(i) \Gamma_i (\mathbb{I} + \gamma C_r)$$

où

$$\Gamma_i = T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_1^{\beta_1}$$

$$i = \alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_1 \beta_n \dots \beta_1$$

Pour cela nous balayons les éléments Γ_i par groupe de 2 en considérant simultanément :

$$T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_r^0 \dots C_1^{\beta_1}$$

et

$$T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} \dots T_1^{\alpha_1} C_n^{\beta_n} \dots C_r^1 \dots C_1^{\beta_1}$$

ce qui peut se faire à l'intérieur d'une boucle

pour $i:=0$ jusqu'à $2^{r-1}-1$ par pas de 1

pour $j:=0$ jusqu'à $2^{2n-1}-2^r$ par pas de 2^r

La nouvelle valeur de $A(i+j)$ étant

$$A(i+j) + \gamma A(i+j+2^{r-1})$$

et la nouvelle valeur de $A(i+j+2^{r-1})$

$$A(i+j+2^{r-1}) + \gamma A(i+j) .$$

PRODUIT PAR $(\mathbb{1} + \gamma T_r)$

Pour effectuer le produit

$$\sum_{i=0}^{2^{2n-1}} A(i) \Gamma_i (\mathbb{1} + \gamma T_r)$$

nous considérons les groupes de 8 éléments :

$$\begin{array}{cccccccc}
T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} & \dots & T_r^0 & \dots & T_1^{\alpha_1} & C_n^{\beta_{n-1}} & \dots & C_{r+1}^0 & C_r^0 & \dots & C_1^{\beta_1} \\
T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} & \dots & T_r^0 & \dots & T_1^{\alpha_1} & C_n^{\beta_{n-1}} & \dots & C_{r+1}^0 & C_r^1 & \dots & C_1^{\beta_1} \\
T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} & \dots & T_r^0 & \dots & T_1^{\alpha_1} & C_n^{\beta_{n-1}} & \dots & C_{r+1}^1 & C_r^0 & \dots & C_1^{\beta_1} \\
T_{n-1}^{\alpha_{n-1}} & \dots & T_r^0 & \dots & T_1^{\alpha_1} & C_n^{\beta_{n-1}} & \dots & C_{r+1}^1 & C_r^1 & \dots & C_1^{\beta_1}
\end{array}$$

et les éléments identiques avec T_r^1 . Des traitements spéciaux doivent être faits pour les extrémités. Ceci est fait dans des boucles

pour $i := 0$ jusqu'à $2^{r-1} - 1$ par pas de 1

pour $j := 0$ jusqu'à $2^{r+n-1} - 2^{r+1}$ par pas de 2^{r+1}

pour $k := 0$ jusqu'à $2^{2n-1} - 2^{r+n}$ par pas de 2^{r+n}

Les opérations à effectuer sont, en posant $m=i+j+k$.

ANCIENNE VALEUR

NOUVELLE VALEUR

$A(m)$

$A(m) + \gamma A(m+2^{n+r-1})$

$A(m+2^{r+n-1})$

$A(m+2^{r+n-1}) + \gamma A(m)$

$A(m+2^{r-1})$

$A(m+2^{r-1}) - \gamma A(m+2^{r-1} + 2^{n+r-1})$

$A(m+2^{r+n-1} + 2^{r-1})$

$A(m+2^{r+n-1} + 2^{r-1}) - \gamma A(m+2^{r-1})$

$A(m+2^r)$

$A(m+2^r) - \gamma A(m+2^r + 2^{n+r-1})$

$A(m+2^r + 2^{r+n-1})$

$A(m+2^r + 2^{r+n-1}) - \gamma A(m+2^r)$

$A(m+2^{r-1} + 2^r)$

$A(m+2^{r-1} + 2^r) + \gamma A(m+2^{r-1} + 2^r + 2^{r+n-1})$

$A(m+2^{r-1} + 2^r + 2^{r+n-1})$

$A(m+2^{r-1} + 2^r + 2^{r+n-1}) + \gamma A(m+2^{r-1} + 2^r)$

Cette méthode permet donc d'effectuer le produit avec des calculs d'adresses très simples et des changements de signes immédiats.

Ce calcul étant le même il est souhaitable de calculer plusieurs produits matriciels simultanément (on utilise plusieurs tableaux A_1, A_2, \dots dans la limite de la place mémoire disponible).

V.1.2. QUELQUES RÉSULTATS

La taille maximum atteinte est $m = n = 8$ pour un réseau carré. On peut prendre comme variable $e^{-4\beta}$ et nous avons utiliser 5 nombres premiers de l'ordre de 2^{15} . L'exemple présenté ci-dessous a près de l'ordre de 1500 secondes de CPU.

MODELE D'ISING PLAN 8 x 8 PERIODIQUE variable $z = e^{-\beta}$

Les coefficients de z^{128} à z^0 sont à compléter par symétrie jusqu'à z^{-128} (les degrés sont espacés de 4 en 4).

LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	128 VAUT:	2
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	124 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	120 VAUT:	128
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	116 VAUT:	256
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	112 VAUT:	4672
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	108 VAUT:	17920
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	104 VAUT:	145408
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	100 VAUT:	712960
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	96 VAUT:	4274576
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	92 VAUT:	22128384
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	88 VAUT:	118551552
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	84 VAUT:	610683392
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	80 VAUT:	3150447680
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	76 VAUT:	16043331504
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	72 VAUT:	80748253688
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	68 VAUT:	396915938304
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	64 VAUT:	1887270677624
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	60 VAUT:	8582140066816
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	56 VAUT:	36967268348032
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	52 VAUT:	149536933509376
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	48 VAUT:	564033837424064
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	44 VAUT:	1971511029384704
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	40 VAUT:	6350698012553216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	36 VAUT:	18752030727310592
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	32 VAUT:	50483110303426544
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	28 VAUT:	123229776338119424
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	24 VAUT:	271209458049836032
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	20 VAUT:	535138987032308224
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	16 VAUT:	941564975390477248
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	12 VAUT:	1469940812209435392
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	8 VAUT:	2027486077172296064
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	4 VAUT:	2462494093546483712
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	0 VAUT:	2627978003957146636

V.2. CAS NON PÉRIODIQUE

Nous avons réalisé des calculs pour $m=n=12$.
La variable était $e^{-2\beta}$ et il a fallu prendre 10 nombres premiers de l'ordre de 2^{15} .

Les deux exemples présentés ci-dessous ont pris de l'ordre de 1700 secondes de CPU.

V.2.1. RÉALISATION PRATIQUE DE L'ALGORITHME

Les remarques à faire sont les mêmes que pour le cas périodique : utilisation des propriétés du polynôme pour réduire le nombre d'évaluations, balayage des éléments de la base adapté à chaque produit de façon à déterminer les signes et les calculs d'adresses.

V.2.2. QUELQUES RÉSULTATS

EXEMPLE 1 "Modèle d'Ising non périodique 12 x 12", variable $z = e^{-\beta}$
Les coefficients de z^{264} à z^0 sont à compléter par symétrie jusqu'à z^{-264} (les degrés sont espacés de 2 en 2) .

LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	264 VAUT:	2
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	262 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	260 VAUT:	8
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	258 VAUT:	96
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	256 VAUT:	316
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	254 VAUT:	576
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	252 VAUT:	4136
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	250 VAUT:	16416
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	248 VAUT:	47212
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	246 VAUT:	158528
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	244 VAUT:	632472
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	242 VAUT:	2012960
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	240 VAUT:	6281656
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	238 VAUT:	20749984
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	236 VAUT:	67676216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	234 VAUT:	206897472
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	232 VAUT:	638353948
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	230 VAUT:	1966753248
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	228 VAUT:	5952707400
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	226 VAUT:	17638751232
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	224 VAUT:	52478707468
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	222 VAUT:	154141783584
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	220 VAUT:	448139190024
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	218 VAUT:	1291216935744
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	216 VAUT:	3698585544230
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	214 VAUT:	10506569059712
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	212 VAUT:	29634982136336
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	210 VAUT:	83014802404416
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	208 VAUT:	231119537762200
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	206 VAUT:	639208774088960
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	204 VAUT:	1757283488504316
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	202 VAUT:	4802095241134272
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	200 VAUT:	13047641001632292
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	198 VAUT:	35246643876708416
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	196 VAUT:	94686551422778112
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	194 VAUT:	252951554081764160
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	192 VAUT:	672066050537417768
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	190 VAUT:	1775843386576901376

LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	133 VAUT:	4667056499914625792
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	136 VAUT:	12198785972868244864
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	184 VAUT:	31712643265684613728
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	182 VAUT:	81992930133214445120
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	180 VAUT:	210835381593524547968
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	173 VAUT:	539156335257362559168
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	176 VAUT:	1371119818932668086760
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	174 VAUT:	3467397891468228075008
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	172 VAUT:	8719150200267054730592
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	170 VAUT:	21800348236157905817600
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	168 VAUT:	54193008049728057866534
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	166 VAUT:	133931577379026691098880
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	164 VAUT:	3290420512306143956603408
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	162 VAUT:	303553427314053024413216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	160 VAUT:	1950466215725538539085892
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	158 VAUT:	4705285109752474729889472
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	156 VAUT:	11230279069622870338428696
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	154 VAUT:	26872077087677612910110048
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	152 VAUT:	63604853342271264149443248
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	150 VAUT:	149570468429962489403379776
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	148 VAUT:	349402535779364647699524408
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	146 VAUT:	810751694903245851701031328
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	144 VAUT:	1968475588178116452969713672
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	142 VAUT:	4276416385436273947310379168
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	140 VAUT:	9718963637889458258396192216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	138 VAUT:	21931127221290975872382186432
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	136 VAUT:	49131023562961833982727398930
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	134 VAUT:	109258846509553885870866116768
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	132 VAUT:	241165234106921004297105029440
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	130 VAUT:	528300128864064855360615721952
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	128 VAUT:	1148430177561690233533593569120
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	126 VAUT:	24770546853449113591795369595936
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	124 VAUT:	5300566619434947616340796367872
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	122 VAUT:	11251557176565099672470555566688
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	120 VAUT:	23689389919066682085231752681470
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	118 VAUT:	49464391749889713406471615778112
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	116 VAUT:	102417703474035041858077349132712
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	114 VAUT:	21025500768166562636202594816608
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	112 VAUT:	427909975406815478426559782290328
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	110 VAUT:	863245533039171823163065594869856
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	108 VAUT:	1725992032524023012645556692117448
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	106 VAUT:	3419855016986552211575269838137664
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	104 VAUT:	6714033176485504515726471338697560
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	102 VAUT:	13058941893016778046211000486280096
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	100 VAUT:	25160686839508732489146171852946824
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	98 VAUT:	48013981458055792577430533676026304
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	96 VAUT:	90736834876946519511003357044413676
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	94 VAUT:	169789408301215941195323105502398432
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	92 VAUT:	314548101704991108274110199115498184
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	90 VAUT:	576835464903090755296297425836814976
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	88 VAUT:	1046992195834095447276639874090193498
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	86 VAUT:	188061234388772039772426703618616576
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	84 VAUT:	3342397354938194208599771219062534336
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	82 VAUT:	5876961436944936415074680213160523648
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	80 VAUT:	102217207287930351022164016822408248
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	78 VAUT:	1758354630870750554298140650526529552
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	76 VAUT:	29911355976194456902842340016506984736
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	74 VAUT:	503093283206956401088430934573818680512
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	72 VAUT:	8365253524363949406643603151494545928
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	70 VAUT:	137487454476893131334149773725236149288
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	68 VAUT:	223324044689186249128305803194337809408
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	66 VAUT:	358452281811611191259997733303351099008
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	64 VAUT:	568441336801622241155733035466621305176
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	62 VAUT:	890498993933346323620312295470910141760
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	60 VAUT:	1377875112849152850972957817165561820672
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	58 VAUT:	2105475948063434233362714821214558700864
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	56 VAUT:	317680359885624890384130149432377221700
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	54 VAUT:	4732232992229439470684437923743225183296
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	52 VAUT:	6958474319964817634402118973656110351984
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	50 VAUT:	10098832014657693771038652614941638867328
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	48 VAUT:	1446356009792064600092875002686382862792
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	46 VAUT:	20439233602420768321647216395094214312512
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	44 VAUT:	28495684838125054030229594782791648611536
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	42 VAUT:	39188515963409282704069385887938316258688
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	40 VAUT:	53155167482066900297163900976099080774938
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	38 VAUT:	71102036360953475748409611977693979567424
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	36 VAUT:	93780563281596050476296400518813291398104
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	34 VAUT:	121950568579495261018169747164819383861216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	32 VAUT:	15633013826313632877911170947327557911492
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	30 VAUT:	197532730235913943729123913608748766320384
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	28 VAUT:	245994002804865510798958228228125789383576
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	26 VAUT:	301392877663530522983942432851220189781280
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	24 VAUT:	365073554872128110853103089466340806626268
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	22 VAUT:	434976346085597373564466768484928633699520
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	20 VAUT:	51058733145885274866050997056520846234958
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	18 VAUT:	590415431749018332017330263626876051364704
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	16 VAUT:	672505313413019258446489581978965926783144
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	14 VAUT:	75449132674392541038405027057715346377760
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	12 VAUT:	833693948166418294502397024328847557039336
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	10 VAUT:	907255427218805544243779890563266693743552
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	8 VAUT:	972306307349427793981903744241897989393602
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	6 VAUT:	1026149396334511369136512439898056951228640
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	4 VAUT:	1056448350502385932426530652081244653288080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	2 VAUT:	1091392441206431946538310584715729282095968
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE	0 VAUT:	1099837688542173595227020452138925950243784

EXEMPLE 2 : "Réseau carré 12 x 12 avec liaisons négatives"
 (inscrites en gras) , variable $z = e^{-\beta}$.

Les coefficients de z^{264} à z^0 sont à compléter par symétrie jusqu'à z^{-264} (les degrés sont espacés de 2 en 2) . Les termes nuls sont conservés pour comparaison avec l'exemple précédent .

12												
11												
10												
9												
8												
7												
6												
5												
4												
3												
2												
1												

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	264	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	262	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	260	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	258	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	256	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	254	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	252	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	250	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	248	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	246	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	244	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	242	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	240	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	238	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	236	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	234	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	232	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	230	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	228	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	226	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	224	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	222	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	220	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	218	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	216	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	214	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	212	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	210	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	208	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	206	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	204	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	202	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	200	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	198	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	196	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	194	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	192	VAUT:	0			
LE	COEFFICIENT	DU	TERME	DE	DEGRE	190	VAUT:	0			

LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 188 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 186 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 184 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 182 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 180 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 178 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 176 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 174 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 172 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 170 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 168 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 166 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 164 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 162 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 160 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 158 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 156 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 154 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 152 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 150 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 148 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 146 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 144 VAUT:	0
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 142 VAUT:	1563145902489600
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 140 VAUT:	62344622914929640
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 138 VAUT:	1465213626406580224
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 136 VAUT:	24298930658655338496
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 134 VAUT:	316326121495846715392
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 132 VAUT:	3398665745566258954240
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 130 VAUT:	31216561652595546914816
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 128 VAUT:	250326118324290576187392
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 126 VAUT:	1794131397308829107486720
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 124 VAUT:	11575003128823088326542664
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 122 VAUT:	68064706717320048535404544
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 120 VAUT:	367893747293757182327193600
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 118 VAUT:	1840647200016084565294579712
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 116 VAUT:	8574949995505023143903232000
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 114 VAUT:	37385567563618305861312038912
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 112 VAUT:	153212076323366511278100054016
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 110 VAUT:	592474832937474449863656603648
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 108 VAUT:	2169273591405983225454648098816
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 106 VAUT:	7543061456120303938217827463680
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 104 VAUT:	24978055777669656327445628846080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 102 VAUT:	78963018013725028187632155230208
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 100 VAUT:	23843909550627483542188128731136
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 98 VAUT:	692714580179569326959140756520960
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 96 VAUT:	1929929636047677464822237152411648
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 94 VAUT:	51742251494085837464990349847560192
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 92 VAUT:	13371180579135856764719987242827776
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 90 VAUT:	33355535007089527994752198524003328
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 88 VAUT:	8043540323304800610948736960430080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 86 VAUT:	187747345050167696541424726065545216
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 84 VAUT:	424673811266099414104587106019966976
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 82 VAUT:	932067658444290480635942798889058304
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 80 VAUT:	1986782791701325758670177525901033472
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 78 VAUT:	4117347821085513332262728535010967552
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 76 VAUT:	8303373787813596970065097299618430976
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 74 VAUT:	16309549257523218421309377057405272064
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 72 VAUT:	31227463511549542121582551599004256208
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 70 VAUT:	58327590778471956933482918037889744896
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 68 VAUT:	106357650652279135356551222912834600960
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 66 VAUT:	189459549943502269996562392938524683264
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 64 VAUT:	329909749509065161578574198901470920704
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 62 VAUT:	561908652311159799764975964836539138048
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 60 VAUT:	936641705857994827825968480917348870144
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 58 VAUT:	1528793881592205040750794841740028149760
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 56 VAUT:	2444604345091963521025621189820762030080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 54 VAUT:	3831385161167369491258752319313089134592
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 52 VAUT:	5888187584595800475622467445298317754368
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 50 VAUT:	8876932282234263579120451137965750484992
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 48 VAUT:	1313340402701081160799885995397856886784
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 46 VAUT:	1907519352973334224590238036578004893696
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 44 VAUT:	27207964813904139399647108445885320658944
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 42 VAUT:	38123271757231573740424375015058796410688
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 40 VAUT:	52491086236790651180169440549134089060352
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 38 VAUT:	71039783947270739301741964805479155630080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 36 VAUT:	94525994752596324494003591031468064768000
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 34 VAUT:	123691418033840963166009138945841451499520
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 32 VAUT:	159207785842976176201297846350139447312384
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 30 VAUT:	201611873403828044144294648447479400346080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 28 VAUT:	251234236571420991933616304556988015714304
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 26 VAUT:	3091270032511162816031032875679108050930688
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 24 VAUT:	371997420889397861182546372736015015084032
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 22 VAUT:	442154711661964928092957812126303749684736
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 20 VAUT:	51747789280354530564450591195777201233920
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 18 VAUT:	596411321239343601088310022860396199673856
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 16 VAUT:	67699321525643180027662559986475186782080
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 14 VAUT:	756912170726416927485604360823181255114752
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 12 VAUT:	833640046424913802303693981791247451291668
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 10 VAUT:	904489370506259863341496981698149131223040
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 8 VAUT:	968932155510665933306044672355788168101888
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 6 VAUT:	1018223971317014673042437453656192851116032
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 4 VAUT:	1056567195829033825975021136042193573642240
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 2 VAUT:	1080250767118914193739603513279964419981312
LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE 0 VAUT:	1089260669891791209370244439903019122819072

VI - LE PROBLÈME À TROIS DIMENSIONS NON PÉRIODIQUE

VI.1. GÉNÉRALITÉS

Le problème à trois dimensions a été abordé dans [4] sur des principes identiques à ceux exposés dans ce rapport :

- utilisation de polynômes à coefficients sur $\mathbb{Z} / p \mathbb{Z}$
- choix de bases adaptées au problème.

Pour un réseau cubique $n \times \ell \times m$ considéré comme une superposition de m "tranches" $n \times \ell$ nous utilisons la base :

$$s^{\alpha_1} \otimes s^{\alpha_2} \otimes \dots \otimes s^{\alpha_{\ell n}}$$

avec

$$\alpha_i = \begin{cases} 0 & s^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 1 & s^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

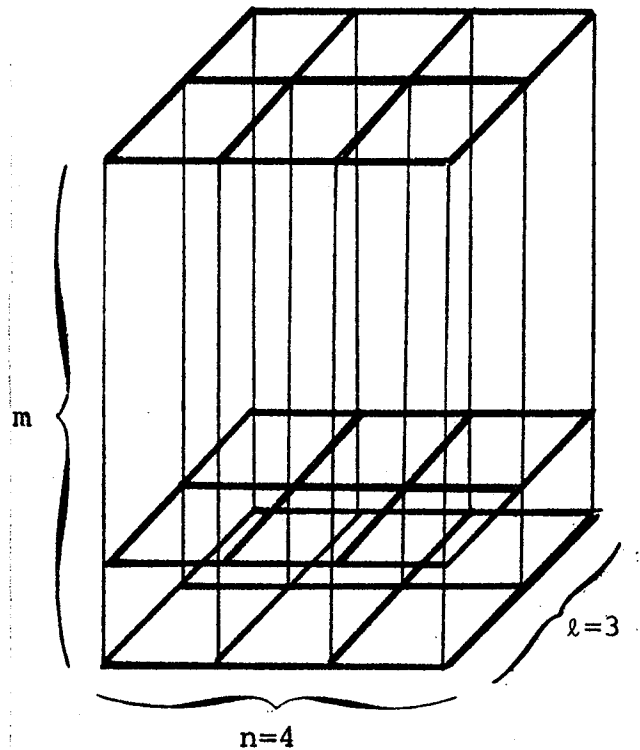
ce qui correspond au vecteur

$$Y_i \quad \underline{i = \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{\ell n}}$$

Nous devons calculer un produit

$$V^T \prod_{i=1}^L (a_i \Pi + b_i U_i) V$$

où V est le vecteur de $\mathbb{R}^{2n\ell}$ dont toutes les composantes sont égales à $+1$ et les U_i des matrices



$$\begin{array}{c}
 1 \otimes \dots \otimes S \otimes \dots \otimes S \otimes \dots \otimes 1 = S_q S_r \\
 \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\
 \quad \quad \quad q^{\text{ème}} \text{ position} \quad r^{\text{ème}} \text{ position} \\
 \quad \quad \quad \downarrow \\
 1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes \dots \otimes C \otimes \dots \otimes 1 = C_r
 \end{array}$$

Des règles de calcul très simples nous permettent de réaliser le calcul des valeurs du produit.

VI.2. RÉALISATION PRATIQUE DE L'ALGORITHME

La programmation, expérimentale dans le rapport ([4]) a été rendue opérationnelle depuis par utilisation de principes équivalents à ceux développés pour le problème à deux dimensions. Par exemple pour effectuer un produit :

$$(\sum A(i)\gamma_i) (\mathbb{I} + \gamma S_q S_r)$$

on considère simultanément les éléments de la base :

$$\begin{array}{c}
 s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^0 \otimes \dots \otimes s^0 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1} \\
 s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^1 \otimes \dots \otimes s^0 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1} \\
 s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^0 \otimes \dots \otimes s^1 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1} \\
 s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^1 \otimes \dots \otimes s^1 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1} \\
 \quad \quad \quad \nearrow \quad \quad \quad \nwarrow \\
 \quad \quad \quad q^{\text{ème}} \text{ position} \quad r^{\text{ème}} \text{ position}
 \end{array}$$

De même pour effectuer un produit :

$$(\sum A(i)\gamma_i) (\mathbb{I} + C_r)$$

on considère les éléments :

$$s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^0 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1}$$

$$s^{\alpha_{nl}} \otimes \dots \otimes s^1 \otimes \dots \otimes s^{\alpha_1}$$

r^{ème} position

De plus on utilise le fait que seuls les éléments de la base où figurent des exposants $+1$ en nombre pair sont effectivement utilisés.

VI.3. QUELQUES RÉSULTATS

EXEMPLE 1 Modèle d'ISING 3 X 3 X 20

Toutes les liaisons sont positives. Le calcul a nécessité 900 secondes de CPU (IBM 3033). Cet exemple est destiné à montrer qu'il n'est pas très coûteux " d'allonger" le modèle dans une direction.

Le résultat est présenté sous forme d'un polynôme en $z = e^{-2\beta}$ symétrique ($A(k) = A(411-k)$). La fonction de partition est obtenue en multipliant par $e^{411\beta}$.

```

A(411) = 2
A(410) = 0
A(407) = 0
A(403) = 16
A(407) = 160
A(406) = 196
A(405) = 244
A(404) = 1616
A(403) = 8144
A(402) = 17906
A(401) = 32356
A(400) = 103948
A(399) = 365116
A(398) = 947072
A(397) = 2088572
A(396) = 5371428
A(395) = 15245860
A(394) = 39683124
A(393) = 94531722
A(392) = 229490868
A(391) = 582571540
A(390) = 1456045308
A(389) = 3502852304
A(388) = 8341314488
A(387) = 20070385958
A(386) = 48213997468
A(385) = 114136028924
A(384) = 267344436810
A(383) = 624883347248
A(382) = 1457421015980
A(381) = 3376951655392
A(380) = 7768768259520

```

A(379) = 17738083215700
 A(378) = 40583474822926
 A(377) = 92181387472304
 A(376) = 208335343232596
 A(375) = 468725624137323
 A(374) = 1050442167593390
 A(373) = 234498824339328
 A(372) = 5213851327436804
 A(371) = 11546864871911390
 A(370) = 25477522319073672
 A(369) = 56013896609042110
 A(368) = 122713609885954743
 A(367) = 267897754172950672
 A(366) = 582864788910407364
 A(365) = 1263950978372260000
 A(364) = 2732019871816419412
 A(363) = 5396416532853549918
 A(362) = 12643247406725799014
 A(361) = 27072871726595347860
 A(360) = 57796601204242794830
 A(359) = 123022256760330262672
 A(358) = 261095245780761464864
 A(357) = 552545977411926884828
 A(356) = 1166033925265293234584
 A(355) = 2453331982587730086314
 A(354) = 5149746019576658803978
 A(353) = 10778290979416813479450
 A(352) = 22498421290437721216088
 A(351) = 46838850590902038004868
 A(350) = 77258053013475823033320
 A(349) = 201429201476234240716312
 A(348) = 416110289693534411302516
 A(347) = 357421393502946439190032
 A(346) = 1762345242041133543140202
 A(345) = 3613327092726170167565446
 A(344) = 7390134770676222309484230
 A(343) = 15077681018447660572720604
 A(342) = 30687504793266958613527400
 A(341) = 62307537009643855983228828
 A(340) = 126205465845318387400697744
 A(339) = 255023600125222395340450272
 A(338) = 514106078155779470155948052
 A(337) = 1033951771067134396169762406
 A(336) = 2074567269517510378919426830
 A(335) = 415275373087449343198538240
 A(334) = 8293479022798135347841937160
 A(333) = 16524387965751056286386401736
 A(332) = 32847855191963017410568304356
 A(331) = 65145410970238638443821624782
 A(330) = 128901372597627935863550892056
 A(329) = 254465812697605985139291899236
 A(328) = 501187671586342855768334514598
 A(327) = 984851526867725875980195835064
 A(326) = 1939814595988211575316779508168
 A(325) = 3776672814440128052772010790888
 A(324) = 7370148711463505142342437466312
 A(323) = 14349604547521759396002651065402
 A(322) = 27873959933759240987085930994414
 A(321) = 54019467710178657583242551253012
 A(320) = 104446098276434419191840004998320
 A(319) = 201475108782006640731904164470480
 A(318) = 387734425253906068057698759005932
 A(317) = 744435704329905395448500323793296
 A(316) = 1425921225503033922746296174182216
 A(315) = 2724799579127491329741740831354318
 A(314) = 5194443272821296415868457112013598
 A(313) = 9878775674621274340296997015451130
 A(312) = 18742205412519122226389324471624888
 A(311) = 35471946094369891936804125234000128
 A(310) = 66971325823661814489214667312736860
 A(309) = 126131813197173563491640320461931632
 A(308) = 236964905060571334268849009826442052
 A(307) = 444077056182029128713147962298126766
 A(306) = 830115027939297848509960711985431338
 A(305) = 1547797083352307273710860840113128250
 A(304) = 2978559354015042645442541799718612066
 A(303) = 5339625403213076992346805175454847828
 A(302) = 9878915245134578018790406797822796812
 A(301) = 18228813772905171848533058333941053964
 A(300) = 33546361277089852169655445520540575952
 A(299) = 61568252602840502777911007854035503544
 A(298) = 112688214487961717485240400291104073286
 A(297) = 205681678044731876206740346976359637126
 A(296) = 374362746516317320275503045514715222542
 A(295) = 679443412487154356541975404317465046276
 A(294) = 1229590784776676943039301411574414329556
 A(293) = 2218690711089099911225933578416482348724

A(292) = 3991565062760652508996380210571238696064
A(291) = 7159464659070276847109525894000317714358
A(290) = 12802316040049957635108420230140034321140
A(289) = 22821600695371626480124429290849145827358
A(288) = 40553771233300967231356203951751927136914
A(287) = 71832518681728988437846741576924146617324
A(286) = 126821193036741715189072586129269540161660
A(285) = 223161210461559613183466074609726423416660
A(284) = 391359599743476299283788459140784092818624
A(283) = 683969871608972546310732737930212229327258
A(282) = 1191170521152975658205670495893213782007326
A(281) = 2067084148370911021663769727904426442918336
A(280) = 3574043792231102865086475675347586549138866
A(279) = 6156703997475251796038157899826358717162424
A(278) = 10565535622358628905424514536776487762462584
A(277) = 1806161982490286459205411326285596984065096
A(276) = 30754583074441394076444134186986680264376752
A(275) = 52157400533860207734940831396792292557279558
A(274) = 89092494003106304651734259104268158939618894
A(273) = 148163634714171745936384121612929471792431726
A(272) = 248133805207065624898931155728776929555249524
A(271) = 413744910620208776581011729463319947592401656
A(270) = 686317940498209448006693929954002887206918936
A(269) = 1134936791193121920126900018320002164733114164
A(268) = 1866726455724983315756512214660038391809152408
A(267) = 3055804352458949134305268849707624585345337548
A(266) = 4978087746954120994929752265126498285197711930
A(265) = 8069501271421778310842288053164921275025046358
A(264) = 13014649062831285158207642770059175838634452830
A(263) = 20882067080657431575698434256341676076413839060
A(262) = 33329030643127497786619821499423521171658212792
A(261) = 52909333775854398715872668388577217338983955732
A(260) = 93532204236233738692060237810099344275967286632
A(259) = 131141059790858224018412094770356395027464153784
A(258) = 204709072968598716364195729110649234401160826924
A(257) = 317686859970010863234873315145619439129302069782
A(256) = 490088938174390740506822103526375106424004327842
A(255) = 751473094996664164079370695661524102647410812164
A(254) = 1145154292731776486845319095163587080579966717816
A(253) = 1734105684071873791318963748627098551145090715132
A(252) = 2609137302911872424157501219866469129563399448100
A(251) = 3900110328882174650801316947972911341777918590314
A(250) = 5791142062699931697822612914354909710074758409036
A(249) = 8540981273243135927984135934685006627852300120372
A(248) = 12509978074369246522646865025810876394308664422030
A(247) = 18195323076917371447519485865343316393643722464292
A(246) = 26276464725723019603918176601659454322677176674888
A(245) = 37672798279074393379186050909175434566891626843816
A(244) = 53615809225955914727120826117454151202768132623312
A(243) = 75737789140365588982968263384294674370932406570820
A(242) = 106178951225483576011356375368826042328335463926838
A(241) = 147714173839922090367114777493865726115865760659044
A(240) = 203899606279938565880314203940718704611436705125964
A(239) = 279237895966174853211679289941273083751268564115456
A(238) = 37935877817780484667601863636201299236294962861720
A(237) = 511209162596451082440130037816754436760307653206572
A(236) = 683243683898648718226242119495939158260228091533432
A(235) = 905603034637878266861778609858727698203517571546216
A(234) = 1190263454396024318271269879599832156297696587648952
A(233) = 1551136801740965293802525798465162454342630981842282

A(232) = 2004097067311672784027700481242038633390519387234900
A(231) = 256690657040476850416222597142094555745789706042180
A(230) = 3259013910479165095543419039643390408325420321064200
A(229) = 4101196782445548583050097027234349411538741188597416
A(228) = 5115026515794357564662567524350916874748253658270720
A(227) = 6322138219385204912189647656234084967640179007343238
A(226) = 7743300967183055861086149968316148138623427350464100
A(225) = 9397296518232951032010415348811812910235784365611472
A(224) = 11299632187529423725846828682481542480078310323012554
A(223) = 13461132766102759749939732415016686131098761199879780
A(222) = 15886476438005138494129946749269748079455304243225456
A(221) = 18572758631538333490271217615041058980307397788148036
A(220) = 21508183526065046693127863558170604807566765345933708
A(219) = 24670993239845492101894453916662692227820738392580216
A(218) = 28028747397530278539767123175026652078326648389823762
A(217) = 31538059080141631846635916547817116760567395941613252
A(216) = 35144876064084889737902531975509396869302256791590368
A(215) = 38785368689631101399402545596856836320108213775379364
A(214) = 42387448729628272110260477514121087124256205132386576
A(213) = 45872899509443810899774377867461566914840119002971948
A(212) = 49160049603174916956418107282151201002009745539225512
A(211) = 52166874878880020507702738113003831484375736919733458
A(210) = 54814371107815033353454465288425225481160025550265832
A(209) = 5703006348895251752852103677771268235551084464506754
A(208) = 58751042827573490667622156997950511403561734712007092
A(207) = 5927514882490904992270566534304997602630982466607276
A(206) = 60524664054113422404373574636296722279029344622884008

EXEMPLE 2 Modèle d'ISING 4 x 4 x 4

Le calcul a nécessité environ 4000 secondes de CPU (IBM 3033) .

Le résultat se présente sous la forme d'un polynôme en $z = e^{-2\beta}$,
symétrique ($A(k) = A(144-k)$) . La fonction de partition est obtenue
en multipliant par $e^{144\beta}$.

```

A(144) = 2
A(143) = 0
A(142) = 0
A(141) = 16
A(140) = 48
A(139) = 96
A(138) = 96
A(137) = 528
A(136) = 1464
A(135) = 2704
A(134) = 6096
A(133) = 13824
A(132) = 33876
A(131) = 72048
A(130) = 150576
A(129) = 333440
A(128) = 701346
A(127) = 1489344
A(126) = 3106688
A(125) = 6377184
A(124) = 13148616
A(123) = 26730400
A(122) = 54123712
A(121) = 109673296
A(120) = 216416132
A(119) = 430116288
A(118) = 848463976
A(117) = 1654892768
A(116) = 3253693284
A(115) = 6326771952
A(114) = 12255654288
A(113) = 23639390656
A(112) = 45414967128
A(111) = 86923733024
A(110) = 165488323120
A(109) = 314549304048
A(108) = 594619661888
A(107) = 1118386044256
A(106) = 2095166553096
A(105) = 3902550636944
A(104) = 7227315057096
A(103) = 13301211406800
A(102) = 24313152569224
A(101) = 44113596314400
A(100) = 79397240004648
A( 99) = 141656367344832
A( 98) = 250350153733840
A( 97) = 437926509400224
A( 96) = 757573368141030
A( 95) = 1295017191196384
A( 94) = 2185330242410896
A( 93) = 3637302566490352
A( 92) = 5965011276277392
A( 91) = 9629175326089248
A( 90) = 15285235277991744
A( 89) = 23834967816545760
A( 88) = 36472753269662652
A( 87) = 54712739775665512
A( 86) = 80373008689444744
A( 85) = 115527794494240992
A( 84) = 162302357759610928
A( 83) = 22266927637723968
A( 82) = 298074310503336672
A( 81) = 389023476619032380
A( 80) = 494653551794517996
A( 79) = 612376374176953536
A( 78) = 737696956115935424
A( 77) = 864297317630719944
A( 76) = 934443120875313748
A( 75) = 1039709456273584544
A( 74) = 1171945906178922316
A( 73) = 1224330614879153664
A( 72) = 1242323255348783744

```


Je remercie C.Lecommandeur ,M.Bona ,D.Barge ,A.Daddane et K.Slaoui Hasnaoui pour les contributions qu'ils ont apportées à ce travail dans le cadre de leurs projets de Troisième année d'Ingénieur ENSIMAG et leurs rapports de DEA .

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A.V. AHO, J.E. HOPCROFT, J.D. ULLMANN :
The design and analysis of computer algorithms.
Addison Wesley 1974.
- [2] D. BARGE, M. BONA : Rapport D.E.A., Analyse Numérique,
Université de Grenoble, 1981.
- [3] F. BARAHONA : Application de l'optimisation combinatoire
à certains problèmes de verres de spins : complexité et
simulation.
Thèse Docteur Ingénieur. Université de Grenoble, 1980.
- [4] A. DADDANE, K. SLAOUI HASNAOUI : Rapport de D.E.A.
Mathématiques Appliquées, Université de Grenoble, 1983.
- [5] B. KAUFMAN : Crystal statistic II. Partition function
evaluation by spinor analysis. Phys. Rev., vol. 76, number 8
october 15, 1949 .
- [6] H.A. KRAMERS and G.H. WANNIER :
Statistics of the two-dimensional ferromagnet . Part I
Physical Review 60 252-263, 1941 .
- [7] B. LACOLLE : Algebraic method for the computation of the
partition functions of spin glasses and numerical study
of the distribution of zeros .
Critical phenomena in Physics, Biology, Chemistry and
other fields. Springer series in Synergetics, 1981.
- [8] B. LACOLLE : Méthodes algébriques pour le calcul de
fonctions de partition. Séminaire d'Analyse Numérique
n° 347, Université de Grenoble.

A N N E X E

Programme de calcul d'une fonction de partition pour un modèle à deux dimensions

La partie cruciale du programme est la subroutine "evmodp" qui calcule simultanément la valeur de la fonction de partition en deux points.

- [9] C. LECOMMANDEUR : Rapport de D.E.A.,
Analyse Numérique, 1979-1980.
- [10] I. MORGENSTERN , K.BINDER :
Exact calculations for finite Ising spin glasses lattices .
J.App.Phys. ,Vol. 52 ,No. 3, pt. 2 ,pt. 2 ,p. 1692-6
- [11] I. MORGENSTERN , K.BINDER :
Magnetic correlations in two-dimensional spin glasses .
Phys. Rev. B Vol: 22 , Number 1 , 1980
- [12] S. ONO, Y. KARAKI, M. SUZUKI, C. KAWABATA :
Statistical thermodynamics of finite Ising model. I
Journal of Physical Society of Japan Vol 25, n° 1, 1968 .
- [13] L. ONSAGER : Cristal statistics I. A two dimensional model
with an order-Disorder transition.
Phys. Rev. 65, 117, 1944.
- [14] R.B. PEARSON : The partition function of the Ising Model
on the periodic 4 x 4 x 4 lattice.
- [15] M. SUZUKI, C. KAWABATA, S. ONO, Y. KARARI, M. IKEDA
Statistical thermodynamics of finite Ising. Model II
Journal of the physical Society of Japan, vol 29, n° 4
October 1970.
- [16] B. LACOLLE
Calcul exact de la fonction de partition d'un verre de spin .
Journées de Physique Statistique . PARIS 1984

```

C *****
C PROGRAMME DE CALCUL DE FONCTIONS DE PARTITION DE *
C VERRES DE SPINS EN DIMENSION 2 *
C LA FONCTION DE PARTITION ETANT MISE SOUS FORME *
C POLYNOMIALE ELLE EST RECONSTITUEE PAR INTERPOLATION *
C SUR DES CORPS FINIS Z/PZ , P PREMIER *
C LA PARTIE FONDAMENTALE DU PROGRAMME EST LA *
C SUBROUTINE EVMODP DANS LAQUELLE EST REALISEE UNE *
C OPTIMISATION TRES FINE DES CALCULS , Y COMPRIS LES *
C CALCULS D ADRESSES QUI CONSTITUENT UNE DES PARTIES LES *
C PLUS COUTEUSES DU PROGRAMME *
C *****
      INTEGER HORIZO (20,20),VERTIC (20,20),M,N
      INTEGER DEGRE,DEGP1,DEGS2,I,J,I1,I2,I3,I4,NSITE
      LOGICAL ERREUR
      COMMON /GRILLE/ HORIZO,VERTIC,M,N
      INTEGER P
      COMMON /MODULE/ P
      INTEGER IXP (500),IFP(500),IPP(16,500)
C NOMBRES PREMIERS UTILISES POUR LE CALCUL MODULAIRE
      INTEGER TP(16)
      DATA TP /32693,32687,32653,32587,
1 32579,32573,32569,32563,32561,32497,32491,32479,
2 32467,32381,32377,32371/
C VARIABLES UTILISEES POUR LE CALCUL MODULAIRE
C LES ENTIERS SONT REPRESENTES PAR DES TABLEAUX DE 100 ENTIERS
      INTEGER IQ(16,5,100),IU(16),ID(16)
      INTEGER VERIF1(100),VERIF2(100),DEUX(100),NLONG
      INTEGER IR(100),IA(100),IB(100),ICOE(300,100)
      INTEGER PR,PRP1,IT
C TYPE DES FONCTIONS UTILISEES
      INTEGER SYM,ISUP,IREFON
C LECTURE DES PARAMETRES
      CALL PARAM(N,M,NTAIL,PR,IT)
C CALCUL DU NOMBRE PR DE NOMBRES PREMIERS A UTILISER
      PRP1 = PR + 1
C LECTURE DE LA MATRICE DES LIAISONS
      CALL LECTUR(ERREUR)
      IF (ERREUR) GOTO 9
C CALCUL DU DEGRE DU POLYNOME SIMPLIFIE
      DEGRE = 2*N*M - N - M
      NSITE = N*M
      DEGP1 = DEGRE+1
      DEGS2 = DEGRE/2
C CORRECTION POUR RENDRE DEGS2 PAIR
      DEGS2 = DEGS2 + MOD(DEGS2,2)
C MISE A 1 DES NOMBRES PREMIERS NON UTILISES
      DO 1 IPREM = PRP1,16
          TP(IPREM) = 1
1      CONTINUE
C CALCUL DE CERTAINS COEFFICIENTS POUR EFFECTUER LE CALCUL MODULAIRE
      CALL Q(IT,TP,IQ,NTAIL)
C ITERATION SUR LES DIFFERENTS NOMBRES PREMIERS
      DO 1000 IPREM = 1,PR
          P = TP(IPREM)
C CALCUL DES PARAMETRES DU CALCUL MODULAIRE RELATIF A L ENTIER P
          DO 2 K=1,NTAIL
              IAK(K) = IQ(1,IT,K)
2      CONTINUE
          CALL KONVER (P,IB,NTAIL)

```

```

CALL INMOD(IA,IB,IR,NTAIL)
CALL INMOD(IR,IB,IA,NTAIL)
ID(IPREM) = SYM(IREKON(IR,6),P)
C CALCUL DE LA PREMIERE VALEUR ( VALEUR 1 : 2**NSITE )
IXP(1) = 1
IFP(1) = 1
DO 3 I = 1,NSITE
  IFP(1) = MOD(IFP(1)+2,P)
3 CONTINUE
C ITERATION SUR UN GROUPE DE DEUX VALEURS DE FACON A MINIMISER
C LES CALCULS D ADRESSES
DO 4 I = 2,DEGS2,2
  I1 = 2*I-2
  I2 = 2*I-1
  IXP(I1) = I
  IXP(I2) = I + 1
C CALCUL GROUPE DES VALEURS DU POLYNOME AUX POINT I ET I+1
CALL EVMODP(I,I+1,IFP(I1),IFP(I2))
C CALCUL DES VALEURS DU POLYNOME ( QUI EST SYMETRIQUE )
C AUX POINTS INVERSES ( MODULO P ) DE I ET I+1
I3 = 2*I
I4 = 2*I+1
IXP(I3) = SYM(IXP(I1),P)
IXP(I4) = SYM(IXP(I2),P)
IFP(I3) = IFP(I1)
IFP(I4) = IFP(I2)
DO 40 J = 1,DEGRE
  IFP(I3)=MOD(IFP(I3)+IXP(I3),P)
  IFP(I4)=MOD(IFP(I4)+IXP(I4),P)
40 CONTINUE
4 CONTINUE
C INTERPOLATION POLYNOMIALE MODULO P - CALCUL DES COEFFICIENTS
CALL INTERP (IXP,IFP,IPP,DEGRE,P,IPREM)
1000 CONTINUE
C PREPARATION DE LA VERIFICATION DE LA SOMME DES COEFFICIENTS
C QUI DOIT ETRE EGALE A 2**(N*M)
DO 600 I=1,100
  VERIF1(I) = 0
  VERIF2(I) = 0
600 CONTINUE
  NLONG = INT(FLOAT(N)*FLOAT(M)/3.3219281) + 1
  VERIF2(1) = 1
  DEUX(1) = 2
  DO 601 I = 1 , N
    DO 602 J = 1,M
      CALL MULTIP(VERIF2,DEUX,NLONG)
602 CONTINUE
601 CONTINUE
C RECONSTITUTION DES COEFFICIENTS D APRES LEURS RESTES
C CHARGEMENT DANS IU DES PR RESTES
DO 2000 I=1,DEGP1
  DO 500 IPREM = 1,PR
    IU(IPREM) = IPP(IPREM,I)
500 CONTINUE
C RECONSTITUTION DU COEFFICIENT
CALL IREMPL (IT,TP,IQ,ID,IU,IA,NTAIL)
DO 572 K=1,NTAIL
  IB(K) = IQ(1,IT,K)
572 CONTINUE

```

```

C RECHERCHE DU NOMBRE ENTRE 0 ET LE PRODUIT DES NOMBRES PREMIERS
  CALL INMOD (IA,IB,IR,NTAIL)
  DO 575 K=1,NTAIL
    IR(K) = IB(K)
575   CONTINUE
    CALL ISOMME(VERIF1,IA,NLONG)
C CAS POSITIF
  DO 2001 K=1,NTAIL
    ICOE(I,K) = IA(K)
2001  CONTINUE
2000  CONTINUE
C SORTIE DES COEFFICIENTS DE LA FONCTION DE PARTITION
  CALL SCOFF(DEGRE,NTAIL,ICOE)
C SORTIE DES DONNES DU PROBLEMES
  CALL SPARAM(N,M,NTAIL,PR,IT)
C SORTIE D UNE IMAGE DE LA GRILLE DES LIAISONS
  CALL LIAISO
C VERIFICATION DE LA SOMME DES COEFFICIENTS
  CALL VERIF(VERIF1,VERIF2,NLONG)
  GOTO 3
9     CONTINUE
  WRITE(6,9999)
9999  FORMAT(1X,'MAUVAISES DONNEES')
3     CONTINUE
  STOP
  END

```

```

C *****
C SUBROUTINE D INTERPOLATION ( MODULO P ) D UN POLYNOME DE          *
C DEGRE <DEGRE> . LES VALEURS DES POINTS D INTERPOLATION SONT      *
C DANS IXP , LES VALEURS DU POLYNOME EN CES POINTS SONT           *
C DANS IYP .                                                         *
C LES COEFFICIENTS SONT RANGES DANS IPP(IPREM,*)                   *
C *****
  SUBROUTINE INTERP (IXP,IFP,IPP,DEGRE,P,IPREM)
    INTEGER IXP(500),IFP(500),IPP(16,500)
    INTEGER P,DEGRE,IPREM,Q
    INTEGER SYM
C TABLEAUX INTERMEDIAIRES
  INTEGER IZ(500)
C CONSTANTES LOCALES A LA SUBROUTINE
  INTEGER I,J,K,DEGP1,IAUX
C CALCUL DE CONSTANTES NECESSAIRES
  DEGP1 = DEGRE + 1
C CHARGEMENT DU TABLEAU IZ
  DO 1 I=1,DEGP1
    IZ(I) = IFP(I)
1   CONTINUE
  DO 2 J=2,DEGP1
    DO 3 I=J,DEGP1
      K=DEGP1-I+J
      IZ(K)=MOD(IZ(K)+P-IZ(J-1),P)
      IAUX=MOD(IXP(K)+P-IXP(J-1),P)
      IZ(K)=MOD(IZ(K)*SYM(IAUX,P),P)
3   CONTINUE
2   CONTINUE

```

```

C RECONSTITUTION DU POLYNOME PAR LE SCHEMA DE HORNER
  Q=1
  IPP(IPREM,Q)=IZ(DEGP1)
  DO 4 J=1,DEGRE
    K=DEGP1-J
    IPP(IPREM,Q+1)=IPP(IPREM,Q)
    I=Q

6    CONTINUE
    IF (I.LT.2) GOTO 5
      IPP(IPREM,I)=MOD((P-IXP(K))*IPP(IPREM,I),P)
      IPP(IPREM,I)=MOD(IPP(IPREM,I)+IPP(IPREM,I-1),P)
      I=I-1
    GOTO 6
5    CONTINUE
    IPP(IPREM,1)=MOD((P-IXP(K))*IPP(IPREM,1),P)
    IPP(IPREM,1)=MOD(IPP(IPREM,1)+IZ(K),P)
    Q = Q+1
4    CONTINUE
    RETURN
    END

C *****
C CETTE SUBROUTINE EXECUTE SIMULTANEMENT LE CALCUL ( MODULO P ) *
C DES VALEURS DU POLYNOME AUX POINTS X1 ET X2 ET LES RANGES DANS *
C VALX1 ET VALX2 *
C *****
      SUBROUTINE EVMODP (X1,X2,VALX1,VALX2)
C VARIABLES EN PARAMETRES
      INTEGER X1,X2,VALX1,VALX2
C VARIABLES GLOBALES
      INTEGER HORIZO (20,20),VERTIC (20,20),M,N
      COMMON /GRILLE/ HORIZO,VERTIC,M,N
      INTEGER P
      COMMON /MODULE/ P
C VARIABLES LOCALES
      INTEGER X1PUN,UNMX1,RAPP01,MRAPP1,FACG1,X1P1S2,STOCK
      INTEGER X2PUN,UNMX2,RAPP02,MRAPP2,FACG2,X2P1S2
      INTEGER DV1,DV2,IV1,IV2
      INTEGER DIMBAS,I,J,K,NM1,NM2,DEUXN
      LOGICAL BONSEN,ERREUR
      INTEGER MODIF,MASK00,MASK01,MASK10,MASK11,J1,J2,J3
      INTEGER MASK1,NM3
      INTEGER ORJ1,ORJ2,ORJ3
      INTEGER FINJ1,FINJ2,FINJ3,PAS1,PAS2,PAS3,PAS
      INTEGER FIN1,FIN2,FIN3,RAC1,RAC2
C TABLEAUX DES PUISSANCES DE DEUX D APRES LA POSITION DU BIT 1
      INTEGER POZIT(2),POSIT (20)
      EQUIVALENCE (POZIT(2),POSIT(1))
C TABLEAUX ( ADRESSABLES A PARTIR DE 0 ) DESTINES A RECEVOIR
C LES COORDONNES ( ENTIERES MODULO P ) SUR LA BASE TENSORIELLE
C DE MATRICES
      INTEGER BASZ1 (2),BASE1 (32770)
      EQUIVALENCE (BASZ1(2),BASE1(1))
      INTEGER BASZ2 (2),BASE2 (32770)

```

```

EQUIVALENCE (BASZ?(?),BASE2(1))
C EXTERNES DANS LE MODULE DEC CALCUL MODULAIRE
  INTEGER SYM
C CALCUL DE CONSTANTES NECESSAIRES
  NM3 = N - 3
  DEUXN = 2*N
  NM2 = N-2
  NM1 = N - 1
  DIMBAS = 1
C NOMBRE D ELEMENTS DE LA BASE
  DO 6 K = 1,NM1
    DIMBAS = DIMBAS*2
6    CONTINUE
    DIMBAS = DIMBAS*2 - 1
C MISE A JOUR DU TABLEAU POSIT
  K = 1
  POSIT(1) = K
  DO 7 I = 2,DEUXN
    K = K*2
    POSIT(I) = K
7    CONTINUE
C PRE-CALCUL DES VALEURS NECESSAIRES AU CALCUL MODULAIRE DU PRODUIT
C DES MATRICES
  INV2 = SYM(2,P)
  X1PUN = MOD(X1+1,P)
  X1P1S2 = MOD(X1PUN*INV2,P)
  UNMX1 = MOD(P+1-X1,P)
  X2PUN = MOD(X2+1,P)
  X2P1S2 = MOD(X2PUN*INV2,P)
  UNMX2 = MOD(P+1-X2,P)
  DV1 = MOD(UNMX1*SYM(X1PUN,P),P)
  IV1 = SYM(X1,P)
  DV2 = MOD(UNMX2*SYM(X2PUN,P),P)
  IV2 = SYM(X2,P)
C TOUS LES PRODUITS ETANT MIS SOUS LA FORME FACTEUR*(1+RAPPORT*B)
C OU B SERA UNE MATRICE DE BASE, LES FACTEURS FACG1 ET FACG2
C ACCUMULENTS LES PRODUITS DE FACTEURS AFIN D EVITER DE MULTIPLIER
C TOUS LES ELEMENTS DE LA BASE
C INITIALISATION DU FACTEUR MULTIPLICATIF
  FACG1 = 1
  FACG2 = 1
C INITIALISATION DES BASES ET SENS AFFECTATION
  K = 0
  BASE1(K) = 1
  BASE2(K) = 1
  DO 1 K = 1,DIMBAS
    BASE1(K) = 0
    BASE2(K) = 0
1    CONTINUE
C ITERATION SUR LES M RANGEES
  DO 2 I = 1,M
C ITERATION SUR LES LIAISONS HORIZONTALES
C LE CALCUL DES PRODUITS RELATIFS AUX LIAISONS HORIZONTALES SONT
C FAITS CONFORMEMENT A LA METHODE DONNEE AU CHAPITRE V PARAGRAPHE V.1.1.
C TOUTES LES ADRESSES DES ELEMENTS UTILISES SONT GENEREES A PARTIR
C D UNE ADRESSE DE BASE ET D UN CERTAIN NOMBRE DE MASQUES

C CAS DE LA PREMIERE LIAISON
C MISE A JOUR DES FACTEURS GLOBAUX

```



```

FACG1 = MOD(FACG1*X1P1S2,P)
RAPP01 = DV1
RAPP02 = DV2
FACG2 = MOD(FACG2*X2P1S2,P)
IF (HORIZO(I,1).EQ.1) GOTO 20
  RAPP01 = P - RAPP01
  RAPP02 = P - RAPP02
20  CONTINUE
  PAS2 = POSIT(2)
  FINJ2 = POSIT(N) - POSIT(2)
  MODIF = POSIT(1)
C DEBUT DE L ITERATION
  J2 = 0
211  CONTINUE
  ORJ2 = J2 + MODIF

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J2 ORJ2

  STOCK=MOD(BASE1(ORJ2)+BASE1(J2)*RAPP01,P)
  BASE1(J2)=MOD(BASE1(J2)+BASE1(ORJ2)*RAPP01,P)
  BASE1(ORJ2)=STOCK
  STOCK=MOD(BASE2(ORJ2)+BASE2(J2)*RAPP02,P)
  BASE2(J2)=MOD(BASE2(J2)+BASE2(ORJ2)*RAPP02,P)
  BASE2(ORJ2)=STOCK

f
C SECONDE BOUCLE
  J2 = J2 + PAS2
  IF (J2.LE.FINJ2) GOTO 211
C CAS D UNE LIAISON INTERMEDIAIRE (CAS N >= 4)
  J = 2
  IF (J.GT.NM2) GOTO 27
270  CONTINUE
C MISE A JOUR DES FACTEURS GLOBAUX
  FACG1 = MOD(FACG1*X1P1S2,P)
  RAPP01 = DV1
  FACG2 = MOD(FACG2*X2P1S2,P)
  RAPP02 = DV2
  IF (HORIZO(I,J).EQ.1) GOTO 2100
  RAPP01 = P - RAPP01
  RAPP02 = P - RAPP02
2100  CONTINUE
  PAS2 = 1
  FINJ2 = POSIT(J) - 1
  PAS3 = POSIT(J+1)
  FIN3 = POSIT(N) - POSIT(J+1)
  MODIF = POSIT(J)
C DEBUT DE L ITERATION
  J2 = 0
221  CONTINUE
  J3 = J2
  FINJ3 = J2 + FIN3
2211  CONTINUE
  ORJ3 = J3+MODIF

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J3 ORJ3

  STOCK=MOD(BASE1(ORJ3)+BASE1(J3)*RAPP01,P)
  BASE1(J3)=MOD(BASE1(J3)+BASE1(ORJ3)*RAPP01,P)
  BASE1(ORJ3)=STOCK

```

```

STOCK=MOD(BASE2(ORJ3)+BASE2(J3)*RAPP02,P)
BASE2(J3)=MOD(BASE2(J3)+BASE2(ORJ3)*RAPP02,P)
BASE2(ORJ3)=STOCK

```

C FIN BOUCLE INTERNE

```

J3 = J3 + PAS3
IF (J3.LE.FINJ3) GOTO 2211

```

C FIN BOUCLE EXTERNE

```

J2 = J2 + PAS2
IF (J2.LE.FINJ2) GOTO 221
J = J + 1
IF (J.LE.NM?) GOTO 270

```

27 CONTINUE

C CAS DE LA DERNIERE LIAISON (CAS N >= 3)

```

IF (N.LT.3) GOTO 23
FACG1 = MOD(FACG1*X1P1S2,P)
RAPP01 = DV1
FACG2 = MOD(FACG2*X2P1S2,P)
RAPP02 = DV2
IF (HORIZO(I,N-1).EQ.1) GOTO 230
RAPP01 = P - RAPP01
RAPP02 = P - RAPP02

```

230 CONTINUE

```

PAS2 = 1
FINJ2 = POSIT(N-1) - 1
MODIF = POSIT(N-1)
J2 = 0

```

231 CONTINUE

```

ORJ2 = J2 + MODIF

```

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J2 ORJ2

```

STOCK = MOD(BASE1(ORJ2) + BASE1(J2)*RAPP01,P)
BASE1(J2) = MOD(BASE1(J2) + BASE1(ORJ2)*RAPP01,P)
BASE1(ORJ2)=STOCK
STOCK=MOD(BASE2(ORJ2)+BASE2(J2)*RAPP02,P)
BASE2(J2)=MOD(BASE2(J2)+BASE2(ORJ2)*RAPP02,P)
BASE2(ORJ2)=STOCK

```

C FIN DEUXIEME BOUCLE

```

J2 = J2+PAS2
IF (J2.LE.FINJ2) GOTO 231

```

23 CONTINUE

```

IF (I.EQ.M) GOTO 50

```

C TRAITEMENT DES LIAISONS VERTICALES

C LE CALCUL DES PRODUITS RELATIFS AUX LIAISONS VERTICALES SE
C FAIT CONFORMEMENT A LA METHODE EXPOSEE AU CHAPITRE V PARAGRAPHE V.1.1.

C PREMIERE LIAISON

C CMISE A JOUR DES FACTEURS GLOBAUX ET CALCUL DU RAPPORT

```

IF (VERTIC(I,1).NE.1) GOTO 30

```

```

RAPP01 = X1

```

```

RAPP02 = X2

```

```

GOTO 31

```

30 FACG1 = MOD(FACG1*X1,P)

```

RAPP01 = IV1

```

```

FACG2 = MOD(FACG2*X2,P)

```

```

      RAPP02 = IV2
31  CONTINUE
      MRAPP1 = MOD(P+1-RAPP01,P)
      RAPP01 = MOD(1+RAPP01,P)
      MRAPP2 = MOD(P+1-RAPP02,P)
      RAPP02 = MOD(1+RAPP02,P)
      J1 = 0
      FINJ1 = POSIT(N) - 1
      PAS1 = POSIT(2)
      MASK1 = POSIT(1)
25  CONTINUE

C SIGNES NON MODIFIEES

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J1 J1+MASK1

      BASE1(J1) = MOD(BASE1(J1)*RAPP01,P)
      BASE2(J1) = MOD(BASE2(J1)*RAPP02,P)
C SIGNES INVERSES
      BASE1(J1+MASK1) = MOD(BASE1(J1+MASK1)*MRAPP1,P)
      BASE2(J1+MASK1) = MOD(BASE2(J1+MASK1)*MRAPP2,P)

      J1 = J1 + PAS1
      IF (J1.LE.FINJ1) GOTO 25

C CAS D UNE LIAISON INTERMEDIAIRE ( N>= 5)
      J = 2
      IF (J.GT.NM2) GOTO 21
210 CONTINUE
C MISE A JOUR DES FACTEURS GLOABUX ET CALCUL DES RAPPORTS
      IF (VERTIC(I,J).NE.1) GOTO 271
      RAPP01 = X1
      RAPP02 = X2

      GOTO 272
271  FACG1 = MOD(FACG1*X1,P)
      FACG2 = MOD(FACG2*X2,P)
      RAPP01 = IV1
      RAPP02 = IV2
272  CONTINUE
      MRAPP1 = MOD(1+P-RAPP01,P)
      RAPP01 = MOD(1+RAPP01,P)
      MRAPP2 = MOD(1+P-RAPP02,P)
      RAPP02 = MOD(1+RAPP02,P)
      J1 = 0
      FINJ1 = POSIT(J-1) - 1
      PAS1 = 1
      PAS2 = POSIT(J+1)
      FIN2 = POSIT(N) - POSIT(J+1)
      MASK01 = POSIT(J-1)
      MASK10 = POSIT(J)
      MASK11 = MASK01 + MASK10
274  CONTINUE
      J2 = J1
      FINJ2 = FIN2 + J1
273  CONTINUE
C SENS NON INVERSE

```

```

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J2 J2+MASK11 J2+MASK01 J2+MASK10
    BASE1(J2) = MOD(BASE1(J2)*RAPP01,P)
    BASE2(J2) = MOD(BASE2(J2)*RAPP02,P)
    BASE1(J2+MASK11) = MOD(BASE1(J2+MASK11)*RAPP01,P)
    BASE2(J2+MASK11) = MOD(BASE2(J2+MASK11)*RAPP02,P)
C SENS INVERSE
    BASE1(J2+MASK01) = MOD(BASE1(J2+MASK01)*MRAPP1,P)
    BASE2(J2+MASK01) = MOD(BASE2(J2+MASK01)*MRAPP2,P)
    BASE1(J2+MASK10) = MOD(BASE1(J2+MASK10)*MRAPP1,P)
    BASE2(J2+MASK10) = MOD(BASE2(J2+MASK10)*MRAPP2,P)

C FIN DEUXIEME BOUCLE
    J2 = J2 + PAS2
    IF (J2.LE.FINJ2) GOTO 273
C FIN PREMIERE BOUCLE
    J1 = J1 + PAS1
    IF (J1.LE.FINJ1) GOTO 274
    J = J + 1
    IF (J.LE.NM2) GOTO 210
21    CONTINUE

C AVANT DERNIER LIAISON (N >= 3)
    IF (N.LT.3) GOTO 28
C MISE A JOUR DES FACTEURS GLOBAUX ET CALCUL DES RAPPORTS
    IF (VERTIC(I,N-1).NE.1) GOTO 281
        RAPP01 = X1
        RAPP02 = X2
        GOTO 282
281    CONTINUE
        FACG1 = MOD(FACG1*X1,P)
        FACG2 = MOD(FACG2*X2,P)
        RAPP01 = IV1
        RAPP02 = IV2
282    CONTINUE
        MRAPP1 = MOD(1+P-RAPP01,P)
        MRAPP2 = MOD(1+P-RAPP02,P)
        RAPP01 = MOD(RAPP01+1,P)
        RAPP02 = MOD(1+RAPP02,P)
        J1 = 0
        FINJ1 = POSIT(N-2) - 1
        MASK01 = POSIT(N-2)
        MASK10 = POSIT(N-1)
        MASK11 = MASK01 + MASK10
280    CONTINUE
C SANS INVERSION

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J1 J1+MASK11 J1+MASK01 J1+MASK10
    BASE1(J1) = MOD(BASE1(J1)*RAPP01,P)
    BASE1(J1+MASK11) = MOD(BASE1(J1+MASK11)*RAPP01,P)
    BASE2(J1+MASK11) = MOD(BASE2(J1+MASK11)*RAPP02,P)
    BASE2(J1) = MOD(BASE2(J1)*RAPP02,P)
C INVERSION DES SIGNES
    BASE1(J1+MASK01) = MOD(BASE1(J1+MASK01)*MRAPP1,P)
    BASE1(J1+MASK10) = MOD(BASE1(J1+MASK10)*MRAPP1,P)
    BASE2(J1+MASK01) = MOD(BASE2(J1+MASK01)*MRAPP2,P)
    BASE2(J1+MASK10) = MOD(BASE2(J1+MASK10)*MRAPP2,P)

```

```

C FIN DE LA BOUCLE
      J1 = J1 + 1
      IF (J1.LE.FINJ1) GOTO 280
28    CONTINUE
C DERNIERE LIAISON
      J1 = 0
      FINJ1 = POSIT(N-1) - 1
      MASK1 = POSIT(N-1)
C MISE A JOUR DES FACTEURS GLOBAUX ET CALCUL DES RAPPORTS
      IF (VERTIC(I,N).NE.1) GOTO 291
      RAPP01 = X1
      RAPP02 = X2
      GOTO 292
291   CONTINUE
      FACG1 = MOD(FACG1*X1,P)
      FACG2 = MOD(FACG2*X2,P)
      RAPP01 = IV1
      RAPP02 = IV2
292   CONTINUE
      MRAPP1 = MOD(1+P-RAPP01,P)
      MRAPP2 = MOD(1+P-RAPP02,P)
      RAPP01 = MOD(1+RAPP01,P)
      RAPP02 = MOD(1+RAPP02,P)
290   CONTINUE
C SENS NON INVERSE

C OPERATION SUR LES ELEMENTS DE LA BASE : J1  J1+MASK1

      BASE1(J1) = MOD(BASE1(J1)*RAPP01,P)
      BASE2(J1) = MOD(BASE2(J1)*RAPP02,P)

C SENS INVERSE
      BASE1(J1+MASK1) = MOD(BASE1(J1+MASK1)*MRAPP1,P)
      BASE2(J1+MASK1) = MOD(BASE2(J1+MASK1)*MRAPP2,P)
C FIN DE LA BOUCLE
      J1 = J1 + 1
      IF (J1.LE.FINJ1) GOTO 290
50   CONTINUE
2    CONTINUE
C RECUPERATION DU RESULTAT
C RECUPERATION DES COMPOSANTES SUR LA MATRICE IDENTITE ET
C MULTIPLICATION PAR LES FACTEURS GLOBAUX
      K = 0
      RAPP01 = MOD(FACG1*BASE1(K),P)
      RAPP02 = MOD(FACG2*BASE2(K),P)
      DO 5 I=1,N
          RAPP01 =MOD(RAPP01*2,P)
          RAPP02 =MOD(RAPP02*2,P)
5    CONTINUE
      VALX1 = RAPP01
      VALX2 = RAPP02
      RETURN
END

```

```

C *****
C CETTE FONCTION CALCUL L INVERSE MODULO P DE INVERS
C *****
      INTEGER FUNCTION SYM (INVERS,P)
      INTEGER P
      IP = P-1
      J = P
      L = 0
      K = INVERS
      I1 = 0
      I2 = 1
      M = 1
2     IF (K.EQ.1) GOTO 3
      I = J/K
      L = J - I*K
      M = MOD(I1-I*I2,P)
      I1 = I2
      I2 = M
      J = K
      K = L
      GOTO 2
3     CONTINUE
      SYM = MOD(M+P,P)
      RETURN
      END

C *****
C CETTE SUBROUTINE COMPARE LA VALEUR DE LA SOMME DES
C COEFFICIENTS A LEUR SOMME THEORIQUE
C *****
      SUBROUTINE VERIF (VERIF1,VERIF2,NLONG)
      INTEGER VERIF1(100),VERIF2(100),NLONG
      DO 1 NI = 1,NLONG
          J = NLONG + 1 - NI
          IF ((VERIF1(J)+VERIF2(J)).NE.0) GOTO 2
1     CONTINUE
      NI = NLONG
2     WRITE(6,9900) (VERIF1(NLONG+1-II),II=NI,NLONG)
      WRITE(6,9900) (VERIF2(NLONG+1-II),II=NI,NLONG)
9900  FORMAT(1X,100I1)
      IF (ISUP(VERIF1,VERIF2,NLONG).EQ.0) GOTO 603
      WRITE(6,9989)
9989  FORMAT(1X,'ERREUR')
      GOTO 604
603  WRITE(6,9988)
9988  FORMAT(1X,'SOMME CORRECTE')
604  CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

C *****
C CETTE SUBROUTINE EST DESTINEE A LA SORTIE DES COEFFICIENTS *
C DE LA FONCTION DE PARTITION *
C DEGRE EST LE DEGRE DU POLYNOME REPRESENTANT LA FONCTION *
C DE PARTITION *
C NTAIL EST LA LONGUEUR NECESSAIRE A LA REPRESENTATION DES *
C COEFFICIENTS *
C ICOE CONTIENT LES COEFFICIENTS *
C *****
      SUBROUTINE SCOE (DEGRE,NTAIL,ICOE)
      INTEGER DEGRE,NTAIL,ICOE(300,100)
      INTEGER DEGP1,IECR(100),IA(100)
      DEGP1 = DEGRE + 1
      DO 3000 I=1,DEGP1
        DO 3001 K=1,NTAIL
          IA(K) = ICOE(I,K)
3001 CONTINUE
          IJ = DEGRE-2*I+2
C CAS POSITIF
580 DO 2244 NI=1,NTAIL
      J = NTAIL+1-NI
      IF (IA(J).NE.0) GOTO 3377
2244 CONTINUE
      NI = NTAIL
3377 CONTINUE
      DO 3366 II=NI,NTAIL
        J = NTAIL + 1 - II
        IECR(II) = IA(J)
3366 CONTINUE
      WRITE(6,800) IJ,(IECR(II),II=NI,NTAIL)
800 FORMAT(1X,'LE COEFFICIENT DU TERME DE DEGRE ',I4,
1' VAUT: ',50I1)
3000 CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

C *****
C SUBROUTINE DE LECTURE DES PARAMETRES *
C N = NOMBRE DE RANGEES HORIZONTALES *
C M = NOMBRE DE RANGEES VERTICALES *
C NTAIL = LNOMBRE DE CHIFFRES POUR REPRESENTER LES ENTIERS *
C PR = NOMBRE DE NOMBRES PREMIERS *
C IT ( PR <= 2*(IT-1) ) *
C *****
      SUBROUTINE PARAM (N,M,NTAIL,PR,IT)
      INTEGER N,M,NTAIL,PR,IT
      READ(5,10) N,M,NTAIL
10 FORMAT(1X,3I3)
      READ(5,11) PR,IT
11 FORMAT(1X,2I3)
      RETURN
      END

```

```

C *****
C SUBROUTINE DE SORTIES DES PARAMETRES
C MEMES SIGNIFICATIONS QUE POUR SPARAM
C *****
      SUBROUTINE SPARAM (N,M,NTAIL,PR,IT)
      INTEGER N,M,NTAIL,PR,IT
      WRITE(6,1) N,M,NTAIL,PR,IT
1     FORMAT(1X,'N=',I3,'M=',I3,'NTAIL=',I3,'PR=',I3,'IT=',I3)
      RETURN
      END

C *****
C SUBROUTINE DE LECTURE DES VALEURS DES LIAISONS
C 0 CORRESPOND A UNE LIAISON POSITIVE
C 1 CORRESPOND A UNE LIAISON NEGATIVE
C *****
      SUBROUTINE LECTUR(ERREUR)
C VARIABLES GLOBALES
      INTEGER HORIZO (20,20),VERTIC(20,20),M,N
      COMMON /GRILLE/ HORIZO,VERTIC,M,N
      LOGICAL ERREUR
      INTEGER NM1
      NM1 = N-1
      DO 1 I=1,M
          READ(5,10) (HORIZO(I,J),J=1,NM1)
10     FORMAT(20(1X,I1))
          IF (I.EQ.M) GOTO 3
          READ(5,11) (VERTIC(I,J),J=1,N)
11     FORMAT(20(I1,1X))
      8     CONTINUE
      1     CONTINUE
      ERREUR = .FALSE.
      DO 2 I=1,M
          DO 5 J=1,NM1
              HORIZO(I,J) = 1 - 2*HORIZO(I,J)
              ERREUR = ERREUR.OR.(IABS(HORIZO(I,J)).NE.1)
5         CONTINUE
          IF (I.EQ.M) GOTO 6
          DO 7 J=1,N
              VERTIC(I,J) = 1 - 2*VERTIC(I,J)
              ERREUR = ERREUR.OR.(IABS(VERTIC(I,J)).NE.1)
7         CONTINUE
6         CONTINUE
2         CONTINUE
      RETURN
      END

```



```

C *****
C SORTIE LISTING D UNE IMAGE DES VALEURS DES
C *****
C LIAISONS : 0 POSITIVE ET 1 NEGATIVE
C *****
SUBROUTINE LIAISO
C VARIABLES GLOBALES
INTEGER HORIZO (20,20),VERTIC(20,20),M,N
COMMON /GRILLE/ HORIZO,VERTIC,M,N
INTEGER SHOR(20,20),SVER(20,20)
NM1 = N-1
WRITE(6,12)
12 FORMAT(1X,'ARETE FRUSTREE : 1 , NON FRUSTREE : 0',/)
DO 2 I=1,M
DO 3 J=1,NM1
SHOR(I,J) = (1-HORIZO(I,J))/2
3 CONTINUE
IF (I.EQ.M) GOTO 4
DO 5 J=1,N
SVER(I,J) = (1-VERTIC(I,J))/2
5 CONTINUE
4 CONTINUE
2 CONTINUE
DO 1 I=1,M
WRITE(6,10) (SHOR(I,J),J=1,NM1)
10 FORMAT(1X,20(' ',I1))
IF (I.EQ.M) GOTO 7
WRITE(6,11) (SVER(I,J),J=1,N)
7 CONTINUE
11 FORMAT(1X,20(I1,1X))
1 CONTINUE
RETURN
END

```

```

C *****
C LES SUBROUTINES DE MANIPULATIONS DES ENTIERS LONGS ONT ETE
C ECRITES A PARTIR D UN TRAVAIL INITIAL REALISE PAR
C D.BARGE ET M.BONA DANS UN RAPPORT DE DEA.
C ELLES NE FIGURENT PAS DANS CETTE REDACTION
C CES SUBROUTINES SONT KONVER,,Q,ISOMME,MULTIP,IEMPL
C INMOD,ISUB,ISUP
C *****

```

CHAPITRE VI

CALCUL FORMEL ET ANALYSE SPINORIELLE

INTRODUCTION

L'article "A two-dimensional Model with an Order-Disorder Transition" dans lequel L. Onsager donne pour la première fois la solution exacte du modèle d'Ising ([10]), fut suivi d'une deuxième partie intitulée "Partition function Evaluated by spinor Analysis" par B. Kaufman ([7]). Dans un langage algébrique de représentation de groupes, l'auteur y développe la solution exacte du modèle d'Ising.

Cette approche algébrique a été délaissée par la suite au profit de solutions combinatoires. Ces solutions, si elles demandent moins de notions algébriques, ne sont finalement pas plus simples à manipuler. D'un point de vue "méthodes numériques" les solutions combinatoires prouvent l'existence d'algorithmes polynomiaux pour le calcul de fonctions de partition de modèles à deux dimensions. De plus elles ont été utilisées pour trouver sous formes intégrales des solutions exactes de l'énergie de certains modèles plans de verre de spins réguliers.

Dans ce chapitre je reprends d'un point de vue très constructif les deux objectifs cités ci-dessus en utilisant le formalisme de l'analyse spinorielle.

En ce qui concerne la fonction de partition je montre comment l'exprimer en fonctions de déterminants très faciles à construire au vu du réseau initial. La mise en oeuvre effective se ferait en utilisant les techniques du calcul modulaire présentées dans le chapitre V.

Le calcul effectif d'énergies est lui traité jusqu'à la réalisation complète. La technique spinorielle paraît particulièrement bien adaptée car elle donne les noyaux des intégrales sous forme de déterminants plus compacts que les méthodes combinatoires. De plus l'originalité dans cette

partie est l'utilisation du système de calcul formel REDUCE pour l'évaluation formelle des déterminants. Après avoir retrouvé des résultats classiques des expériences inédites sont présentées.

En ce qui concerne la partie algébrique, je remercie J. Helmstetter pour une présentation particulièrement claire des outils algébriques utilisés.

I - LES PROBLÈMES TRAITÉS

En reprenant les notations du chapitre V paragraphe III.2 (les n quantités $\beta_k^{\circ r}$, $\beta_k^{\vee r}$ sont notées pour simplifier $\beta_k^{\circ r}$, $\beta_k^{\vee r}$) nous considérons :

$$Z = \text{trace} (A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m B_m)$$

avec

$$A_k = \prod_{r=1}^n (\text{ch } \beta_k^{\circ r} \mathbb{1} + \text{sh } \beta_k^{\circ r} S_r S_{r+1})$$

$$B_k = \prod_{r=1}^n (\exp(\beta_k^{\vee r}) \mathbb{1} + \exp(-\beta_k^{\vee r}) C_r) \quad (*)$$

$$k = 1, 2, \dots, m$$

et

$$S_r = \begin{matrix} 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & S & 0 & \dots & 0 & 1 \end{matrix}$$

$$C_r = \begin{matrix} 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & C & 0 & \dots & 0 & 1 \end{matrix}$$

$$r = 1, 2, \dots, n \quad \begin{matrix} \uparrow \\ r^{\text{ème}} \text{ terme} \end{matrix} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ n^{\text{ème}} \text{ terme} \end{matrix}$$

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

I.1 - PREMIER PROBLÈME : LE CALCUL DE LA FONCTION DE PARTITION

Le premier problème consiste à calculer l'expression formelle de Z en la variable $e^{-\beta}$, les $\beta_k^{\circ r}$ et $\beta_k^{\vee r}$ prenant les valeurs $\pm\beta$. Nous montrerons comment obtenir des algorithmes polynomiaux au moyen de l'analyse spinorielle.

II.2 - DEUXIÈME PROBLÈME : CALCUL FORMEL DE L'ÉNERGIE

Reprenons les notations ci-dessus en précisant maintenant que les matrices A_k et B_k dépendent de n , le nombre de sites sur une rangée horizontale. Pour cela notons-les $A_k^{(n)}$ et $B_k^{(n)}$ et posons :

$$Z_{m,n}(\beta) = \text{Trace} (A_1^{(n)} B_1^{(n)} A_2^{(n)} B_2^{(n)} \dots A_m^{(n)} B_m^{(n)})$$

(*) les produits sont commutatifs

$Z_{m,n}$ est effectivement une fonction de β car les β_k^r et β_k^r figurant dans les $A_k^{(n)}$ et $B_k^{(n)}$ ont pour valeur $\pm\beta$. (on ne note pas $A_k^{(n)}(\beta)$... pour ne pas surcharger les notations).

Le deuxième problème consiste à expliciter la limite :

$$\lim_{m,n \rightarrow +\infty} \frac{1}{mn} \log Z_{m,n}(\beta) = f(\beta)$$

et nous appellerons f fonction d'énergie. La convergence de m et n vers l'infini doit évidemment vérifier certaines conditions (voir Chapitre I).

Nous montrerons que si le réseau possède une double périodicité en lignes horizontales et colonnes verticales $f(\beta)$, peut se mettre sous une forme intégrale dont le noyau se calcule à l'aide de déterminants. Les déterminants se déduisent du "motif" que l'on répète périodiquement. L'analyse spinorielle donne une forme particulièrement compacte de ces déterminants ce qui permet une mise en oeuvre du procédé utilisant le système de calcul formel REDUCE. De nombreux résultats, certains connus, d'autres inédits sont présentés.

II - LA FORMULATION SPINORIELLE

II.1 - TRANSFORMATION DU PROBLEME

II.1.1. - Notations

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$S_r = 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1 \ 0 \ S \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

$$C_r = 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1 \ 0 \ C \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

$$M_{2r-1} = C \ 0 \ C \ 0 \ \dots \ 0 \ C \ 0 \ S \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

$$M_{2r} = C \ 0 \ C \ 0 \ \dots \ 0 \ C \ 0 \ S \ C \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

\uparrow $r^{\text{ème}}$
 \uparrow $n^{\text{ème}}$

$$\Omega = \begin{pmatrix} C & \emptyset & C & \emptyset & \dots & \emptyset & C \\ (= & M_1 M_2 \dots M_{2n}) \end{pmatrix}$$

Nous avons :

$$(M_j)^2 = (-1)^{j-1} \mathbb{1} \quad M_j M_k = -M_k M_j \quad j \neq k$$

$$S_r S_{r+1} = M_{2r} M_{2r+1} \quad 1 \leq r < n$$

$$S_1 S_n = M_1 M_{2n} \Omega$$

$$C_r = M_{2r-1} M_{2r} \quad 1 \leq r \leq n$$

II.1.2 - Propriété

$$A_k = \left(\prod_{r=1}^{n-1} \exp(\beta_k^r M_{2r} M_{2r+1}) \right) \exp(\beta_k^n M_1 M_{2n} \Omega)$$

$$B_k = \prod_{r=1}^n \alpha_{k,r} \exp(\gamma_k^r M_{2r-1} M_{2r})$$

k=1, ..., m

avec

$$\alpha_{k,r}^2 = 2 \operatorname{sh} 2\beta_k^r$$

$$\operatorname{th} \gamma_k^r = e^{-2\beta_k^r}$$

r=1, ..., n

Démonstration

Il faut remarquer que si H est une matrice unipotente (H² = I) alors :

$$\exp(\delta H) = \operatorname{ch} \delta \mathbb{1} + \operatorname{sh} \delta H \quad \delta \in \mathbb{C}$$

Il est facile de vérifier que toutes les matrices S_rS_{r+1}, (S₁S_n), C_r sont unipotentes.

D'autre part il faut écrire les matrices B_k sous la forme :

$$B_k = \prod_{r=1}^n \alpha_{k,r} (\operatorname{ch} \gamma_{k,r} \mathbb{1} + \operatorname{sh} \gamma_{k,r} C_r)$$

en posant :

$$\alpha_{k,r} \operatorname{ch} \gamma_{k,r} = \exp(\beta_k^r)$$

$$\alpha_{k,r} \operatorname{sh} \gamma_{k,r} = \exp(-\beta_k^r)$$

II.1.3 - Propriété

Posons $\epsilon^\pm = \{x \in \mathbb{C}^{2n} : \Omega x = \pm x\}$

Les ensembles ϵ^+ et ϵ^- sont stables par A_k et B_k et l'action de A_k sur ϵ^\pm est celle de

$$\left(\prod_{r=1}^{n-1} \exp(\beta_k^r M_{2r} M_{2r+1}) \right) \exp(\pm \beta_k^r M_1 M_{2m})$$

La démonstration est triviale.

II.2 - GROUPE SPINORIEL ET $SO(\mathcal{A})$ [2] [4]II.2.1 - Définition

Soient $M_j \in \mathcal{M}_{2^n, 2^n}(\mathbb{C})$ $j = 1, 2, \dots, 2n$

$$\text{vérifiant } M_j = (-1)^{j-1} \mathbb{1}$$

$$M_j M_i = -M_i M_j \quad i \neq j$$

Soit $\mathcal{A} = \bigoplus_{j=1}^{2n} \mathbb{C} M_j$ $j = 1, 2, \dots, 2n$

On peut définir une forme bilinéaire symétrique sur $\mathcal{A} (\simeq \mathbb{C}^{2n})$ par :

$$2B(a, b) \mathbb{1} = ab + ba \quad a, b \in \mathcal{A}$$

$SO(\mathcal{A})$ sera le groupe orthogonal, pour la forme bilinéaire B , dont les éléments auront pour déterminant $+1$.

Considérons : $C^2(\mathcal{A}) = \bigoplus_{1 \leq j < k \leq 2n} \mathbb{C} M_j M_k$

Le *groupe spinoriel* $\text{Spin}(\mathcal{A})$ est le groupe engendré par les $\exp(g)$ où $g \in C^2(\mathcal{A})$.

On peut considérer l'application de $\text{Spin}(\mathcal{A})$ dans $SO(\mathcal{A})$ schématisée par :

$$G \in \text{Spin}(\mathcal{A}) \rightarrow (a \xrightarrow{\tilde{G}} G a G^{-1})$$

II.2.2 - Exemple

Considérons $G = \exp(\alpha M_j M_{j+1})$ $\alpha \in \mathbb{C}$

On a :

$$\exp(\alpha M_j M_{j+1}) = \operatorname{ch} \alpha \mathbf{1} + \operatorname{sh} \alpha M_j M_{j+1}$$

$$\exp(\alpha M_j M_{j+1}) M_K \exp(-\alpha M_j M_{j+1}) = M_K \quad K \neq j, j+1$$

$$\exp(\alpha M_j M_{j+1}) M_j \exp(-\alpha M_j M_{j+1}) = \operatorname{ch} 2\alpha M_j + (-1)^j \operatorname{sh} 2\alpha M_{j+1}$$

$$\exp(\alpha M_j M_{j+1}) M_{j+1} \exp(-\alpha M_j M_{j+1}) = \operatorname{ch} 2\alpha M_{j+1} + (-1)^j \operatorname{sh} 2\alpha M_j$$

Et l'élément de $SO(\mathcal{U}_6)$ correspondant peut se représenter par la matrice

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} & M_1 & M_j & M_{j+1} \\ M_1 & \left(\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \operatorname{ch} 2\alpha & (-1)^j \operatorname{sh} 2\alpha \\ & & (-1)^j \operatorname{sh} 2\alpha & \operatorname{ch} 2\alpha \\ & & & \ddots \\ & & & & 1 \end{array} \right) & & \\ M_j & & & & & \\ M_{j+1} & & & & & \end{array} \end{array}$$

II.2.3 - Théorème sur le groupe spinoriel

Soit $\mathcal{U} = \bigoplus \mathbb{C} M_j$ avec les notations de II.2.1

Posons : $\Omega = M_1 M_2 \dots M_{2n}$

et

$$\varepsilon^\pm = \{x \in \mathbb{C}^{2n} : \Omega x = \pm x\}$$

Soit G appartenant à $\operatorname{Spin}(\mathcal{U})$ et l'élément \tilde{G} de $SO(\mathcal{U})$ correspondant.

\tilde{G} possède des valeurs propres :

$$(\lambda_1, \lambda_1^{-1}, \lambda_2, \lambda_2^{-1}, \dots, \lambda_n, \lambda_n^{-1})$$

On peut trouver des racines carrées $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}$ telles que les valeurs propres de (la matrice) G soient les 2^n nombres :

$$\prod_{p \notin P} \sqrt{\lambda_p} \quad \prod_{p \in P} \frac{1}{\sqrt{\lambda_p}}$$

où P désigne une partie de $\{1, 2, \dots, n\}$.

On peut construire une base orthonormée neutre $(N_1, N_2, \dots, N_{2m})$ de \mathcal{K} ($N_r^2 = (-1)^{r-1}$ et $N_r N_q = -N_q N_r$ $q \neq r$), telle que :

$$\Omega_N = N_1 N_2 \dots N_{2n} = \pm \Omega$$

$$N_{2p-1} N_{2p} \in \Theta \ker (\tilde{G} - \lambda_p I)^{2n}$$

$$N_{2p-1}^+ N_{2p} \in \Theta \ker (\tilde{G} - \lambda_p^{-1} I)^{2n}$$

Si on pose $\epsilon_N^\pm = \{x : \Omega_N x = \pm x\}$
(en fait $\epsilon_N^\pm = \epsilon^\pm$ ou $\epsilon_N^\pm = \epsilon^\mp$ suivant que $\Omega_N = \pm \Omega$), alors les valeurs propres de G dans ϵ_N^+ (resp. ϵ_N^-) correspondent aux parties P de cardinal pair (resp. impair).

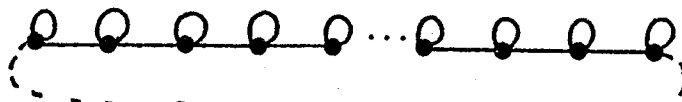
Remarque sur le théorème

On pourra trouver une démonstration du théorème (ou d'une forme voisine) dans ([2] [4] [6]); un schéma de démonstration dû à J. Helmstetter* est donné en annexe.

Dans les exemples pratiques la construction de la base N_i n'est pas toujours explicite. Dans certains cas on cherchera les informations nécessaires par des arguments de continuité. Dans d'autres cas (par exemple dans le calcul formel d'énergies limites au paragraphe IV), on montrera comment on peut se passer de cette information.

II.2.4 - Quelques exemples simples

Considérons une chaîne périodique de m spins



chaque spin étant de plus joint à lui-même : c'est le cas $n = 1$ avec les

* Laboratoire de Mathématiques Pures de Grenoble.

notations du paragraphe I.

On pose $M_1 = S$ $M_2 = SC$ $\Omega = C$

La matrice A_k est : $\exp(\beta M_1 M_2 \Omega)$

B_k est : $\alpha \exp(\gamma M_1 M_2)$

avec

$$\text{th } \gamma = e^{-2\beta}$$

$$\alpha^2 = 2 \text{ sh } 2\beta$$

Sur ϵ^+ l'action de $AB = A_k B_k$ est celle de :

$$\alpha \exp(\beta + \gamma) M_1 M_2$$

à laquelle correspond la "rotation" de $SO(\mathcal{U})$:

$$\begin{pmatrix} \text{ch } 2(\beta + \gamma), & -\text{sh } 2(\beta + \gamma) \\ -\text{sh } 2(\beta + \gamma), & +\text{ch } 2(\beta + \gamma) \end{pmatrix}$$

De valeurs propres $e^{\pm 2(\beta + \gamma)}$

La valeur propre associée à la restriction de $\exp(\beta M_1 M_2 \Omega + \gamma M_1 M_2)$ est donc à choisir dans :

$$e^{\pm(\beta + \gamma)}$$

Essayons d'établir le signe par continuité en prenant $\gamma = 0$ et en prenant dans ϵ^+ le vecteur $e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \exp(\beta M_1 M_2 \Omega) e &= \text{ch } \beta M_1 M_2 e + \text{sh } \beta M_1 M_2 e \\ &= \text{ch } \beta e + \text{sh } \beta e = \exp(\beta) e \end{aligned}$$

La valeur propre cherchée est donc :

$$e^{+(\beta + \gamma)}$$

De même sur ϵ^- l'action de $\exp(\beta M_1 M_2 \Omega) \exp(\gamma M_1 M_2)$ est celle de $\exp(\gamma - \beta) M_1 M_2$ et il faut choisir une des valeurs propres :

$$e^{\pm(\gamma - \beta)}$$

Prenons $f = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \in \epsilon^-$ et $\gamma = 0$:

$$\exp(\beta M_1 M_2 \Omega) f = \text{ch} \beta (+f) + \text{sh} \beta f = e^\beta f$$

d'où l'on choisit : $e^{\beta - \gamma}$

Nous avons donc :

$$\text{Trace}(AB)^n = (\alpha)^n \{ (e^{\beta + \gamma})^n + (e^{\beta - \gamma})^n \}$$

avec

$$\alpha = \sqrt{2 \text{sh } 2\beta}$$

$$e^\gamma = \sqrt{\frac{\text{ch } \beta}{\text{sh } \beta}}$$

Et le résultat final est :

$$\text{Trace}(AB)^n = (e^\beta)^n (2^n) \cdot \{ (\text{ch } \beta)^n + (\text{sh } \beta)^n \}$$

II.2.5. Modèle d'Ising à deux dimensions ([71])

Il s'agit de trouver $\text{tr}(AB)^n$ avec

$$A = \exp(\beta M_2 M_3 + \beta M_4 M_5 + \dots + \beta M_1 M_{2n} \Omega)$$

$$B = \alpha^n \exp(\gamma M_1 M_2 + \gamma M_3 M_4 + \dots + \gamma M_{2n-1} M_{2n})$$

$$\alpha = \sqrt{2 \text{sh } 2\beta} \quad \text{th } \gamma = e^{-2\beta}$$

Les éléments de $SO(\mathcal{M})$ associés à A_\pm (restriction de A à Ω^\pm) et B sont :

$$\tilde{A}_{\pm} = \begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mp \text{sh}2\beta \\ 0 & \text{ch}2\beta & \text{sh}2\beta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \text{sh}2\beta & \text{ch}2\beta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}2\beta & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \text{ch}2\beta & 0 \\ \mp \text{sh}2\beta & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \text{ch}2\beta \end{pmatrix}$$

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

Les produits $\tilde{A}_{\pm} \tilde{B}$ sont des matrices circulantes de la forme

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & 0 & \dots & \mp a_3 \\ a_3 & a_1 & a_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_2 & 0 & 0 & \dots & a_1 \end{pmatrix}$$

avec :

$$a_1 = \begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & 0 \\ 0 & \text{ch}2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

$$a_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \text{sh}2\beta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

$$a_3 = \begin{pmatrix} 0 & \text{sh}2\beta \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de $\tilde{A}_+ \tilde{B}$ sont celles des matrices :

$$a_1 + \left(e^{\frac{i\pi}{n}}\right)^{2r-1} \quad a_2 + \left(e^{\frac{i\pi}{n}}\right)^{-(2r-1)} \quad a_3 =$$

$$\begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & (\text{sh}2\beta)\left(e^{\frac{i\pi}{n}}\right)^{2r-1} \\ (\text{sh}2\beta)\left(e^{\frac{i\pi}{n}}\right)^{2r-1} & \text{ch}2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

$$r = 1, 2, \dots, n$$

Les valeurs propres de $\tilde{A}_- \tilde{B}$ sont celles des matrices :

$$a_1 + \left(e^{\frac{2i\pi}{n}}\right)^r \quad a_2 + \left(e^{\frac{2i\pi}{n}}\right)^{-r} \quad a_3 =$$

$$\begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & \text{sh}2\beta\left(e^{\frac{2i\pi}{n}}\right)^r \\ \text{sh}2\beta\left(e^{\frac{2i\pi}{n}}\right)^r & \text{ch}2\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{ch}2\gamma & -\text{sh}2\gamma \\ -\text{sh}2\gamma & \text{ch}2\gamma \end{pmatrix}$$

$$r = 1, 2, \dots, n$$

Pour toutes ces matrices le produit des valeurs propres est égale à 1. En regardant leurs sommes on peut les déterminer.

Les valeurs propres de $\tilde{A}_+ \tilde{B}$ sont données par :

$$\exp(\pm 2\eta_{2r-1})$$

$$\text{ch } \eta_{2r-1} = \text{ch}2\beta \text{ ch}2\gamma - \cos^2 \frac{r-1}{n} \pi \cdot \text{sh}2\beta \cdot \text{sh}2\gamma$$

$$r = 1, 2, \dots, n.$$

Tandis que les valeurs propres de $\tilde{A}_- \tilde{B}$ sont données par : $\exp(\pm 2\eta_{2r})$

$$\text{ch } \eta_{2r} = \text{ch}2\beta \text{ ch}2\gamma - \cos \frac{2r}{n} \pi \text{ sh}2\beta \text{ sh}2\gamma$$

Il reste à déterminer le signe des η_j .

Cas des η_{2r}

Si $\beta = 0$ on peut choisir la base orthonormée neutre de vecteurs propres

$M_1 M_2 \dots M_{2n}$ avec $\eta_{2r} = \gamma$.

Si $\gamma = 0$ on peut choisir la base orthonormée neutre de vecteurs propres

$M_1 (-M_{2n}) M_3 (-M_2) \dots M_{2n-1} (-M_{2n-2}) = -M_1 \dots M_{2n}$.

Il faut prendre alors : $\eta_{2r} = \beta$ $r = 1, \dots, n-1$ et $\eta_{2n} = -\beta$.

On choisira donc pour le cas général :

$$\eta_{2r} \geq 0 \quad r = 1, \dots, n-1 \quad \eta_{2n} = \gamma - \beta$$

Cas des η_{2r-1} (raisonnement identique)

Si $\gamma = 0$ on peut choisir tous les η_{2r-1} égaux à β et si $\beta = 0$ on peut choisir $\eta_{2r-1} = \gamma$.

En fin de compte on peut choisir $\eta_{2r-1} \geq 0$.

En choisissant $\eta_{2n} = \beta - \gamma$ on peut écrire les valeurs propres sur ϵ^- avec P de cardinal pair ce qui donne comme valeurs propres de AB :

$$\alpha^n \exp\left(\sum_{r \notin P} \eta_{2r} - \sum_{r \in P} \eta_{2r}\right)$$

$$\alpha^n \exp\left(\sum_{r \notin P} \eta_{2r-1} - \sum_{r \in P} \eta_{2r-1}\right)$$

Et tous les calculs effectués (en appliquant le lemme III.2.2. démontré plus loin) :

$$\text{Trace } (AB)^n =$$

$$\frac{1}{2} (\sqrt{2 \operatorname{sh} 2\beta})^{n^2} \left\{ \prod_{r=1}^n (2 \operatorname{ch} n \eta_{2r}) + \prod_{r=1}^n (2 \operatorname{sh} n \eta_{2r}) \right. \\ \left. + \prod_{r=1}^n (2 \operatorname{ch} n \eta_{2r-1}) + \prod_{r=1}^n (2 \operatorname{sh} n \eta_{2r-1}) \right\}$$

avec

$$\operatorname{ch} 2\eta_r = \operatorname{ch} 2\beta \cdot \operatorname{ch} 2\gamma - \cos \frac{r\pi}{n} \operatorname{sh} 2\beta \operatorname{sh} 2\gamma$$

$$r = 1, 2, \dots, 2n$$

$$\eta_r \geq 0 \quad r = 1, 2, \dots, 2n-1$$

$$\eta_{2n} = \beta - \gamma.$$

III - CALCUL DE FONCTIONS DE PARTITION DE MODELES NON HOMOGENE : UNE METHODE "POLYNOMIALE"

III.1 - INTRODUCTION

Nous allons montrer comment le formalisme de l'analyse spinorielle permet d'exprimer la fonction de partition à l'aide de déterminants. On constatera que la présente méthode ne demande plus de calculs qui croissent exponentiellement avec la taille du problème comme c'était le cas des méthodes de calcul proposées au chapitre V.

III.2 - METHODE DE CALCUL POUR UN MODELE NON HOMOGENE

III.2.1. - Notations

Nous illustrerons la méthode sur un modèle qui ne possède pas de périodicité en colonnes pour éviter des problèmes techniques.

Nous voulons calculer :

$$Z = \text{Trace} (A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m B_m)$$

avec

$$A_k = \prod_{r=1}^{n-1} (\text{ch}(\beta_k^r) \mathbf{1} + \text{sh} \beta_k^r S_r S_{r+1})$$

$$B_k = \prod_{r=1}^n ((e^{\gamma_k^r}) \mathbf{1} + (e^{-\gamma_k^r}) C_r)$$

$$\gamma_k^r, \beta_k^r = \pm \beta.$$

Nous posons toujours (notation du paragraphe II.1) :

$$B_k = \prod_{r=1}^n \alpha_k^r \exp(\gamma_k^r M_{2r-1} M_{2r})$$

$$(\alpha_k^r)^2 = 2 \text{sh} 2\beta_k^r \quad \text{th} \gamma_k^r = e^{-2\beta_k^r}$$

LEMME III.2.2

$$\text{Soit } P = \{1, 2, \dots, n\} \quad \mu_p = e^{\theta_p} \quad p = 1, 2, \dots, n \\ \theta_p \in \mathbb{C}$$

$$\sum_{\substack{X \subset P \\ |X| \text{ pair}}} \left(\prod_{i \notin X} \mu_i \right) \left(\prod_{i \in X} \frac{1}{\mu_i} \right) = 2^{n-1} \left[\prod_{p=1}^n \text{ch} \theta_p + \prod_{p=1}^n \text{sh} \theta_p \right]$$

$$\sum_{\substack{X \subset P \\ |X| \text{ impair}}} \left(\prod_{i \notin X} \mu_i \right) \left(\prod_{i \in X} \frac{1}{\mu_i} \right) = 2^{n-1} \left[\prod_{p=1}^n \text{ch} \theta_p - \prod_{p=1}^n \text{sh} \theta_p \right]$$

La démonstration se fait très simplement par récurrence.

LEMME III.2.3.

Soit $0 \in \text{SO}(\mathcal{V})$ possédant pour valeurs propres :

$$e^{\pm 2\theta_1}, e^{\pm 2\theta_2}, \dots, e^{\pm 2\theta_n}$$

$$\det(I+0) = \left(2^n \prod_{i=1}^n \text{ch} \theta_i \right)^2$$

$$\det(I-0) = \left(2^n \prod_{i=1}^n \text{sh} \theta_i \right)^2 (-1)^n$$

La démonstration est immédiate.

III.2.4. - Evaluation de Z par un déterminant

En utilisant les notations du paragraphe II, l'élément de $\text{SO}(\mathcal{V})$ correspondant à A_k est :

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \text{ch} 2\beta_k^{\circ 1} & \text{sh} 2\beta_k^{\circ 1} & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \text{sh} 2\beta_k^{\circ 1} & \text{ch} 2\beta_k^{\circ 1} & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \text{ch} 2\beta_k^{\circ r} & \text{sh} 2\beta_k^{\circ r} & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \text{sh} 2\beta_k^{\circ r} & \text{ch} 2\beta_k^{\circ r} & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

L'élément de $SO(\mathcal{V})$ correspondant à $B_k / \Pi \alpha_k^r$ se met sous la forme

$$\tilde{B}_k = \begin{pmatrix} b_k^1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_k^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & b_k^n \end{pmatrix}$$

$$b_k^r = \begin{pmatrix} \text{ch} 2\gamma_k^r & -\text{sh} 2\gamma_k^r \\ -\text{sh} 2\gamma_k^r & \text{ch} 2\gamma_k^r \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \text{coth} 2\beta & -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} \\ -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} & \text{coth} 2\beta \end{pmatrix}$$

Le signe étant celui de γ_k^r

En effet si $\gamma_k^r = \beta$ on a : $\text{th} \gamma_k^r = e^{-2\beta}$ et :

$$\text{ch} 2\gamma_k^r = \frac{1 + \text{th}^2 \gamma_k^r}{1 - \text{th}^2 \gamma_k^r} = \frac{\text{ch} 2\beta}{\text{sh} 2\beta}$$

$$\text{sh} 2\gamma_k^r = \frac{2 \text{th} \gamma_k^r}{1 - \text{th}^2 \gamma_k^r} = \frac{1}{\text{sh} 2\beta}$$

et les signes sont changés si $\text{th} \gamma_k^r = e^{2\beta}$

Si $e^{\pm 2\theta_1}, e^{\pm 2\theta_2}, \dots, e^{\pm 2\theta_n}$ désignent les valeurs propres de $\tilde{A}_1 \tilde{B}_1 \tilde{A}_2 \tilde{B}_2 \dots \tilde{A}_m \tilde{B}_m$.

La trace de $(A_2(B_1 / \Pi \alpha_1^r) A_2(B_2 / \Pi \alpha_2^r) \dots A_m(B_m / \Pi \alpha_n^r))$ est égale au signe près (d'après le Théorème sur le Groupe Spinoriel), à :

$$\sum_{P \subset \{1, 2, \dots, n\}} \left(\prod_{i \in P} e^{\theta_i} \prod_{i \notin P} e^{-\theta_i} \right)$$

et en appliquant les lemmes II.2.2 et II.23. le carré de cette quantité est égale à :

$$\det(I + \tilde{A}_1 \tilde{B}_1 \tilde{A}_2 \tilde{B}_2 \dots \tilde{A}_m \tilde{B}_m)$$

ce qui donne finalement que le carré de la fonction de partition $Z = \text{trace}(A_1 B_1 \dots A_m B_m)$ est donné par :

$$Z^2 = \left(\prod_{\substack{k=1,2,\dots,m \\ r=1,2,\dots,n}} 2 \text{sh} 2\beta_k^r \right) \det (I + \tilde{A}_1 \tilde{B}_1 \times \dots \times \tilde{A}_m \tilde{B}_m)$$

Remarque

Toutes les quantités qui interviennent dans le calcul de Z^2 s'expriment rationnellement en $z = e^{-2\beta}$ dans le cas où $\beta_k^r = \pm\beta$

Le calcul fait intervenir le produit des matrices : $\tilde{A}_1 \tilde{B}_1 \dots \tilde{A}_m \tilde{B}_m$ qui sont des matrices $2n \times 2n$. Nous avons en plus le calcul d'un déterminant mais le nombre "d'opérations" à effectuer est évidemment polynomial en m et n .

Par des techniques analogues à celles proposées dans le chapitre V il nous serait alors possible de reconstituer Z en un temps polynomial en m et n .

Exemple

Chaîne d'Ising à m spins $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m = \pm\beta$.

Nous avons $\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \dots, \tilde{A}_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

et
$$\tilde{B}_k = (\text{Signe } \beta_k) \begin{pmatrix} \coth 2\beta & -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} \\ -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} & \coth 2\beta \end{pmatrix}$$

Le carré de la fonction de partition Z est :

$$Z^2 = \left(\prod_{k=1}^m (2 \text{sh} 2\beta_k) \right) \det \left(I + \left(\prod_k \text{Signe } \beta_k \right) \begin{pmatrix} \coth 2\beta & -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} \\ -\frac{1}{\text{sh} 2\beta} & \coth 2\beta \end{pmatrix}^m \right)$$

Notons :
$$\gamma = \prod_{k=1}^m \text{signe } \beta_k.$$

En calculant les valeurs propres de \tilde{B}_k il est facile de voir que

$$Z^2(\beta) = \gamma(2\text{sh}2\beta)^m \left[1 + \gamma \left(\frac{1 + \text{ch}2\beta}{\text{sh}2\beta} \right)^m \right] \left[1 + \gamma \left(\frac{\text{ch}2\beta - 1}{\text{sh}2\beta} \right)^m \right]$$

ce qui donne :

$$Z(\beta) = (2 \text{ch}\beta)^m + \gamma(2\text{sh}\beta)^m.$$

III.3 SUPPRESSION DE LA PERIODICITE EN LIGNE

Nous voulons supprimer les interactions entre la première et la dernière ligne pour supprimer toute périodicité du modèle.

Nous allons étudier :

$$Z_\epsilon = \text{Trace} (A_1 B_1 A_2 B_2 \dots A_m B_m(\epsilon))$$

pour la valeur $\epsilon = 0$.

En reprenant les notations du paragraphe précédent nous avons :

$$Z_\epsilon^2 = \left(\prod_{\substack{k=1, \dots, m-1 \\ r=1, \dots, n}} \alpha_k^r \right) (2\text{sh}2\epsilon)^n \det \left(I + \left(\prod_{k=1}^{m-1} \tilde{A}_k \tilde{B}_k \right) \tilde{A}_m \tilde{B}_\epsilon \right)$$

où \tilde{B}_ϵ est la matrice composée de n blocs

$$b_\epsilon = \begin{pmatrix} \text{coth}2\epsilon & -\frac{1}{\text{sh}2\epsilon} \\ -\frac{1}{\text{sh}2\epsilon} & \text{coth}2\epsilon \end{pmatrix}$$

Nous pouvons introduire le facteur $(2 \text{sh}2\epsilon)^n$ dans le déterminant sous forme du déterminant de la matrice comportant n blocs diagonaux :

$$d_\epsilon = \begin{pmatrix} e^\epsilon & & & e^{-\epsilon} \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & e^\epsilon \end{pmatrix}$$

Remarquons que : $d_\epsilon \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

et que

$$b_\epsilon d_\epsilon = \begin{pmatrix} e^\epsilon & -e^\epsilon \\ -e^{-\epsilon} & e^\epsilon \end{pmatrix} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Si nous notons :

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & \\ & 1 & 1 & & & \\ & & 1 & 1 & & \\ & & & 1 & 1 & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 & 1 \\ & & & & & & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$K = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ & -1 & 1 & & & \\ & & 1 & -1 & & \\ & & & -1 & 1 & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 & -1 \\ & & & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

nous avons donc :

$$Z_0^2 = \left(\prod_{\substack{k=1, \dots, m-1 \\ r=1, \dots, n}} 2 \operatorname{sh} 2\beta_k^r \right) \det(J + \tilde{A}_1 \tilde{B}_1 \dots \tilde{A}_m K)$$

Exemple : chaîne d'Ising-homogène

Nous prenons $\beta_k^r = \beta$

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \tilde{B}_k = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} 2\eta & -\operatorname{sh} 2\eta \\ -\operatorname{sh} 2\eta & \operatorname{ch} 2\eta \end{pmatrix} \quad \operatorname{th} \eta = e^{-2\beta}$$

Nous avons :

$$\tilde{B}_k = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & +1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2\eta} & 0 \\ 0 & e^{-2\eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix}$$

Nous avons donc :

$$Z^2(\beta) = (2 \operatorname{sh} 2\beta)^{m-1} \det \left(\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2\eta} & 0 \\ 0 & e^{-2\eta} \end{pmatrix}^{m-1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \right)$$

ce qui donne :

$$Z^2(\beta) = (2 \operatorname{sh} 2\beta)^{m-1} \det \begin{pmatrix} 1+(e^{2\eta})^{m-1} & 1-(e^{2\eta})^{m-1} \\ 1-(e^{2\eta})^{m-1} & 1+(e^{2\eta})^{m-1} \end{pmatrix}$$

$$Z(\beta) = 2 (2 \operatorname{ch} \beta)^{m-1}$$

IV - CALCUL FORMEL D'ENERGIES DE MODELES PERIODIQUES

IV-1 - NOTATIONS ET POSITION DU PROBLEME

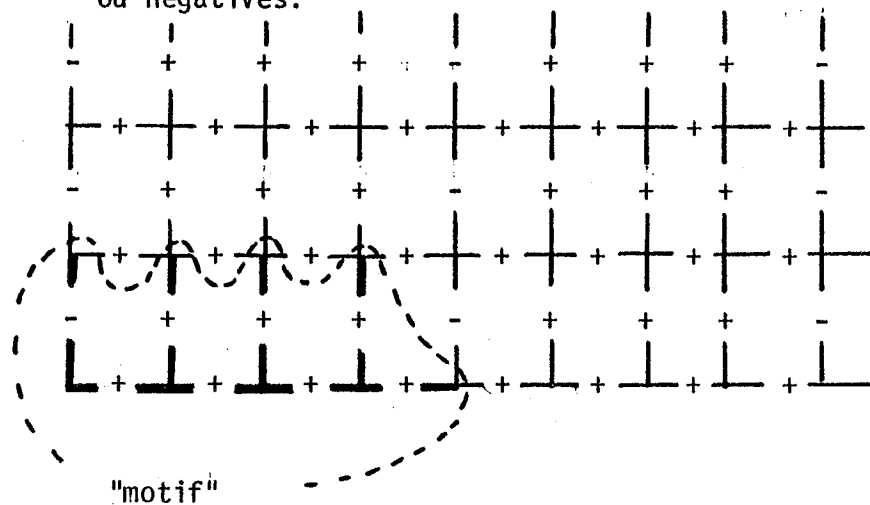
Nous reprenons les notations du paragraphe II.2 mais cela étant maintenant indispensable nous notons $A_k = A_k^{(n)}$, $B_k = B_k^{(n)}$ et $Z = Z_{m,n}$ car l'exposé nécessite de faire varier n et m .

$$Z_{m,n} = \operatorname{Trace} (A_1^{(n)} B_1^{(n)} A_2^{(n)} B_2^{(n)} \dots A_m^{(n)} B_m^{(n)})$$

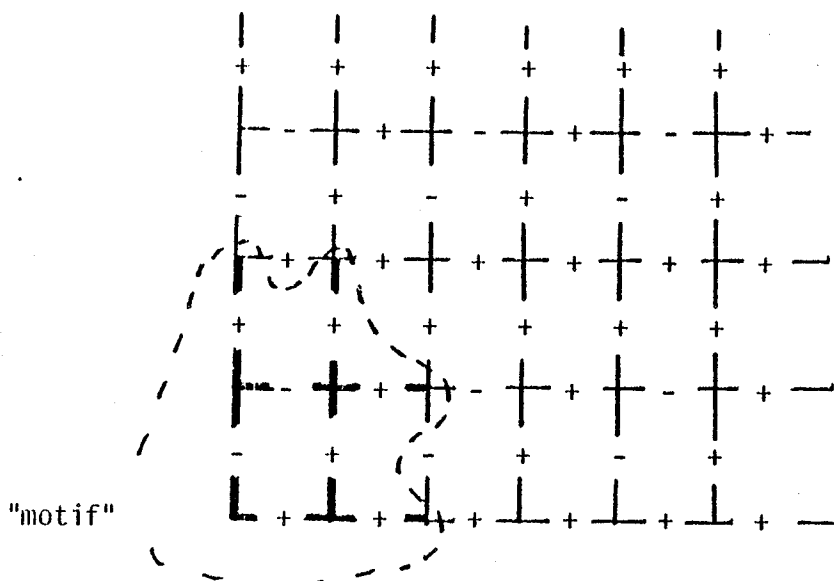
Nous considérons des réseaux obtenus par répétition d'un "motif" de liaisons portant sur p liaisons horizontales et q liaisons verticales. Afin d'éviter de surcharger les notations, l'exposé se fera en utilisant des liaisons positives ou négatives $\pm\beta$. On montrera sur un exemple comment traiter un cas plus général.

Exemple

$p = 4$ $q = 1$. Nous signalons simplement si les liaisons sont positives ou négatives.



$$p = 2 \quad q = 2$$



Remarquons que les $A_k^{(n)}$, $B_k^{(n)}$ et donc $Z_{m,n}$ sont fonctions de β . Nous introduirons la variable β à l'ultime étape car les notations sont beaucoup plus lourdes.

Nous voulons étudier des modèles qui correspondent donc à $m = qr$ et $n = pr$ en faisant tendre r vers $+\infty$. Les échantillons finis ne sont pas carrés mais la convergence correspond bien à une convergence au sens de Van Hove (cf. Chapitre I, § II.1.2).

IV.2 - DEMARCHE DE LA METHODE DE CALCUL

Les différentes propriétés qui suivent ont peu de rapports entre elles et concourent simplement à valider dans tous les détails l'algorithme de calcul utilisé.

Je détaille ici cette démarche qui donne d'ailleurs le mode opératoire à suivre pour traiter les exemples du paragraphe IV.3

La condition de périodicité verticale s'exprime par :

$$A_{i+q}^{(n)} = A_i^{(n)}$$

$$B_{i+q}^{(n)} = B_i^{(n)}$$

et en posant : $A_1^{(n)} B_1^{(n)} A_2^{(n)} B_2^{(n)} \dots A_q^{(n)} B_q^{(n)} = C^{(n)}$

nous nous proposons d'étudier avec $n = pr$:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{(pr)(qr)} \log \text{Trace} ((C^{(pr)})^r)$$

Le but du premier lemme IV.2.1 est de remplacer $C^{(pr)}$ par une matrice $C^{(pr)+}$ qui sera (à une constante près) la représentation spinorielle d'un élément de $SO(\mathcal{M})$ (voir paragraphe II.1.3) et qui aura même restriction à ε^+ (sous espace défini au paragraphe II.1.3).

Le second lemme IV.2.2 nous permettra de transformer le problème en l'étude de :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{pqr} \log |\lambda^{(pr)}|$$

où $\lambda^{(pr)}$ sera la plus grande valeur propre en module de la restriction de $C^{(pr)+}$ à ε^+ .

Ensuite nous remplacerons les matrices $B_k^{(pr)}$ par $B_k^{(pr)} / \prod_{\ell=1}^{pr} (2 \text{sh} \beta_k^\ell)^{1/2}$ pour obtenir des matrices qui sont des représentations spinorielles d'éléments de $SO(\mathcal{M})$. Cela a pour conséquence de remplacer $C^{(pr)+}$ par $D^{(pr)+} = C^{(pr)+} / \left(\prod_{k=1}^q \prod_{\ell=1}^{pr} (2 \text{sh} 2\beta_k^\ell)^{1/2} \right)$ ce qui transforme le problème en l'étude de :

$$\frac{1}{2} \log(2 \text{sh} 2\beta) + \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{pqr} \log |\mu^{(pr)}|$$

où $\mu^{(pr)}$ sera la plus grande valeur propre en module de la restriction de $D^{(pr)+}$ à ε^+ .

Enfin les deux derniers lemmes IV.2.3 et IV.2.4 nous permettront d'arriver à la formule finale :

$$\frac{1}{2} \log 2 \text{sh} 2\beta + \frac{1}{pq} \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{4\pi r} \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{D}^{(pr)+} - I e^{i\phi})| (d\phi)$$

où $\tilde{D}^{(pr)+}$ sera la matrice de $SO(\mathcal{M})$ correspondant à $D^{(pr)+}$ (voir § II.2) et I la matrice identité (de la dimension adéquate).

Dans le paragraphe IV.3 nous ferons intervenir la périodicité horizontale qui se traduira par une structure cyclique par blocs des matrices $\tilde{D}^{(pr)+}$. Ceci permettra d'écrire la limite sous forme d'une intégrale double. Le noyau de l'intégrale étant un déterminant où interviendra le paramètre β dont dépend effectivement $\tilde{D}^{(pr)+}$.

IV.2 - QUELQUES LEMMES

IV.2.1 - Lemme sur la restriction à ε^+

Ce premier lemme ne fait pas intervenir la périodicité du modèle mais seulement des propriétés générales des matrices $A_k^{(n)}$ $B_k^{(n)}$ ainsi que des propriétés dépendantes du modèle physique.

LEMME IV.2.1

$$\text{Soient } C_m^{(n)} = A_1^{(n)} B_1^{(n)} \dots A_m^{(n)} B_m^{(n)}$$

$$\Omega^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon^{(n)\pm} = \{x \in \mathbb{C}^{2n} : \Omega^{(n)}(x) = \pm x\}.$$

Les matrices $A_k^{(n)}$ et $B_k^{(n)}$ sont définies comme au paragraphe II (où elles sont notées A_k et B_k pour simplifier).

En particulier les $\varepsilon^{(n)\pm}$ (notés ε^\pm au paragraphe II) sont stables par $A_k^{(n)}$ et $B_k^{(n)}$.

Notons $T^+(C_m^{(n)})$ (resp. $T^-(C_m^{(n)})$) la trace de la restriction de $C_m^{(n)}$ à $\varepsilon^{(n)+}$ (resp. $\varepsilon^{(n)-}$).

Si $\lim_{m,n \rightarrow +\infty} \frac{1}{mn} \log \text{Trace } (C_m^{(n)})$ existe alors

$\lim_{m,n \rightarrow +\infty} \frac{1}{mn} \log T^+(C_m^{(n)})$ existe et ces deux limites sont égales.

La convergence de m, n vers l'infini devant respecter la convergence au sens de Van Hove (voir Chapitre I).

Démonstration

Construisons par récurrence une base orthonormée de $\epsilon^{(n)+}$ et $\epsilon^{(n)-}$.

$$\text{Pour } n = 1 \quad X_1^+ = \left\{ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right\} \quad X_1^- = \left\{ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right\}$$

$$\text{Posons : } X_n^+ = \left\{ x \otimes \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, x \in X_{n-1}^+ \right\} \cup \left\{ x \otimes \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, x \in X_{n-1}^- \right\}$$

$$X_n^- = \left\{ x \otimes \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, x \in X_{n-1}^- \right\} \cup \left\{ x \otimes \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, x \in X_{n-1}^+ \right\}.$$

Nous allons montrer que pour $C \in \mathcal{M}_{2^n, 2^n}(\mathbb{C})$:

$$\sum_{x \in X_n^+} x^T C x = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2^n} (C(i,i) + C(2^{n-i+1}, i))$$

$$\sum_{x \in X_n^-} x^T C x = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2^n} (C(i,i) - C(2^{n-i+1}, i))$$

On vérifie facilement que cette proposition est vraie pour $n = 1$. Découpons C en quatre blocs de tailles égales :

$$C = \left(\begin{array}{c|c} C_{1,1} & C_{1,2} \\ \hline C_{2,1} & C_{2,2} \end{array} \right)$$

$$\begin{aligned} \sum_{x \in X_n^+} x^T C x &= \frac{1}{2} \sum_{y^+ \in X_{n-1}^+} (y^{+T} C_{1,1} y^+ + y^{+T} C_{1,2} y^+ + y^{+T} C_{2,1} y^+ + y^{+T} C_{2,2} y^+) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{y^- \in X_{n-1}^-} (y^{-T} C_{1,1} y^- - y^{-T} C_{1,2} y^- - y^{-T} C_{2,1} y^- + y^{-T} C_{2,2} y^-) \end{aligned}$$

et on obtient le résultat en regroupant les sommations relatives aux mêmes blocs.

La démonstration est identique pour $\sum_{x \in X_n^-} x^T C x$

Remarquons maintenant que $C_m^{(n)}$ laisse $\epsilon^{(n)+}$ et $\epsilon^{(n)-}$ invariants (§ II.1.3), nous avons donc :

$$T^+(C_m^{(n)}) = \sum_{x \in X_n^+} x^T C_m^{(n)} x$$

Nous avons donc :

$$T^+(C_m^{(n)}) = \frac{1}{2} \text{Trace} (C_m^{(n)}) + \frac{1}{2} \tau(C_m^{(n)})$$

avec

$$\tau(C_m^{(n)}) = \sum_{i=1}^{2^n} C_m^{(n)}(2^{n-i+1}, i).$$

$\tau(C_m^{(n)})$ correspond donc à la fonction de partition du modèle envisagé avec une condition particulière sur les valeurs des spins de la lère et de la $m^{\text{ème}}$ rangée qui induit une modification asymptotiquement négligeable de l'ensemble de sommation (chapitre I paragraphe III.3.2). Nous avons donc, si la convergence du rectangle $m \times n$ respecte la convergence de Van Hove :

$$\lim_{m, n \rightarrow +\infty} \frac{1}{mn} \log \text{Trace} (C_m^{(n)}) = \lim_{m, n \rightarrow +\infty} \frac{1}{mn} \log \tau(C_m^{(n)})$$

Toutes les quantités étant positives nous avons donc, en tenant compte de la concavité du logarithme :

$$\frac{1}{2} \log \text{Trace} (C_m^{(n)}) + \frac{1}{2} \log \tau(C_m^{(n)}) \leq \log T^+(C_m^{(n)})$$

et :

$$\log T^+(C_m^{(n)}) \leq \text{Max}(\log \text{Trace} (C_m^{(n)}), \log \tau(C_m^{(n)}))$$

ce qui nous permet de conclure.

LEMME IV.2.2

Plaçons nous dans le cas $m = rq$ et $n = pr$ avec

$$C_m^{(n)} = (A_1^{(n)} B_1^{(n)} A_2^{(n)} B_2^{(n)} \dots A_q^{(n)} B_q^{(n)})^r = (C^{(pr)})^r$$

Si T^+ désigne toujours la trace de la restriction à $\varepsilon^{(pr)+}$ et si $\lambda^{(pr)}$ désigne la plus grande valeur propre en module de la restriction de $C^{(pr)}$ à $\varepsilon^{(pr)+}$, alors l'existence de :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{pqr^2} \log T^+ (C^{(pr)})^r$$

est équivalente à l'existence de :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{pqr} \log |\lambda^{(pr)}|$$

ces deux limites étant égales.

Démonstration

$\varepsilon^{(pr)+}$ est stable par $C^{(pr)}$ donc sa restriction à $\varepsilon^{(pr)+}$ possède 2^{pr-1} valeurs propres

$$\lambda_1^{(pr)} = \lambda_1^{(pr)}, \lambda_2^{(pr)}, \dots, \lambda_{2^{pr-1}}^{(pr)}$$

que nous rangeons par ordre décroissants de modules.

Or :

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{pqr^2} \log T^+ ((C^{(pr)})^r) - \frac{1}{pqr^2} \log |\lambda^{(pr)}|^r \right| \\ & \leq \frac{1}{pqr^2} \log \frac{2^{pr-1} \prod_{i=1}^{2^{pr-1}} |\lambda_i^{(pr)}|}{|\lambda_1^{(pr)}|^r} \leq \frac{\log 2^{pr-1}}{pqr^2} \leq \frac{\log 2}{qr} \end{aligned}$$

ce qui démontre le résultat.

LEMME IV.2.3

Soit \tilde{C} une matrice de $\mathcal{M}_{2n,2n}(\mathbb{C})$ de valeurs propres :

$$e^{\pm 2\theta_1}, e^{\pm 2\theta_2}, \dots, e^{\pm 2\theta_n}$$

avec

$$\begin{aligned} \theta_k &= \mu_k + i\omega_k & \mu_k &\in \mathbb{R}^+ \\ & & \omega_k &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

On a :

$$\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{C} - I e^{i\phi})| d\phi.$$

Démonstration

$$\text{On a : } \log |\det(\tilde{C} - I e^{i\phi})| = \sum_{k=1}^n \log |e^{2(\mu_k + i\omega_k)} - e^{i\phi}| + \sum_{k=1}^n \log |e^{-2(\mu_k + i\omega_k)} - e^{i\phi}|$$

$$\text{Or : } \int_0^{2\pi} \log |e^{2(\mu_k + i\omega_k)} - e^{i\phi}| d\phi = \int_0^{2\pi} \log |e^{2\mu_k} - e^{i\phi}| d\phi$$

car l'intégrande est périodique de période 2π .

$$\text{De même : } \int_0^{2\pi} \log |e^{-2(\mu_k + i\omega_k)} - e^{i\phi}| d\phi = \int_0^{2\pi} \log |e^{-2\mu_k} - e^{i\phi}| d\phi$$

$$\text{D'où : } \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{C} - e^{i\phi} I)| d\phi = \sum_{k=1}^n \int_0^{2\pi} \log |(e^{2\mu_k} - e^{i\phi})(e^{-2\mu_k} - e^{i\phi})| d\phi$$

ce qui est égal à :

$$\sum_{k=1}^n \int_0^{2\pi} \log |2 \operatorname{ch} \mu_k \cdot e^{i\phi} - (1 + e^{2i\phi})| d\phi = \sum_{k=1}^n \int_0^{2\pi} \log |2 \operatorname{ch} \mu_k - 2 \cos \phi| d\phi$$

Or pour $x \geq 0$ on a :

$$\int_0^{2\pi} \log |2 \operatorname{ch} x - 2 \cos \phi| d\phi = 2\pi x$$

d'où le résultat.

LEMME IV.4.4.

Soient $D^{(n)}$ des matrices de $\mathcal{M}_{2^n, 2^n}(\mathbb{C})$ qui sont des représentations spinorielles de matrices $\tilde{D}^{(n)} \in SO(\mathcal{K})$.

Notons les valeurs propres de $\tilde{D}^{(n)}$:

$$e^{\pm 2\theta_k^{(n)}} \quad k = 1, 2, \dots, n$$

$$\theta_k^{(n)} = \mu_k^{(n)} + i\omega_k^{(n)} \quad \begin{array}{l} \mu_k^{(n)} \in \mathbb{R}^+ \\ \omega_k^{(n)} \in \mathbb{R} \end{array}$$

Si les $e^{\pm 2\theta_k^{(n)}}$ sont uniformément bornés (en k et n) et si (pour $n = qr$)

$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{r^2} \log T^+(D^{(pr)})^r$ existe alors cette limite est égale à :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \left(\frac{1}{r} \sum_{k=1}^{pr} \mu_k^{(pr)} \right) = \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{4\pi r} \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{D}^{(pr)} - I \cdot e^{i\phi})| d\phi$$

Démonstration

Si $\lambda^{(pr)}$ désigne la plus grande valeur propre en module de la restriction de $D^{(pr)}$ à $\varepsilon^{(pr)+}$ on a en supposant les $\mu_k^{(pr)}$ ordonnés :

$$\mu_{pr}^{(pr)} \geq \mu_{pr-1}^{(pr)} \geq \dots \geq \mu_1^{(pr)}$$

$$|\lambda^{(pr)}| = \begin{cases} e^{\mu_1^{(pr)} + \mu_2^{(pr)} + \dots + \mu_{pr}^{(pr)}} \\ \text{ou} \\ e^{-\mu_1^{(pr)} + \mu_2^{(pr)} + \dots + \mu_{pr}^{(pr)}} \end{cases}$$

d'après le théorème sur le groupe spinoriel. Si les $e^{\pm 2\theta_k^{(pr)}}$ sont bornés, peu importe le choix de $\pm \mu_1^{(pr)}$ et il convient d'étudier la limite de

$$\frac{1}{r} \sum_{k=1}^{pr} \mu_k^{(pr)}$$

cette quantité étant égale d'après le lemme IV.2.3 à :

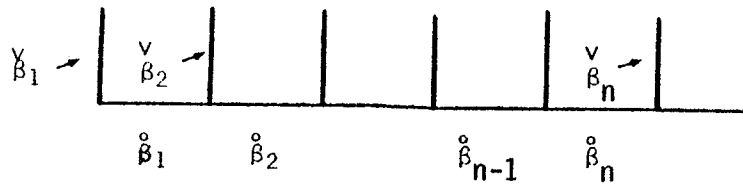
$$\frac{1}{4\pi r} \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{D}^{(pr)} - I \cdot e^{i\phi})| d\phi$$

d'où le résultat.

IV.3 - MODELE A PERIODICITE VERTICALE 1

IV.3.1 - Description générale

La périodicité verticale $q = 1$ signifie que les matrices $A_k^{(n)}$ et $B_k^{(n)}$ sont indépendantes de k et pour cela notées $A^{(n)}$ et $B^{(n)}$. Le modèle est obtenu par répétition d'un "motif" décrit ci-après.



Nous choisirons toutes les liaisons horizontales positives :

$$\overset{o}{\beta}_j = \beta$$

(ceci n'appauvrit pas ce type de modèle car les liaisons horizontales n'affectent pas les frustrations des plaquettes : voir chapitre I paragraphe IV.4). De plus : $\overset{v}{\beta}_j = \pm\beta$.

Nous introduirons plus tard la périodicité horizontale p avec $n = pr$. Dans l'immédiat on peut sans influence sur l'énergie limite remplacer $\overset{o}{\beta}_n$ par $-\overset{o}{\beta}_n$. (Chapitre I, paragraphe III).

En se reportant aux notations au paragraphe IV.2 nous pouvons écrire :

$$\tilde{D}^{(n)+} = \tilde{A}^{(n)} \tilde{B}^{(n)}$$

avec :

$$\tilde{A}^{(n)} = \begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\text{sh}2\beta \\ 0 & \text{ch}2\beta & -\text{sh}2\beta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\text{sh}2\beta & \text{ch}2\beta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}2\beta & -\text{sh}2\beta & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\text{sh}2\beta & \text{ch}2\beta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\text{sh}2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \text{ch}2\beta \end{pmatrix}$$

$$\tilde{B}^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_n \end{pmatrix}$$

avec

$$b_r = \begin{pmatrix} \coth 2\beta_r & -\frac{1}{\text{sh} 2\beta_r} \\ -\frac{1}{\text{sh} 2\beta_r} & \coth 2\beta_r \end{pmatrix}$$

IV.3.2 - Propriété des valeurs propres $\tilde{A}^{(n)} \tilde{B}^{(n)}$

Les valeurs propres de $\tilde{A}^{(n)} \tilde{B}^{(n)}$ sont réelles.

Démonstration

Si on note $\tilde{A}(2\beta) = \tilde{A}^{(n)}$ on voit que :

$$\tilde{A}^{-1}(\beta) = \tilde{A}(-\beta) \quad \tilde{A}(2\beta) = (\tilde{A}(\beta))^2$$

$\tilde{A}^{(n)} \tilde{B}^{(n)}$ a donc mêmes valeurs propres que :

$$\tilde{A}(-\beta) \tilde{A}(2\beta) \tilde{B}^{(n)} \tilde{A}(+\beta) = \tilde{A}(\beta) \tilde{B}^{(n)} \tilde{A}(\beta)$$

qui est une matrice symétrique réelle. Cette propriété nous servira pour guider les simplifications lors du calcul formel du déterminant final.

IV.3.3. - Introduction de la périodicité en ligne

Nous supposons donc maintenant que $n = p \times r$ avec une périodicité sur les liaisons verticales c'est-à-dire : $\beta_i = \beta_{i+p}$.

La matrice $\tilde{A}^{(pr)} \tilde{B}^{(pr)}$ est donc circulante par blocs de $2p$ et de la forme

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & 0 & \dots & 0 & a_3 \\ a_3 & a_1 & a_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_2 & 0 & 0 & \dots & a_3 & a_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \delta \end{pmatrix}$$

avec :

$$a_1 = \begin{pmatrix} \text{ch}2\beta & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \text{ch}2\beta & \text{sh}2\beta & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \text{sh}2\beta & \text{ch}2\beta & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \text{ch}2\beta \end{pmatrix} \quad a_3^T = a_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{sh}2\beta & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\delta = \begin{pmatrix} \coth 2\beta_1 & -1/\text{sh} 2\beta_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1/\text{sh} 2\beta_1 & \coth 2\beta_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \coth 2\beta_p & -1/\text{sh} 2\beta_p \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1/\text{sh} 2\beta_p & \coth 2\beta_p \end{pmatrix}$$

ce qui donne [9] :

$$\det(\tilde{A}^{(pr)} \tilde{B}^{(pr)} - I \cdot e^{i\phi}) = \prod_{k=0}^{r-1} \det((a_1 \delta - I \cdot e^{i\phi}) + a_2 \delta e^{\frac{2i\pi k}{r}} + a_3 \delta e^{-\frac{2i\pi k}{r}})$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{r} \log |\det \tilde{A}^{(pr)} \tilde{B}^{(pr)} - I \cdot e^{i\phi}| \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \log |\det((a_1 \delta - I e^{i\phi}) + a_2 \delta e^{i\omega} + a_3 \delta e^{-i\omega})| d\omega \end{aligned}$$

ce qui donne donc pour la formule finale de l'énergie (voir notations du paragraphe IV.2)

$$\frac{1}{2} \log(2\text{sh} 2\beta) + \frac{1}{8p\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log |\det((a_1 \delta - I \cdot e^{i\phi}) + a_2 \delta e^{i\omega} + a_3 \delta e^{-i\omega})| d\omega d\phi$$

ou sous la forme :

$$\frac{1}{8p\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log \{ (2\text{sh} 2\beta)^p |\det((a_1 \delta - I \cdot e^{i\phi}) + a_2 \delta e^{i\omega} + a_3 \delta e^{-i\omega})| \} d\omega d\phi$$

IV.3.4. - Illustration : modèle d'Ising

On a : $p = 1$ et les blocs 2×2 sont :

$$a_1 = \begin{pmatrix} \text{ch} 2\beta & 0 \\ 0 & \text{ch} 2\beta \end{pmatrix} \quad a_2 = a_3^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \text{sh} 2\beta & 0 \end{pmatrix}$$

$$\delta = \begin{pmatrix} \coth 2\beta & -1/\text{sh} 2\beta \\ -1/\text{sh} 2\beta & \coth 2\beta \end{pmatrix}$$

Nous voulons donc calculer le déterminant de :

$$a_1 \delta^{-1} e^{i\phi} + a_2 \delta e^{i\omega} + a_3 \delta e^{-i\omega}$$

qui est égal à celui de :

$$\begin{pmatrix} a_1 - \delta^{-1} e^{i\phi} + a_2 e^{i\omega} + a_3 e^{-i\omega} & & \\ \text{ch}2\beta & -\frac{\text{ch}2\beta}{\text{sh}2\beta} e^{i\phi} & -\frac{e^{i\phi}}{\text{sh}2\beta} + \text{sh}2\beta e^{i\omega} \\ -\frac{e^{i\phi}}{\text{sh}2\beta} + \text{sh}2\beta e^{-i\omega} & & \text{ch}2\beta - \frac{\text{ch}2\beta}{\text{sh}2\beta} e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

Ce déterminant est égal à :

$$\text{ch}^2 2\beta + \frac{\text{ch}^2 2\beta}{\text{sh}^2 2\beta} e^{2i\phi} - 2 \frac{\text{ch}^2 2\beta}{\text{sh} 2\beta} e^{i\phi} - \frac{e^{2i\phi}}{\text{sh}^2 2\beta} - \text{sh}^2 2\beta + 2e^{i\phi} \cos \omega$$

ce qui se simplifie en :

$$1 + e^{2i\phi} - 2 \frac{\text{ch}^2 2\beta}{\text{sh} 2\beta} e^{i\phi} + 2e^{i\phi} \cos \omega$$

cette expression ayant pour module (on divise par $-e^{i\phi}$) :

$$2 \frac{\text{ch}^2 2\beta}{\text{sh} 2\beta} - 2 \cos \omega - 2 \cos \phi$$

D'où l'expression de l'énergie correspondante au modèle d'Ising :

$$\frac{1}{2} \log(2 \text{sh} 2\beta) + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log\left(2 \frac{\text{ch}^2 2\beta}{\text{sh} 2\beta} - 2 \cos \omega - 2 \cos \phi\right) d\omega d\phi$$

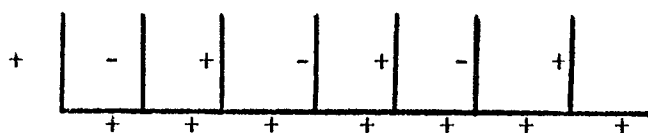
ce qui peut s'écrire :

$$\log 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log(\text{ch}^2 2\beta - \text{sh} 2\beta (\cos \omega + \cos \phi)) d\omega d\phi$$

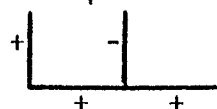
IV.3.5 - Modèle avec période horizontale 2

Considérons des liaisons $\pm\beta$. Seuls leurs signes seront portés sur le schéma.

Nous considérons la répétition périodique suivante :



qui correspond à la répétition du motif simple :



Ce modèle est connu sous le nom de modèle A et sa solution est calculée dans ([3] [8] [11]).

Nous allons montrer comment la retrouver en utilisant le système de calcul formel REDUCE.

La matrice dont il nous faut calculer le déterminant est :

$$\begin{pmatrix} \operatorname{ch}x & 0 & 0 & \operatorname{sh}x & e^{i\omega} \\ 0 & \operatorname{ch}x & \operatorname{sh}x & 0 & \\ 0 & \operatorname{sh}x & \operatorname{ch}x & 0 & \\ \operatorname{sh}x e^{-i\omega} & 0 & 0 & \operatorname{ch}x & \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{\operatorname{ch}x}{\operatorname{sh}x} & -1/\operatorname{sh}x & 0 & 0 \\ -1/\operatorname{sh}x & \frac{\operatorname{ch}x}{\operatorname{sh}x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\operatorname{ch}x}{\operatorname{sh}x} & \frac{1}{\operatorname{sh}x} \\ 0 & 0 & 1/\operatorname{sh}x & -\frac{\operatorname{ch}x}{\operatorname{sh}x} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} e^{i\phi}$$

avec $x = 2\beta$.

Nous utilisons des matrices $ma(4,4)$, $mb(4,4)$, $mi(4,4)$ et $m(4,4)$.

$e^{i\omega}$ est introduit sous la forme de la variable ew et $e^{i\phi}$ sous la forme de la variable $e\phi$.

Les matrices sont initialisées :

```

ma(1,1) := ch(x) ;
ma(1,4) := sh(x) * ew ;
      ⋮
ma(4,1) := sh(x)/ew ;
      ⋮

```

ch(x) et sh(x) étant définis comme des opérateurs.
La matrice m prend la valeur :

```
m := ma * mb - mi * ephi ;
```

Le calcul du déterminant se fait avec les règles :

```

ch(x)**2 = 1+sh(x)**2 ;
cos(x)**2 = 1-sin(x)**2 ;
ew**2 = 2*ew*cos(x)-1 ;

```

On peut montrer :

$$|\det(m)| = -\det(m)/\text{ephi}^2$$

Le calcul fait sous REDUCE donne :

$$-\det(m) * \text{sh}(x)^2 / \text{ephi}^2 = 2 * (2 + \text{sh}^2(x) + 2 * \text{sh}^2(x) * \sin^2(\text{phi}) - \text{sh}^2(x) * \cos(w))$$

en prenant la variable $\theta = 2\phi$ (on vérifie que l'intégrale sera identique)
la déterminant de la quantité précédente devient
 $2(2 + 2\text{sh}^2x - \text{sh}^2x (\cos\theta + \cos\omega))$.

D'où l'énergie limite :

$$\frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log 2(2\text{ch}^2x - \text{sh}^2x(\cos\theta + \cos\omega)) d\theta d\omega$$

Exemple d'utilisation de REDUCE sous MULTICS

Dans le fichier "mambmi" figure les commandes REDUCE pour initialiser les termes significatifs des matrices ma, mb, mi. Le paramètre 'n' donne la demi dimension des matrices. L'initialisation est faite en supposant toutes les liaisons positives.

Dans le fichier 'négatif' figure les commandes REDUCE qui modifie les termes de la matrice mb pour rendre compte d'une ⁱème liaison verticale négative : on utilise le paramètre 'i'.

Le reste de la session reduce est commentée assez explicitement.

```
LISP REDUCE
*
(REDUCE)
REDUCE-HB68 VERSION NOVEMBER 1982

% DECLARATION DES VARIABLES ;

INTEGER N, I, I1, I2 ;
MATRIX MA(4,4), MB(4,4), m(4,4), MI(4,4) ;

% PREMIERE AFFECTATION ;

N := 2 ;
N := 2

OFF OUTPUT ;

IN "MAMBMI" ;
*** CH DECLARED OPERATOR

*** SH DECLARED OPERATOR

ON OUTPUT ;

% AFFECTATION LIAISON NEGATIVE ;

I := 2 ;
I := 2
```

```

IN " NEGATIF" ;

i1 := 3

i2 := 4

mB(3,3) := (- CH(x))/SH(x)

mB(4,4) := (- CH(x))/SH(x)

mB(3,4) := 1/SH(x)

mB(4,3) := 1/SH(x)

% REGLES DE SIMPLIFICATION ET OPTIONS DE CALCUL ;
FOR ALL x LET CH(x)**2 = 1 + SH(x)**2 ;

FOR ALL x LET COS(x)**2 = 1 - SIN(x)**2 ;
LET EW**2 = 2*EW*COS(W) - 1 ;

% MATRICE DONT IL FAUT CALCULER LE DETERMINANT ;
OFF OUTPUT ;
M:= MA*MB - MI*EPHI ;
ON OUTPUT ;

LET EPHI**2 = 2*EPHI*COS(PHI) - 1 ;
D := -DET(M)*(SH(x)**2)/EPHI**2 ;

D := 2*( - COS(W)*SH(x)2 + 2*SH(x)2*SIN(PHI)2 + SH(x)2 + 2)

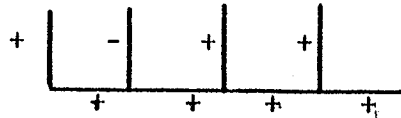
LET SIN(PHI)**2 = (1-COS(T))/2 ;
d1 := D ;

d1 := 2*( - COS(T)*SH(x)2 - COS(W)*SH(x)2 + 2*SH(x)2 + 2)

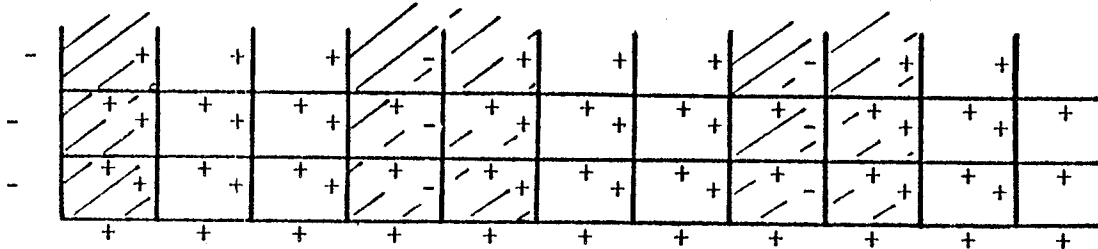
```

IV.3.6. - Modèles avec période horizontale 4

Les liaisons $\pm\beta$ sont symbolisées \pm et on pose $x = 2\beta$.

1) Premier exemple

qui correspond au modèle physique



Les hachures correspondent aux plaquettes frustrées.

Le résultat relatif à ce modèle figure dans ([3],[8],[11]).

La matrice dont il nous faut calculer le déterminant est :

$$m = m_a \times m_b - m_i \times e^{i\phi}$$

m_a désignant la matrice 8×8 :

$$\begin{pmatrix} \text{ch}x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sh}x e^{i\omega} \\ 0 & \text{ch}x & \text{sh}x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{sh}x & \text{ch}x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}x & \text{sh}x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{sh}x & \text{ch}x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{ch}x & \text{sh}x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sh}x & \text{ch}x & 0 \\ \text{sh}x e^{-i\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{ch}x \end{pmatrix}$$

m_b désignant la matrice 8×8 :

$$m_b = \begin{pmatrix} b & & & & & & & \\ & -b & & & & & & \\ & & 0 & & & & & \\ & & & b & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & b \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} \frac{\text{ch}x}{\text{sh}x} & & & & & & & -\frac{1}{\text{sh}x} \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ -\frac{1}{\text{sh}x} & & & & & & & \frac{\text{ch}x}{\text{sh}x} \end{pmatrix}$$

et mi la matrice identité 8 × 8.

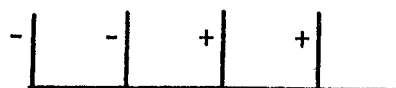
Nous demandons l'évaluation de : $\det(m) \cdot \text{sh}^4 x / (e^{i\phi})^4$ et nous obtenons le résultat (ϕ est noté phi et ω w):

$$\frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{32\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log |N(\phi, w, x)| d\phi dw$$

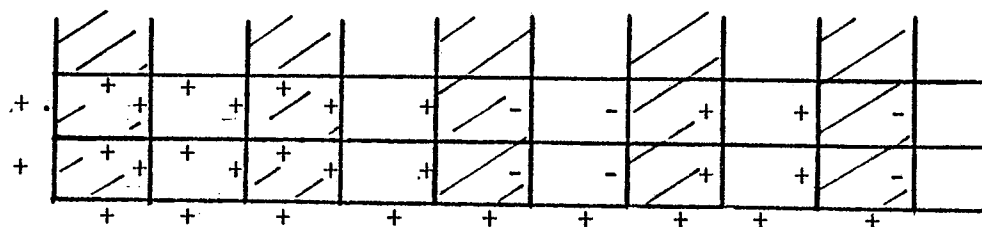
avec $N(\phi, w, x)$ donné ci-dessous :

$$2 \cdot (8 \cdot \cos(\phi)^4 \cdot \text{sh}(x)^4 - 16 \cdot \cos(\phi)^3 \cdot \text{sh}(x)^5 - 16 \cdot \cos(\phi)^3 \cdot \text{sh}(x)^3 + 8 \cdot \cos(\phi)^2 \cdot \text{sh}(x)^6 + 24 \cdot \cos(\phi)^5 \cdot \text{sh}(x) + 40 \cdot \cos(\phi)^3 \cdot \text{sh}(x)^3 + 16 \cdot \cos(\phi) \cdot \text{sh}(x)^4 + \cos(w)^4 \cdot \text{sh}(x)^6 - 10 \cdot \text{sh}(x)^6 - 25 \cdot \text{sh}(x)^4 - 24 \cdot \text{sh}(x)^2 - 3)$$

2) Deuxième exemple



ce qui correspond au modèle physique



Avec les mêmes notations que l'exemple précédent nous posons :

$$m = m_a \times m_b - m_i \cdot e^{i\phi}$$

La matrice m_b étant :

$$mb = \begin{pmatrix} -b & & & & \\ & -b & & & \\ & & 0 & & \\ & & & b & \\ 0 & & & & b \end{pmatrix}$$

Le résultat obtenu est alors :

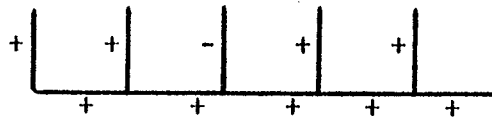
$$\frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{32\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log 2(8 \cos^4(\phi) \operatorname{sh}^4 x - 8 \cos^2 \phi \operatorname{sh}^6 x - 32 \cos^2 \phi \operatorname{sh}^4 x - 16 \cos^2 \phi \operatorname{sh}^2 x - \cos w \operatorname{sh}^4 x + 8 \operatorname{sh}^6 x + 25 \operatorname{sh}^4 x + 24 \operatorname{sh}^2 x + 8) d\omega d\phi$$

IV.3.7 - Modèles avec période horizontale 5

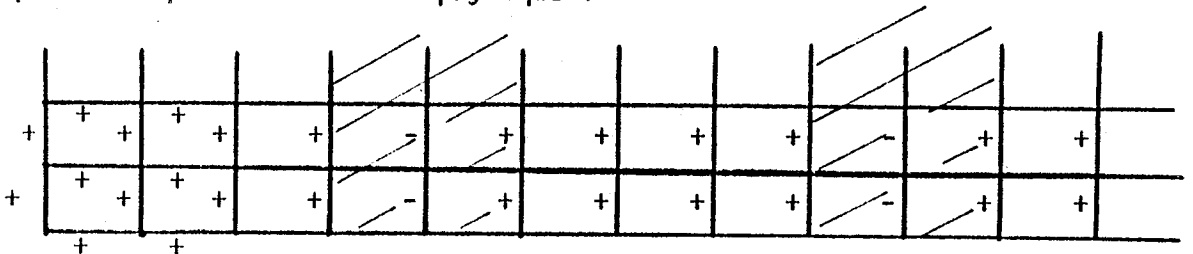
Nous avons essayé des modèles qui ont une période plus grande que 4 et qui ne semblent pas être traités en Physique.

Exemple :

Répétition du motif



ce qui correspond à un modèle physique :



Nous posons toujours $x = 2\beta$ et l'énergie limite est donnée par :

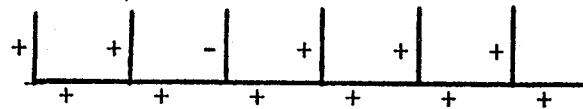
$$\frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{40\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log |N(x, \phi, w)| d\phi dw$$

où N est donné par :

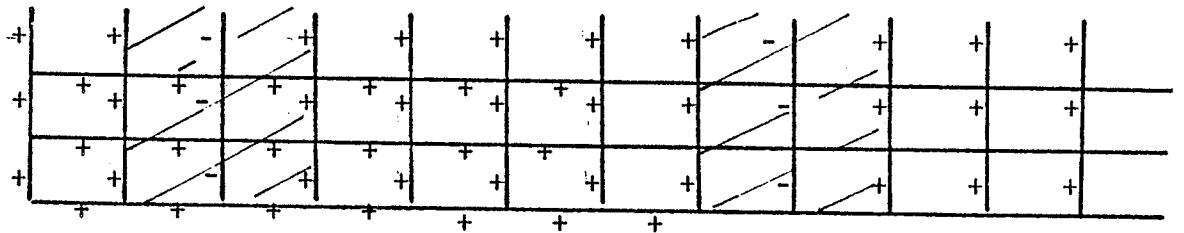
$$\begin{aligned}
 & 8 \operatorname{sh}(x) * (-2 \cos(2\phi) + 3) + 8 \operatorname{sh}(x) * (3 \cos(3\phi) - 8 \cos(\phi)) + 2 * \\
 & \operatorname{sh}(x) * (-6 \cos(4\phi) - 6 \cos(2\phi) + 65) + 2 \operatorname{sh}(x) * (\cos(5\phi) + 20 * \\
 & \cos(3\phi) - 116 \cos(\phi) - \cos(w)) + 2 \operatorname{sh}(x) * (-6 \cos(4\phi) + 18 \cos \\
 & (2\phi) + 113) + 8 \operatorname{sh}(x) * (2 \cos(3\phi) - 33 \cos(\phi)) + 8 \operatorname{sh}(x) * (4 \cos \\
 & (2\phi) + 19) - 96 \operatorname{sh}(x) * \cos(\phi) + 32
 \end{aligned}$$

IV.3.8 - Modèle à période horizontale 6

Nous proposons un exemple avec le "motif"



ce qui correspond au modèle physique.



En posant encore $x = 2\beta$ nous avons l'énergie limite :

$$\frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{48\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log |D(\phi, w, x)| dw d\phi$$

où le noyau D est :

$$\begin{aligned}
 & 10 \operatorname{sh}(x) * (2 \cos(2\phi) - 3) + 32 \operatorname{sh}(x) * (-2 \cos(3\phi) + 5 \cos(\phi)) + \\
 & 8 \operatorname{sh}(x) * (6 \cos(4\phi) + \cos(2\phi) - 45) + 16 \operatorname{sh}(x) * (-\cos(5\phi) - 9 * \\
 & \cos(3\phi) + 51 \cos(\phi)) + 2 \operatorname{sh}(x) * (\cos(6\phi) + 44 \cos(4\phi) - 124 * \\
 & \cos(2\phi) + \cos(w) - 450) + 16 \operatorname{sh}(x) * (-\cos(5\phi) - 5 \cos(3\phi) + \\
 & 89 \cos(\phi)) + 4 \operatorname{sh}(x) * (10 \cos(4\phi) - 96 \cos(2\phi) - 243) + 1024 * \\
 & \operatorname{sh}(x) * \cos(\phi) + 32 \operatorname{sh}(x) * (-5 \cos(2\phi) - 14) + 256 \operatorname{sh}(x) * \cos(\phi) -
 \end{aligned}$$

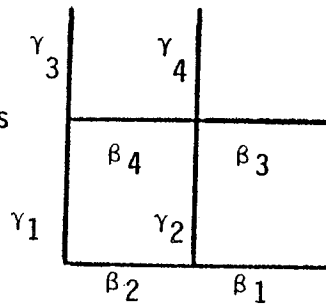
IV - MODELES A PERIODICITE 2 EN LIGNE ET COLONNE

IV.4.1 - Un modèle à paramètre multiples

Nous allons profiter de cet exemple pour montrer que l'on peut conserver formellement la valeur de certains paramètres.

Considérons le motif :

ci-contre ou les valeurs de connexions sont des paramètres



Nous avons donc : $n = 2r$ et il faut étudier :

$$\frac{1}{4r} \log \text{Trace}(C^{(2r)})^r$$

où

$$C^{(2r)} = A_1^{(2r)} B_1^{(2r)} A_2^{(2r)} B_2^{(2r)}$$

Pour obtenir des matrices qui sont des représentations spinorielles il faut remplacer $B_1^{(2r)}$ par $B_1^{(2r)} / (4 \text{sh}2\gamma_1 \cdot \text{sh}2\gamma_2)^{r/2}$ et $B_2^{(2r)}$ par $B_2^{(2r)} / (4 \text{sh}2\gamma_3 \text{sh}2\gamma_4)^{r/2}$ ce qui nous mène à l'étude de :

$$\frac{1}{8} \log \left(\prod_{k=1}^4 (2\text{sh}|2\gamma_k|) \right) + \frac{1}{16\pi} \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{r} \int_0^{2\pi} \log |\det(\tilde{D}^{(2r)} - I e^{i\phi})| d\phi$$

On peut remarquer que $\tilde{D}^{(2r)}$ est une matrice circulante par blocs 4×4 car c'est un produit de matrices circulante par blocs 4×4 . On peut écrire en posant

$$B_1 = 2\beta_1, \dots, B_4 = 2\beta_4$$

$$G_1 = 2\gamma_1, \dots, G_4 = 2\gamma_4$$

$$\tilde{D}(2r) = \begin{pmatrix} a & b & 0 & \dots & 0 & c \\ c & a & b & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c & a & \dots & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & \dots & c & a \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} d & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & d \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} a' & b' & 0 & \dots & 0 & c' \\ c' & a' & b' & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c' & a' & \dots & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & \dots & c' & a' \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} d' & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & d' & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d' & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & d' \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } a = \begin{pmatrix} \text{ch}B_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{ch}B_2 & \text{sh}B_2 & 0 \\ 0 & \text{sh}B_2 & \text{ch}B_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}B_1 \end{pmatrix} \quad b=c^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \text{sh}B_1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$a' = \begin{pmatrix} \text{ch}B_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{ch}B_4 & \text{sh}B_4 & 0 \\ 0 & \text{sh}B_4 & \text{ch}B_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{ch}B_3 \end{pmatrix} \quad b'=c'^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \text{sh}B_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$d = \begin{pmatrix} \frac{\text{ch}G_1}{\text{sh}G_1} & -\frac{1}{\text{sh}G_1} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\text{sh}G_1} & \frac{\text{ch}G_1}{\text{sh}G_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\text{ch}G_2}{\text{sh}G_2} & -\frac{1}{\text{sh}G_2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\text{sh}G_2} & \frac{\text{ch}G_2}{\text{sh}G_2} \end{pmatrix} \quad d' = \begin{pmatrix} \frac{\text{ch}G_3}{\text{sh}G_3} & -\frac{1}{\text{sh}G_3} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\text{sh}G_3} & \frac{\text{ch}G_3}{\text{sh}G_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\text{ch}G_4}{\text{sh}G_4} & -\frac{1}{\text{sh}G_4} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\text{sh}G_4} & \frac{\text{ch}G_4}{\text{sh}G_4} \end{pmatrix}$$

En développant $\det(\tilde{D}(2r) - Ie^{i\phi})$ nous avons compte tenu de certaines simplifications ($b d b' d' = 0$ $c d c' d' = 0$) :

$$\prod_{k=1}^r \det\{ (ada'd' + bdc'd' + cdb'd' - Ie^{i\phi}) + (adb'd' + bda'd') e^{\frac{2ik\pi}{r}} + (adc'd' + cda'd') e^{-\frac{2ik\pi}{r}} \}$$

Ce qui donne comme formule limite pour l'énergie

$$\begin{aligned} & \frac{1}{8} \log \left(\prod_{k=1}^4 (2 \operatorname{sh} |2\gamma_k|) \right) + \frac{1}{32\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \\ & \log |\det(ada'd' + bdc'd' + cdb'd' - Ie^{i\phi}) \\ & + (adb'd' + bda'd')e^{i\omega} \\ & + (adc'd' + cda'd')e^{-i\omega}|_{d\omega d\phi} \end{aligned}$$

Que l'on peut mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{32\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log \left| 16 \left(\prod_{k=1}^4 \operatorname{sh} 2\gamma_k \right) \det \{ (ada'd' + bdc'd' + cdb'd' + Ie^{i\phi}) \right. \\ & \left. + (adb'd' + bda'd')e^{i\omega} + (adc'd' + cda'd')e^{-i\omega} \right|_{d\omega d\phi} \end{aligned}$$

Notons $|16 dd|$ l'argument du logarithme dans l'intégrale précédente .
Le résultat donné par REDUCE pour le calcul du déterminant dd est donné
à la page suivante (avec $\phi \rightarrow \text{phi}$ et $\omega \rightarrow w$) :

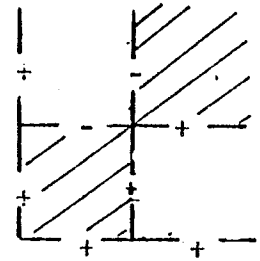
$$\begin{aligned}
CG := & - (2*\cos(\text{PHI})*\cos(\omega))*(\text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4) + \text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)* \\
& \text{SH}(G2)*\text{SH}(G3) + \text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4) + \text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G2) \\
& *\text{SH}(G3)) - (2*\cos(\text{PHI}))*(\text{CH}(E1)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G3)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G4) \\
& + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(G2)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G3) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E4)*\text{SH}(G1) \\
&)*\text{SH}(G3) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E4)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(\\
& G3) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G3)*\text{SH} \\
& (G2)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G2)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G3) + \text{CH}(G1)* \\
& \text{CH}(G4)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G3) + \text{CH}(G1)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E4)* \\
& \text{SH}(G2)*\text{SH}(G3) + \text{CH}(G2)*\text{CH}(G3)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(G2) \\
& *\text{CH}(G3)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4)) - 4*\sin(\text{PHI})^2*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2)* \\
& \text{SH}(G3)*\text{SH}(G4) + 2*\sin(\text{PHI})*\sin(\omega)*(-\text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4) + \\
& \text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G3) + \text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G4) - \text{SH}(E2) \\
& *\text{SH}(E3)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G3)) - (2*\cos(\omega))*(\text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G2)* \\
& \text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + \text{CH}(E1) \\
& *\text{CH}(E4)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E4)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)* \\
& \text{SH}(G3)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2) + \text{CH}(E2) \\
& *\text{CH}(E3)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G3)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G2)* \\
& \text{SH}(E1)*\text{SH}(E2) + \text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E2) + \text{CH}(G1) \\
& *\text{CH}(G4)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E2) + \text{CH}(G1)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + \text{CH}(G2)*\text{CH}(G3) \\
&)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E2) + \text{CH}(G2)*\text{CH}(G3)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4)) - 4*\sin(\omega)^2*\text{SH}(E1)* \\
& \text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + 2*(\text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G2)* \\
& \text{CH}(G3)*\text{CH}(G4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G3)* \\
& \text{SH}(G4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(E4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G3) \\
& + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E2)*\text{CH}(G2)*\text{CH}(G4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G2)*\text{SH}(E2) \\
&)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G3)*\text{SH}(G4) + \text{CH}(E1)*\text{CH}(E3)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E4) \\
& *\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G2)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G3)* \\
& \text{SH}(G4) + \text{CH}(E2)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2) \\
& + \text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G1)*\text{CH}(G3) + \text{CH}(E3)*\text{CH}(E4)*\text{CH}(G2)*\text{CH}(G4) + \text{CH}(\\
& G1)*\text{CH}(G2)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4)*\text{SH}(E1)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + \text{CH}(G1)*\text{CH}(\\
& G2)*\text{CH}(G3)*\text{CH}(G4) + \text{SH}(E1)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4)*\text{SH}(G1)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(\\
& G3)*\text{SH}(G4) + \text{SH}(E1)*\text{SH}(E2)*\text{SH}(E3)*\text{SH}(E4) + \text{SH}(G1)*\text{SH}(G2)*\text{SH}(G3)*\text{SH} \\
& (G4) + 1)
\end{aligned}$$

IV.4.2 - Modèle de frustration en damier

On substitue dans l'expression précédente les valeurs β ou $-\beta$:

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = -\beta_4 = \beta$$

$$\gamma_2 = \gamma_2 = \gamma_3 = -\gamma_4 = \beta$$



Et en utilisant REDUCE (avec $X = 2\beta$) :

```
FOR ALL X LET SH(-X)=-SH(X) ;
FOR ALL X LET CH(-X)=CH(X) ;
FOR ALL X LET CH(X)**2 = 1+SH(X)**2 ;
DX := SUB(B1=X,B2=X,B3=X,B4=-X,G1=X,G2=X,G3=X,G4=-X,CD) ;
4*(SH(X)**4 * SIN(PHI)**2 - 2*SH(X)**4 * SIN(PHI)*SIN(W) + SH(X)**4 * SIN(W)**2 + 4*SH(X)**4
+ 8*SH(X)**2 + 4)
```

Pour l'énergie nous avons donc le résultat ([1] [3] [8][11] [13]).

$$\frac{1}{32 \pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log 64(\text{sh}^4 x (\sin(\phi) - \sin(w))^2 + 4\text{ch}^4 x) d\phi dw$$

(on peut sans problème changer $\sin(w)$ en $-\sin(w)$).

Généralisation à d'autres réseaux et conclusion

Sans rentrer dans le détail on peut préciser que la même méthode peut s'appliquer à certains réseaux plans périodiques mais différents du réseau carré. Il suffit pour cela de se ramener au réseau carré en créant des liaisons fictives avec des valeurs particulières ($+\infty$, $-\infty$, $0, \dots$) et en normalisant.

Ce chapitre montre clairement les possibilités nouvelles offertes par l'utilisation d'un code de calcul formel. De nombreux progrès pourront être faits encore dans la manière de poser les problèmes et d'utiliser judicieusement ces codes. Si en plus des moyens de calcul plus importants sont consacrés à cette approche de très nombreux résultats nouveaux sur des modèles exacts pourront être établis et seront à leur tour générateur de nouvelles questions.

ANNEXE

THEOREME SUR LE GROUPE SPINORIEL (Notation du théorème II.2.3)ELEMENTS DE DEMONSTRATION (J. Helmstetter)

Soit $G \in \text{Spin}(\mathcal{A})$. $\text{Spin}(\mathcal{A})$ étant semi-simple il existe $G_S, G_U \in \text{Spin}(\mathcal{A})$ tel que

$$G = G_S G_U = G_U G_S, \quad G_S \text{ diagonalisable et } G_U \text{ unipotent.}$$

On peut donc remplacer G par G_S diagonalisable. Il existe une base orthonormée neutre $(N_1, N_2, \dots, N_{2m})$ telle que $N_{2p-1} \pm N_{2p}$ soit vecteur propre de G associé à $\lambda_p^{\pm 1}$.

Prenons la représentation spinorielle où :

$$N_{2r-1} \text{ opère par } C_r = 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ C \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

$$N_{2r} \text{ opère par } C_r S_r = 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ CS \ 0 \ \dots \ 0 \ 1$$

donc $\Omega_N = N_1 N_2 N_3 \dots N_{2m}$ opère par $S \ 0 \ S \ 0 \ \dots \ 0 \ S$

$$\mathfrak{F}^{\pm} = \{x : \Omega_N x = \pm x\},$$

\mathfrak{F}^+ (resp. \mathfrak{F}^-) admet pour base les :

$$f_{\tau} = f_{\tau(1)} \otimes f_{\tau(2)} \otimes \dots \otimes f_{\tau(n)}$$

τ étant une application de $\{1, 2, \dots, m\}$ dans $\{1, -1\}$,

$f_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $f_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, et τ vérifiant donc : $\tau^{-1}(-1)$ de cardinal pair (resp. impair).

Cherchons l'action de :

$$H = \exp(\mu_1 N_1 N_2 + \mu_2 N_3 N_4 + \dots + \mu_n N_{2n-1} N_{2n})$$

On regarde l'action de $\exp(\sum \mu_r S_r)$ sur C_r et $C_r S_r$ et en fait :

$$\begin{pmatrix} e^{\mu_r} & 0 \\ 0 & e^{-\mu_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \pm 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\mu_r} & 0 \\ 0 & e^{\mu_r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \pm e^{2\mu_r} \\ e^{-2\mu_r} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\exp \mu_r S_r)(C_r \mp C_r S_r) (\exp \mu_r S_r)^{-1} = e^{\pm 2\mu_r} (C_r \mp C_r S_r)$$

On peut donc, en posant $\sqrt{\lambda_r} = \exp \mu_r$, écrire :

$$G = \prod_{r=1}^n \exp(\mu_r N_{2r-1} N_{2r})$$

L'action de G est donc celle de :

$$\prod_{r=1}^n (\mathbf{1} + S_r \operatorname{sh} \mu_r)$$

L'action de G transforme donc f_τ en :

$$\prod_{r=1}^n (\sqrt{\lambda_r})^{\tau(r)} f_\tau$$

Ce qui nous donne les valeurs propres.

Pour conclure il suffit de montrer que $\Omega_N = \pm \Omega$ (Ω_N anticommute avec tous les M_i et $\Omega_N^2 = 1$ donc $\Omega_N = \pm \Omega$)

BIBLIOGRAPHIE

- [1] G. ANDRE, R. BIDAUX, J.P. CARTON, R. CONTE and L. DE SEZE
Frustration effect in 2D regular Ising model
J. Appl. Phys. 50 (11), November (1979)
- [2] H. BOERNER
Representations of groups with special considerations for the needs
of modern physics.
North Holland Publishing Company 1970.
- [3] V.V. BRYKSIN, A. Y. GOLTSEV and E.E. KUDINOV
Some exact results for the 2D Ising model with regular disposition
of frustrated squares.
J. Phys. C : Solid St. Physics., 13 (1980)
- [4] C. CHEVALLEY
Theory of lie groups. I
Princeton University Press 1946
- [5] A.C. HEARN
Reduce user's manual.
The Rand Corporation
Santa Monica, CA 90406 April 1983
- [6] J. HELMSTETTER
Séminaire de Géométrie Différentielle "Algèbres de Clifford"
Université Scientifique et Médicale de Grenoble.
Institut de Mathématiques Pures. Décembre 1973.
- [7] B. KAUFMAN
Crystal Statistics II
Partition function evaluated by spinor analysis .
Phys. Rev. Vol. 76, Number 8, 1949
- [8] L. LONGA and A.M. OLES
Rigorous properties of the two-dimensionnal Ising model
with periodically distributed frustration.
J. Phys. A : Math. Gen. 13(1980) 1031-1042.
- [9] T. MUIR
A treatise on the theory of determinants.
Dover Publications, Inc. New York.

- [10] L. ONSAGER
Crystal statistics I
A two dimensionnal model with an order disorder transition.
Phys. Rev. Vol. 65 Number 3,4 1944
- [11] R. RAMMAL
Thèse Université Scientifique et Médicale de Grenoble. 1981
- [12] J. VILLAIN
Spin glass with non random interactions
J. Phys. C : Solid State Phys., Vol. 10, 1977.

AUTORISATION DE SOUTENANCE

DOCTORAT D'ETAT

Vu les dispositions de l'article 5 de l'arrêté du 16 avril 1974,

Vu les rapports de M. N. GASTINEL

M. C. BREZINSKI

M. J. VANNIMENUS

M. BERNARD LACOLLE est autorisé à
présenter une thèse en vue de l'obtention du grade de DOCTEUR D'ETAT ES SCIENCES.

Fait à Grenoble, le 07 JUIN 1974

Le Président de l'U.S.M.G.

