

Autour de quelques modèles combinatoires de physique statistique à l'équilibre

(tiré d'anciennes notes de cours de non finalisées : fourni sans garantie !)

Jérémie Bouttier*

Cours MPRI 2.10, 2024-2025

*Sorbonne Université and Université Paris Cité, CNRS, IMJ-PRG, F-75005 Paris, France
Email : [prenom].[nom]@sorbonne-universite.fr

Avant-propos : quelques notions de théorie des graphes

De manière générale, on s'intéressera à des modèles définis sur des *graphes*. Un *graphe simple* est une paire $G = (V, E)$ où V est un ensemble dont les éléments sont appelés *sommets*, et $E \subset \mathcal{P}_2(V)$, i.e. E est un sous-ensemble de l'ensemble des paires d'éléments de V (les éléments de E sont les *arêtes* du graphe). Les deux éléments d'une arête e sont appelés ses *extrémités*. On dit que $i, j \in V$ sont *adjacents* si $\{i, j\} \in E$ (et on notera $i \sim j$), et que $i \in V$ et $e \in E$ sont *incidents* si $i \in e$. Plus généralement, on peut vouloir considérer des graphes avec des :

- *boucles* (arêtes dont les deux extrémités sont confondues) : chaque arête peut être une paire ou un singleton d'éléments de V , i.e. $E \subset \mathcal{P}_1(V) \cup \mathcal{P}_2(V)$
- *arêtes multiples* (plusieurs arêtes ayant les mêmes extrémités) : E est un multien-semble (qu'on peut voir comme une fonction $\mathcal{P}_1(V) \cup \mathcal{P}_2(V) \rightarrow \mathbb{N}$, qui à chaque paire ou singleton associe sa *multiplicité*).

De tels graphes sont parfois appelés *multigraphes*. On emploiera fréquemment la notation $\sum_{i \sim j}$ (resp. $\prod_{i \sim j}$) pour désigner une somme (resp. un produit) sur toutes les arêtes avec multiplicités éventuelles, i, j étant des variables muettes désignant les extrémités de l'arête courante. On rencontrera occasionnellement des graphes *orientés* : les arêtes ne sont plus des paires mais des couples (ou paires ordonnées) d'éléments de V distincts ou non (si boucles).

Étant donné un graphe non orienté, un *chemin* est une suite d'arêtes consécutives, ou plus formellement une suite $v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_\ell, v_\ell$ avec $v_i \in V$, $e_i \in E$, $e_i = \{v_{i-1}, v_i\}$ pour tout i . Les extrémités du chemin sont v_0 et v_ℓ , et le chemin est dit *fermé* si elles sont confondues. Un graphe est dit *connexe* si pour toute paire v, v' d'éléments de V il existe un chemin les ayant pour extrémités. Un chemin est dit *simple* s'il ne passe que par des sommets distincts, et un chemin simple fermé est appelé *cycle*. Un graphe connexe sans cycle est un *arbre*.

Étant donné un graphe $G = (V, E)$, si $E' \subset E$ alors $G' = (V, E')$ est aussi un graphe appelé *sous-graphe couvrant*. Si G' est un arbre on parle d'*arbre couvrant*. Si $V' \subset V$ alors le *sous-graphe induit* par V' est le graphe (V', E') où $E' \subset E$ est l'ensemble des arêtes dont les extrémités sont dans V' . Les sous-graphes connexes induits par des sous-ensembles maximaux de sommets sont les *composantes connexes* de G .

On s'intéressera ici principalement à des graphes qui sont des parties (typiquement finies) de réseaux réguliers. L'exemple canonique est le réseau \mathbb{Z}^d (ensemble des sommets), deux sommets étant reliés par une arête si et seulement si leur distance euclidienne est 1. Ici on s'intéressera principalement au cas $d = 2$. D'autres réseaux intéressants en dimension 2 sont le réseau triangulaire ($\mathbb{Z}[e^{i\pi/3}]$) et le réseau hexagonal ou "nid d'abeille".

[À ajouter : discuter la notion de graphe plan, de dualité.]

1 Introduction : un panorama des modèles combinatoires

1.1 Modèle d'Ising

Étant donné un graphe fini on définit le hamiltonien $H : \{-1, +1\}^V \rightarrow \mathbb{R}$ (V : sommets du graphe) par

$$H(\sigma) = -J \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

On prend $J > 0$ (modèle ferromagnétique) qu'on peut fixer à $J = 1$ sans perte de généralité. Peut être défini sur n'importe quel graphe fini, beaucoup étudié sur les parties finies de \mathbb{Z}^d ($V \subset \mathbb{Z}^d$, typiquement $\{1, \dots, N\}^d$, on a $i \sim j$ ssi $|i - j| = 1$), ici $d = 2$ sauf mention contraire.

Fonction de partition (ensemble canonique) :

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma \in \{-1, +1\}^V} e^{-\beta H(\sigma)}$$

(β : température inverse)

Probabilité de Gibbs-Boltzmann :

$$\mu_\beta(\sigma) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(\sigma)}$$

définit une mesure de probabilité sur $\Omega = \{-1, +1\}^V$. Problème mathématique non considéré ici : définir rigoureusement la limite thermodynamique $V \nearrow \mathbb{Z}^d$.

Historique

- introduit par Lenz (1920), résolu en 1D par Ising (1925)
- Peierls (30's) : existence d'une transition de phase en dimension 2 et plus
- Onsager (1944) : calcul exact de la densité d'énergie libre thermodynamique pour le réseau carré, à $h = 0$, $\beta_c = \frac{1}{2} \operatorname{asinh}(1) \simeq 0,440687$ ("facile" à voir par un argument de dualité), exposants critiques : singularité logarithmique de $f''(\beta)$ ($\alpha = 0$), $m^*(\beta) = (1 - (\sinh 2\beta)^{-4}) \propto (\beta - \beta_c)^{1/8}$ pour $\beta > \beta_c$ (Yang).
- moult résultats (généralement en dimension 2 ou en "grande" dimension, 4 ou plus – peu de résultats en dimension 3 sauf la preuve de la continuité de la transition par Aizenman, Duminil-Copin, et Sidoravicius annoncée très récemment)
- S. Smirnov (2000's) : démonstration rigoureuse de l'"invariance conforme" du modèle au point critique (hors du sujet de ce cours).

1.2 Percolation

Définition informelle “modèle d’Ising à couplage nul” = plus simple, tous les spins indépendants

Définition formelle Soit $p \in [0, 1]$, on considère la mesure sur $\{0, 1\}^V$ définie par

$$\mathbb{P}_p(\omega) = \prod_{i \in V} (p\delta_{\omega_i, 1} + (1-p)\delta_{\omega_i, 0})$$

(produit de mesures de Bernoulli de paramètre p , automatiquement normalisé : $Z = 1$).

Ici il n’y a pas de difficulté mathématique majeure à passer à un graphe/réseau infini (dénombrable), la mesure-produit reste bien définie (sur la tribu engendrée par les évènements ne dépendant que d’un nombre fini de sites/arêtes).

Motivation physique [Broadbent et Hammersley 1957] : fluide dans un milieu poreux, $\omega_i = 1$ signifie qu’il y a un pore au site i permettant au fluide de circuler (on dit alors que le site est *ouvert*, et sinon *fermé*). p est parfois appelé “porosité”.

Relation avec Ising à $J = 0$: $\omega = \frac{1+\sigma}{2} \in \{0, 1\}^V$, $p = \frac{e^{\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}}$.

Percolation par sites vs par arêtes Il existe en fait deux versions de la percolation : *par sites* et *par arêtes* (pour laquelle $\omega \in \{0, 1\}^E$, et remplacer V par E dans la définition de la mesure ci-dessus).

Exercice 1.2.1. Montrer que la percolation par arêtes sur un graphe $G = (V, E)$ se ramène à la percolation par sites sur un graphe modifié (*line graph* ou graphe adjoint) G' dont l’ensemble des sommets est E et $e, e' \in E$ sont adjacents dans G' ssi elles sont incidentes à un même sommet de G . NB : pour le réseau carré le graphe adjoint n’est plus planaire ! (croisement d’arêtes)

But Chaque configuration ω définit un sous-graphe de $G = (V, E)$:

- percolation par site : on garde seulement les sommets ouverts, et seulement les arêtes (ij) telles que i, j sont ouverts (“sous-graphe induit par les sommets ouverts”),
- percolation par arête : on garde tous les sommets, et seulement les arêtes ouvertes (“sous-graphe couvrant formé par les arêtes ouvertes”).

Par abus, on note ω ce sous-graphe.

But de la percolation : étudier les propriétés de ω , en particulier si le graphe original est infini (\mathbb{Z}^d) : existe-t-il une composante connexe infinie ? On dit alors que la configuration *percole*.

Transition de phase

Proposition 1.2.2. *pour tout réseau régulier, et chaque type de percolation, il existe $p_c \in [0, 1]$ (seuil de percolation) tel que :*

- pour $p < p_c$, presque sûrement ω ne percole pas, i.e. toutes les composantes connexes de ω sont finies (régime sous-critique),
- pour $p > p_c$, presque sûrement ω percole i.e. il existe (au moins) une composante connexe infinie (régime sur-critique).

C'est intuitivement clair car lorsque p augmente, on augmente la taille des composantes connexes de ω . Plus rigoureusement, soit A l'évènement " ω percole" :

- par la loi du 0-1, on peut montrer que, pour tout p , $\mathbb{P}_p(A) = 0$ ou 1 pour tout p (exercice pour ceux qui ont fait le cours d'intégration-proba).
- par un argument de monotonie (qu'on reverra), $p \mapsto \mathbb{P}_p(A)$ est croissant.

Il s'ensuit qu'il existe p_c tel que $\mathbb{P}_p(A) = 0$ pour $p < p_c$ et $\mathbb{P}_p(A) = 1$ pour $p > p_c$.

Exercice 1.2.3. Montrer que $p_c = 1$ sur \mathbb{Z} .

Remarque 1.2.4. Pour $p = p_c$ (régime critique) on ne connaît pas la valeur (0 ou 1) de $\mathbb{P}_p(A)$. En dimension 2 on sait montrer dans plusieurs cas qu'elle vaut 0. En dimension 3 c'est un problème ouvert.

	Réseau	site	arêtes
Quelques seuils :	carré	$\simeq 0,5927$	$1/2$
	triangulaire	$1/2$	$2 \sin(\pi/18) \simeq 0,3473$
	hexagonal	$\simeq 0,6970$	$1 - 2 \sin(\pi/18) \simeq 0,6527$

Densité de l'amas infini On note $x \leftrightarrow y$ si x et y sont deux sommets dans une même composante connexe du sous-graphe associé à ω . On note $x \leftrightarrow \infty$ si x est dans une composante connexe infinie.

Définition 1.2.5. La densité de l'amas infini est

$$\theta(p) = \mathbb{P}_p(x \leftrightarrow \infty)$$

(elle est indépendante de x par invariance par translation).

On a $\theta(p) = 0$ pour $p < p_c$ et $\theta(p) > 0$ pour $p > p_c$. Lorsque $p \searrow p_c$, $\theta(p) \propto (p - p_c)^\beta$ avec $\beta = 5/36$ pour \mathbb{Z}^2 (exposant supposé universel). $\beta = 1$ pour $d \geq 6$, pas connu exactement pour $d = 3, 4, 5$.

Dans ce cours on essaiera de démontrer rigoureusement que $p_c = 1/2$ pour la percolation par arêtes sur le réseau carré \mathbb{Z}^2 (théorème de Harris-Kesten). Ce n'est pas trivial bien qu'intuitivement évident par "dualité"...

Allons maintenant vers des généralisations du modèle d'Ising.

1.3 Modèle de Potts

C'est une généralisation du modèle d'Ising dans laquelle les spins peuvent prendre un nombre arbitraire q de valeurs (au lieu de 2).

Une référence sur certains aspects combinatoires du modèle de Potts est l'article de Sokal *The multivariate Tutte polynomial (alias Potts model) on graphs and matroids*.

On considère un entier $q \geq 1$ et l'hamiltonien $H : \{1, \dots, q\}^V \rightarrow \mathbb{R}$ défini par

$$H(\eta) = - \sum_{i \sim j} \delta_{\eta_i, \eta_j} - \sum_i f(\eta_i)$$

(cas ferromagnétique, les f sont des “champs”). On retrouve Ising dans le cas $q = 2$ (en effet pour $\sigma \in \{\pm 1\}^V$, prendre $\eta = (3 + \sigma)/2 \in \{1, 2\}^V$, et on a $\sigma_i \sigma_j = 2\delta_{\eta_i, \eta_j} - 1$, le facteur 2 peut être réabsorbé dans la température inverse β , le -1 n'affecte pas la mesure de probabilité). On définit la fonction de partition et la mesure de Gibbs-Boltzmann (en taille finie) comme dans le cas du modèle d'Ising.

Il faut à nouveau prendre la limite thermodynamique pour observer des transitions de phase. Qualitativement, la situation est analogue au modèle d'Ising : pour $\beta > \beta_c$ et $f = 0$, «une couleur l'emporte» (brisure spontanée de symétrie). Cependant, le type de transition varie avec q : il existe q_c (dépendant de la dimension, égal à 4 en dimension 2) tel que

- la transition est du second ordre pour $q \leq q_c$ (avec des exposants critiques universels dépendant de d et q)
- la transition devient du premier ordre pour $q > q_c(d)$.

Pour le réseau carré, on connaît la valeur exacte $\beta_c(q)$ par un argument de dualité, et c'est rigoureusement démontré depuis peu [Beffara et Duminil-Copin 2012].

FK-percolation le modèle de Potts peut être reformulé comme une généralisation de la percolation par arêtes, la *FK-percolation*, nommée d'après Fortuin et Kasteleyn (en anglais on parle souvent de *random cluster model*). Pour simplifier on se place en champ nul, $f = 0$, et on écrit

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sum_{\eta \in \{1, \dots, q\}^V} e^{\beta \sum_{i \sim j} \delta_{\eta_i, \eta_j}} = \sum_{\eta \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{i \sim j} e^{\beta \delta_{\eta_i, \eta_j}} \\ &= \sum_{\eta \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{i \sim j} (1 + v \delta_{\eta_i, \eta_j}) \quad \text{où } v := e^\beta - 1 \\ &= \sum_{\eta \in \{1, \dots, q\}^V} \sum_{\omega \in \{0, 1\}^E} \prod_{\substack{i \sim j \\ (ij) \in E'}} v \delta_{\eta_i, \eta_j} \\ &= \sum_{\omega \in \{0, 1\}^E} v^{|\omega|} \sum_{\eta \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{\substack{i \sim j \\ (ij) \in E'}} \delta_{\eta_i, \eta_j} \quad \text{où } |\omega| := \sum_{e \in E} \omega_e \\ &= \sum_{\omega \in \{0, 1\}^E} v^{|\omega|} q^{C(\omega)} \end{aligned}$$

où $C(\omega)$ est le nombre d'amas, i.e. de composantes connexes du graphe associé à ω (comme dans la percolation par arêtes).

En introduisant $p = 1 - e^{-\beta} = v e^{-\beta}$, on peut réécrire

$$e^{-\beta|E|} Z(\beta) = \sum_{\omega \in \{0, 1\}^E} q^{C(\omega)} \prod_{e \in E} (p \delta_{\omega_e, 1} + (1 - p) \delta_{\omega_e, 0})$$

qui peut être vue comme la fonction de partition associée à la mesure

$$\mathbb{P}_{p,q}(\omega) \propto q^{C(\omega)} \prod_{i \in V} (p\delta_{\omega_i,1} + (1-p)\delta_{\omega_i,0}).$$

Pour $q = 1$ on retrouve la percolation par arête ci-dessus. Dès que $q \neq 1$, les ω_i ne sont plus des variables aléatoires indépendantes (à cause du $q^{C(\omega)}$), et il faut normaliser (Z est non-trivial). On peut observer que la FK-percolation reste bien définie pour des valeurs non-entières de q ! En particulier, dans une certaine limite $q \rightarrow 0$, on obtient les arbres couvrants (cf plus loin).

Du point de vue des transitions de phase, la brisure de symétrie spontanée dans le modèle de Potts se réinterprète comme une transition de percolation dans le modèle FK (apparition d'un amas infini). Cela se voit plus précisément en observant que l'aimantation spontanée du modèle de Potts (à définir pour $q \neq 2$) est égale à $\mathbb{P}_{p,q}(0 \leftrightarrow \infty)$...

En termes probabilistes savants, le lien entre modèle de Potts et FK-percolation est un couplage :

Définition 1.3.1. Soient $(\Omega_1, \mathcal{A}_1, P_1)$ et $(\Omega_2, \mathcal{A}_2, P_2)$ deux espaces de probabilités. On dit qu'une mesure de probabilité P sur $(\Omega_1 \times \Omega_2, \mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2)$ est un *couplage* entre P_1 et P_2 si

$$P(\cdot \times \Omega_2) = P_1(\cdot), \quad P(\Omega_1 \times \cdot) = P_2(\cdot)$$

Ici le couplage est la *mesure de Edwards-Sokal* sur $\{1, \dots, q\}^V \times \{0, 1\}^E$ donnée par

$$P_{\text{ES}}(\eta, \omega) \propto \prod_{i \sim j} ((1-p)\delta_{\omega_{(ij)},0} + p\delta_{\omega_{(ij)},1}\delta_{\eta_i,\eta_j})$$

1.4 Modèle $O(n)$ et marches auto-évitantes

Modèle $O(n)$ = généralisation du modèle d'Ising dans lequel "les spins ont n composantes"

À chaque site du réseau on associe un spin (dipôle magnétique) dans

$$S^{n-1} = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n, x_1^2 + \dots + x_n^2 = 1\} = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^n, \vec{x} \cdot \vec{x} = 1\}$$

L'hamiltonien $H : (S^{n-1})^V \rightarrow \mathbb{R}$ est défini par

$$H(\vec{\sigma}) = -J \sum_{i \sim j} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{\sigma}_i.$$

À $\vec{h} = \vec{0}$, on a une invariance par rotation/réflexion globale des spins : symétrie $O(n)$.
Fonction de partition

$$Z(\beta) = \int_{(S^{n-1})^V} \left(\prod_{i \in V} d\mu(\vec{\sigma}_i) \right) e^{-\beta H(\vec{\sigma})}$$

où μ est la mesure invariante sur S^{n-1} . Fonctions de corrélation :

$$\langle F(\vec{\sigma}) \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \int_{(S^{n-1})^V} \left(\prod_{k \in V} d\mu(\vec{\sigma}_k) \right) e^{-\beta H(\vec{\sigma})} F(\vec{\sigma}).$$

Fonction à un point : $F(\vec{\sigma}) = \vec{\sigma}_i$, fonction à deux points : $F(\vec{\sigma}) = \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$, pour $i, j \in V$.

Quelques cas particuliers :

- $n = 1$: Ising
- $n = 2$: modèle XY
- $n = 3$: modèle de Heisenberg classique

Transitions de phase Comme dans le modèle d'Ising, il faut passer à la limite thermodynamique pour espérer observer une transition de phase. Question : comme dans le modèle d'Ising, peut-on avoir

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{|V| \rightarrow \infty} \langle \vec{\sigma}_i \rangle \neq \vec{0}? \quad (\vec{h} = h\vec{e}_1)$$

Réponse : non pour $d = 2$ et $n \geq 2$ (théorème de Mermin-Wagner : pas de brisure spontanée de symétrie continue en dimension ≤ 2). Pour $n = d = 2$ (modèle XY), il existe cependant une transition de phase dite de *Kosterlitz-Thouless* :

- pour $\beta < \beta_c$, $\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\xi(\beta)}$ pour $|i-j| \rightarrow \infty$, avec $\xi(\beta) > 0$,
 - pour $\beta \geq \beta_c$, $\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle \propto |i-j|^{-\eta(\beta)}$ pour $|i-j| \rightarrow \infty$, avec $\eta(\beta) > 0$ (*quasi-ordre*).
- (comme avant, par \propto , on entend que les log sont asymptotiquement équivalents). Cette transition est d'“ordre infini”, i.e. l'énergie libre thermodynamique est non-analytique mais C^∞ .

Modèle de boucles En dimension 2, on a donc une transition de phase pour $n = 1$ ou 2. En fait, on a une transition de phase pour tout $n \in [0, 2]$! Ce qui paraît une boutade peut en fait être énoncé précisément en reformulant le modèle $O(n)$ comme un modèle de boucles, ce qui nous ramène de plus dans le cadre des modèles combinatoires. Suivant Domany *et al.* (1981), il est plus simple de considérer un hamiltonien légèrement modifié (toujours à symétrie $O(n)$) :

$$H(\vec{\sigma}) = - \sum_{i \sim j} \ln(1 + x \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j)$$

et on prendra $\beta = 1$, le paramètre x jouant un rôle analogue à la température inverse (on se place en champ magnétique nul et on suppose $|x|$ assez petit de tel sorte que $1 + x \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$ soit toujours positif). Selon le principe d'universalité cela ne devrait pas affecter les propriétés critiques du modèle. La fonction de partition se réécrit alors :

$$\begin{aligned} Z &= \int_{(S^{n-1})^V} \prod_{i \in V} d\mu(\vec{\sigma}_i) \prod_{i \sim j} (1 + x \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j) \\ &= \sum_{E' \subset E} x^{|E'|} \int_{(S^{n-1})^V} \prod_{i \in V} d\mu(\vec{\sigma}_i) \prod_{\substack{i \sim j \\ (ij) \in E'}} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \end{aligned}$$

En utilisant la symétrie de la mesure μ par $\vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}$, on voit que la contribution d'un E' est nulle dès lors qu'il existe un sommet de V incident à un nombre impair d'arêtes dans E' . On suppose à présent le graphe 3-régulier (tout sommet a 3 arêtes incidentes), c'est le cas du réseau hexagonal. Les seules configurations d'arêtes ayant une contribution non-nulle sont celles où chaque sommet est incident à 0 ou 2 arêtes de E' : E' définit une configuration de *boucles* (ensemble de cycles disjoints) sur le réseau hexagonal. La contribution d'une telle configuration se factorise boucle par boucle (l'intégration sur les spins des sites n'appartenant à aucune boucle donne 1). Pour une boucle visitant des sites i_1, i_2, \dots, i_ℓ , on a un poids :

$$\int_{(S^{n-1})^\ell} d\mu(\vec{\sigma}_{i_1}) \cdots d\mu(\vec{\sigma}_{i_\ell}) \sigma_{i_1}^{\alpha_1} \sigma_{i_2}^{\alpha_1} \sigma_{i_2}^{\alpha_2} \sigma_{i_3}^{\alpha_2} \cdots \sigma_{i_\ell}^{\alpha_\ell} \sigma_{i_1}^{\alpha_\ell} \quad (b)$$

où l'on somme sur les indices $\alpha_{i_1}, \dots, \alpha_{i_\ell} \in \{1, \dots, n\}$ répétés. En utilisant l'invariance de μ par rotation/réflexion orthogonale on a

$$\int_{S^{n-1}} d\mu(\vec{\sigma}) \sigma^\alpha \sigma^{\alpha'} = \begin{cases} \frac{1}{n} \int_{S^{n-1}} d\mu(\vec{\sigma}) \vec{\sigma}^2 = \frac{1}{n} & \text{pour } \alpha = \alpha' \\ 0 & \text{sinon (invariance par réflexion selon } \vec{e}_\alpha) \end{cases}$$

$$= \frac{\delta_{\alpha, \alpha'}}{n}$$

ce qui implique que l'intégrale (b) associée à une boucle de longueur ℓ vaut $n^{1-\ell}$. On réécrit ainsi la fonction de partition comme

$$Z = \sum_C \left(\frac{x}{n}\right)^{|C|} n^{L(C)} \quad (\diamond)$$

où la somme porte sur les configurations de boucles C sur le réseau hexagonal, $|C|$ étant le nombre d'arêtes couvertes et $L(C)$ le nombre de boucles. (\diamond) définit la fonction de partition d'un modèle de boucles, où n apparaît comme un simple paramètre pouvant prendre des valeurs positives non-entières.

Exercice 1.4.1. Montrer que la fonction de corrélation $\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle$ se réécrit comme une somme portant sur des configurations formées de boucles et d'un chemin ouvert reliant i à j , tous disjoints (sauf éventuellement en i, j).

Exercice 1.4.2. Reformuler la correspondance comme un couplage entre le modèle de spins original et le modèle de boucles.

Remarque 1.4.3. Pour $n = 1$, on peut voir les boucles comme les interfaces (ou parois de domaine) entre des spins ± 1 vivant sur le réseau dual (triangulaire). Le modèle est ainsi équivalent au modèle d'Ising sur réseau triangulaire, $x = e^{-2\beta J}$ (en développement basse-température à présent!). À $x = 1$ on retrouve la percolation par site sur réseau triangulaire.

Transition de phase à $n \leq 2$ Nienhuis (80's) a montré par des arguments "exacts mais non-rigoureux" que, pour tout $n \in [0, 2]$ (en fait $n \in [-2, 2]$), le modèle possède une transition de phase du 2ème ordre à $x_c(n) > 0$. Qualitativement :

- pour $x < x_c(n)$, les boucles sont “petites” (*phase diluée*),
- pour $x > x_c(n)$, les boucles sont “grandes” (*phase dense*).

Il a également donné la valeur exacte de tous les exposants critiques (universels), et de $x_c(n) = 1/\sqrt{2 + \sqrt{2 - n}}$ pour le réseau hexagonal. Dans le cas $n = 1$, on obtient la température critique $\beta_3 = (\log 3)/4$ du modèle d’Ising sur réseau triangulaire. Dans le cas $n = 0$, la valeur a été confirmée rigoureusement par Duminil-Copin et Smirnov.

Marches auto-évitantes Une limite particulièrement intéressante est la limite $n \rightarrow 0$ (avec x/n constant) : on a $Z = 1$ mais dZ/dn est une somme sur les configurations à une boucle i.e. les chemins auto-évitants fermés (comptés avec un poids $x^{|C|}$). Par l’exercice ci-dessus, la fonction de corrélation $\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle$ compte les chemins auto-évitants ouverts reliant i à j (ou *marches auto-évitantes* de i à j , *SAW*). On peut en fait montrer que cette relation est également vraie dans le modèle $O(n)$ original, quel que soit le réseau [De Gennes, 1972].

Définition 1.4.4 (plus formelle). Une *marche* de longueur L est une suite $(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_L)$ de sommets telle que $\gamma_i \sim \gamma_{i-1}$ pour tout $i \in [1, L]$. Elle dit *auto-évitante* si les γ_i sont tous distincts, sauf éventuellement $\gamma_0 = \gamma_L$ pour une *boucle* auto-évitante.

On se place sur un réseau régulier avec une origine O , et on note

$\mathcal{C}_L(i)$: ensemble des marches auto-évitantes γ de longueur L telles que $\gamma_0 = O$, $\gamma_n = i$

et

$$c_L = \bigcup_{i \in V} \mathcal{C}_L(i), \quad c_L(i) = |\mathcal{C}_L(i)|, \quad c_L = |\mathcal{C}_L|.$$

c_L a une définition combinatoire très simple mais on s’attend à ce qu’il n’ait aucune formule “simple”!

Lien avec modèle $O(n = 0)$ Informellement :

$$G_z(i) := \sum_{L \geq 0} c_L(i) z^L = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \lim_{\substack{n \rightarrow 0 \\ x = zn}} \frac{\langle \vec{\sigma}_O \cdot \vec{\sigma}_i \rangle}{n}$$

(en toute rigueur, le membre de gauche n’est bien défini que pour x assez petit). Susceptibilité :

$$\chi(z) = \sum_{i \in V} G_z(i) = \sum c_n z^n$$

Constante de connectivité On a

$$c_{n+m} \leq c_n c_m$$

(facile à voir, utilise l’invariance par translation/transitivité du graphe)

Lemme 1.4.5 (sous-additivité/Fekete). *Si une suite $(a_n)_{n \geq 1}$ est sous-additive ($a_{n+m} \leq a_n + a_m$) alors*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} = \inf_{n \geq 1} \frac{a_n}{n}$$

(la limite existe, elle vaut éventuellement $-\infty$).

Démonstration. Il suffit de montrer que pour tout k

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n} \leq \frac{a_k}{k}$$

car en prenant l'inf sur $k \geq K$, pour $K \rightarrow \infty$: $\limsup \leq \liminf$ donc \lim existe, $K = 0$ donne ensuite ce qu'on veut. Pour prouver cette dernière identité on fixe k et on pose $A_k = \max_{1 \leq r < k} a_r$. Pour tout n on a $n = jk + r$, $r < k$. Par sous-additivité

$$a_n \leq ja_k + a_r \leq \frac{n}{k}a_k + A_k$$

d'où

$$\frac{a_n}{n} \leq \frac{a_k}{k} + \frac{A_k}{n}$$

et on prend $n \rightarrow \infty$. □

En appliquant ce lemme à $a_n = \log c_n$ on déduit que

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n^{1/n} \text{ existe.}$$

C'est la *constante de connectivité*, dépendant du réseau. Ainsi λ^{-1} est le rayon de convergence de $\chi(x)$, et en fait de tous les $G_x(i)$.

Exemple 1.4.6. — Réseau carré \mathbb{Z}^2 : on n'en connaît pas la valeur exacte. Clairement $2^n \leq c_n \leq 4 \cdot 3^n$ donc $\lambda \in [2, 3]$. Stratégies plus fines : borne sup en énumérant toutes les marches jusqu'à n assez grand, borne inf en considérant certaines familles de SAW plus restreintes mais qu'on sait compter. Meilleures bornes connues :

$$\lambda \in [2.625622, 2.679193]$$

[resp. Jensen 2004, Pönitz-Tittman] Conjecture : λ est racine de $13\lambda^4 - 7\lambda^2 - 581$.

— Réseau hexagonal : $\sqrt{2}^n \leq c_n \leq 3 \cdot 2^n$ donc $\lambda \in [\sqrt{2}, 2]$, en fait $\lambda = \sqrt{2 + \sqrt{2}}$
[Duminil-Copin Smirnov]

Exposants critiques Conjecture :

$$c_n \sim A\lambda^n n^{\gamma-1}$$

avec $\gamma = 43/32$ en 2D [Nienhuis] Autres exposants...

1.5 Dimères, arbres couvrants

Définition 1.5.1. Étant donné un graphe $G = (V, E)$, un sous-ensemble d'arêtes $E' \subset E$, et le sous-graphe couvrant associé $G' = (V, E')$:

- On dit que E' forme une configuration de *dimères* (en terminologie de théorie des graphes : *couplage parfait/perfect matching*) si chaque sommet de V est incident à exactement une arête dans E' . (Lorsque chaque sommet de V est incident à au plus une arête de E' , on parle de configuration de monomères-dimères/couplage (partiel)/(partial) matching.)
- On dit que G' est une *forêt* s'il ne contient aucun cycle. Si de plus G' est connexe, on dit que c'est un *arbre couvrant* de G .

On se donne ensuite une fonction $E \rightarrow \mathbb{R}_+$, $e \mapsto z_e$ (fugacités) et, pour $E' \subset E$, on définit

$$z_{E'} = \prod_{e \in E'} z_e.$$

(physiquement $z_e = e^{-\beta\mu_e}$ où μ_e est une "énergie" ou potentiel chimique, $z_{E'}$ est le poids de Boltzmann associé à la configuration E' ...). On définit la fonction de partition du modèle de dimères (resp. des arbres couvrants) par

$$Z = \sum_{E'} z_{E'}$$

où la somme porte sur l'ensemble des configurations de dimères sur G (resp. d'arbres couvrants de G). Lorsque $Z > 0$ on peut définir une mesure de probabilité par $P(E') = z_{E'}/Z$.

Remarque 1.5.2. Si on prend la somme portant sur tous les ensembles de sous-arêtes E' , et $z_e = p/(1-p)$ pour tout e , on retrouve la percolation par arêtes de porosité p .

Remarque 1.5.3. Pour E' une configuration de dimères (resp. un sous-arbre couvrant) on a $|E'| = |V|/2$ (resp. $|E'| = |V| - 1$). Il s'ensuit que multiplier z_e par une constante ne modifie pas la mesure de probabilité associée. Pour $z_e = 1$ on obtient la mesure uniforme. Plus généralement, sur les réseaux réguliers, on va typiquement prendre z_e dépendant de l'"orientation" de e (verticale/horizontale sur réseau carré, etc.).

Motivations En physique, modéliser l'adsorption de molécules diatomiques sur un substrat [Kasteleyn, Temperley, Fisher 60's]. Des motivations combinatoires car il y a des identités remarquables que nous allons énoncer. Et cela permet de résoudre le modèle d'Ising 2D...

- À G muni de $(z_e)_{e \in E}$ (graphe pondéré), on associe classiquement deux matrices :
- la *matrice d'adjacence* $A = (A_{ij})_{i,j \in V}$ définie par $A_{ij} = z_{(ij)}$ si $i \sim j$, 0 sinon,
 - le *laplacien* $L = (L_{ij})_{i,j \in V}$ défini par $L_{ij} = -A_{ij}$ si $i \neq j$, $\sum_{k \neq i} A_{ik}$ si $i = j$.

Théorème 1.5.4 (Théorème de Kirchhoff ou *matrix-tree theorem*). *Soit (G, z) un graphe pondéré connexe. Alors son laplacien L possède exactement $|V| - 1$ valeurs propres non nulles $\lambda_1, \dots, \lambda_{|V|-1}$ et la fonction de partition des arbres couvrants sur G est donnée*

par

$$\frac{1}{|V|} \prod_{i=1}^{|V|-1} \lambda_i.$$

(En fait cette quantité est égale à n'importe quel mineur principal de taille $|V| - 1$ de L .)

Ceci permet également de compter les configurations de dimères pour une certaine famille de graphes planaires \mathcal{G} (comprenant les parties rectangulaires du réseau carré) car, pour $G \in \mathcal{G}$, il existe une bijection (dite de *Temperley*) entre l'ensemble des configurations de dimères sur G et l'ensemble des arbres couvrants sur un graphe \tilde{G} . Plus généralement on a le :

Théorème 1.5.5 (Kasteleyn). *Si G est planaire, il existe une fonction $\epsilon : V^2 \rightarrow \{\pm 1\}$ antisymétrique ($\epsilon(i, j) = -\epsilon(j, i)$) i.e. une orientation de G telle que la fonction de partitions des configurations de dimères sur G est donnée par le pfaffien*

$$\text{Pf}(K) := \sqrt{\det K}$$

où $K = (K_{ij})_{i,j \in V}$ est la matrice de Kasteleyn définie par $K_{ij} = \epsilon(i, j)A_{ij}$.

Remarque 1.5.6. Si $|V|$ est impair, il n'existe pas de configuration de dimères, ce qui est cohérent avec le fait que le déterminant de toute matrice antisymétrique de taille impaire est nul.

Remarque 1.5.7. Un corollaire des théorèmes de Kirchhoff/Kasteleyn est que les fonctions de partitions des arbres/dimères peuvent être calculées en temps polynomial en la taille du graphe.

Lien entre le modèle d'Ising 2D en champ nul et un modèle de dimères (graphe de Fisher) \rightarrow solution de Onsager.

Par ailleurs, ces outils permettent d'étudier les propriétés statistiques des dimères (probabilité que certaines arêtes soient couvertes, etc.).

1.6 Et tout le reste

Parmi tout ce qu'on laissera de côté :

- gaz sur réseaux, en particulier carrés/hexagones durs ; animaux dirigés et compagnie ; moult variantes de la percolation,
- théorie des modèles exactement solubles (cf Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*), en particulier le modèle de la glace carrée (6 vertex) et variantes, modèles (Restricted)-Solid-On-Solid...
- marottes personnelles : cartes aléatoires, physique statistique sur réseaux aléatoires 2D.

2 Modèles de dimères

Ici, on s'intéresse à des modèles où on peut calculer de manière exacte la fonction de partition et plein d'autres quantités. Ce sera l'occasion d'introduire de jolies méthodes de combinatoire (ayant un pendant en physique théorique : les «fermions libres», liés à l'algèbre extérieure).

Références (pour les parties 2.4 et 2.5) :

- B. McCoy and T.T. Wu, *The two-dimensional Ising model*, Harvard University Press, 1973 (chapitres IV et V)
- M. Aigner, *A course in enumeration*, Springer, 2007 (chapitre 10)

2.1 Introduction

Définition d'une configuration de dimères.

Cas particulier des dimères sur le réseau carré et le réseau hexagonal : représentation «duale» en termes de pavages par dominos ou losanges.

Autres codages ? Fonctions de hauteur, chemins évitants, systèmes de particules, partitions planes, mers de Fermi...

2.2 Dominos et arbres couvrants

On considère des dimères sur une portion rectangulaire du réseau carré. Clairement, il existe une configuration de dimères ssi l'un des côtés du rectangle est de taille paire (ici, par «taille» on entend le nombre de sites, et non d'arêtes). On va en fait également considérer le cas d'un rectangle ayant ses deux côtés de taille impaire, en «mangeant» un des coins (p.ex. le supérieur droit).

Bijection de Temperley La bijection de Temperley associe à une configuration de dimères sur un rectangle un arbre couvrant sur un rectangle deux fois plus petit.

Il est en fait plus simple de commencer par considérer le cas d'un rectangle de côtés impairs, $(2M + 1) \times (2N + 1)$, où le coin supérieur droit reste vacant. Le réseau carré étant biparti, on peut colorier alternativement les sommets en noir et blanc, mettons avec les coins en blanc, cf figure 2.3(a). L'ensemble des sommets blancs formant lui-même un réseau carré tourné de 45 degrés, on peut à nouveau le scinder en deux. Pour ne pas introduire de couleurs supplémentaires, on va utiliser les termes *impair* et *pair*. Mettons que la *grille blanche impaire* correspond au sous-réseau contenant les coins (de taille $(M + 1) \times (N + 1)$), et la *grille blanche paire* à l'autre sous-réseau (de taille $M \times N$). Il est commode de compléter la grille paire en ajoutant un sommet «externe» et en y

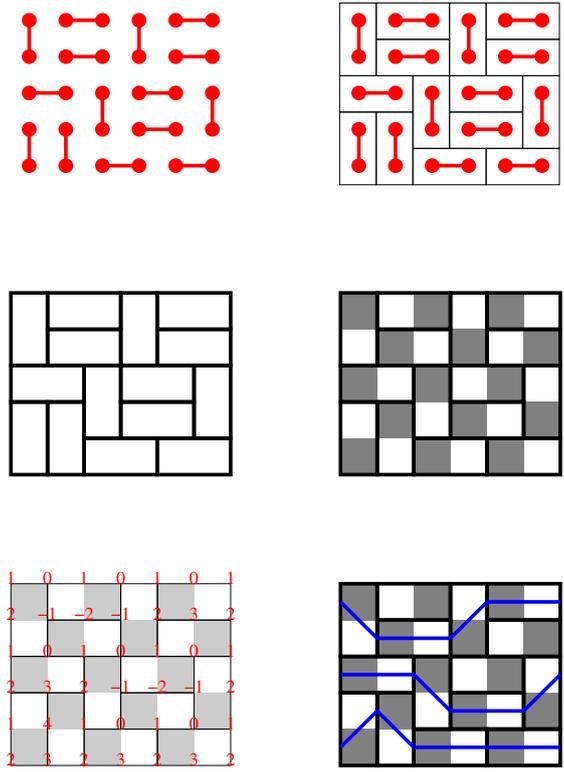


FIGURE 2.1 – Une configuration de dimères sur une grille rectangulaire, associée à un pavage d'un rectangle par des dominos, une fonction de hauteur, et une configuration de chemins non-intersectants

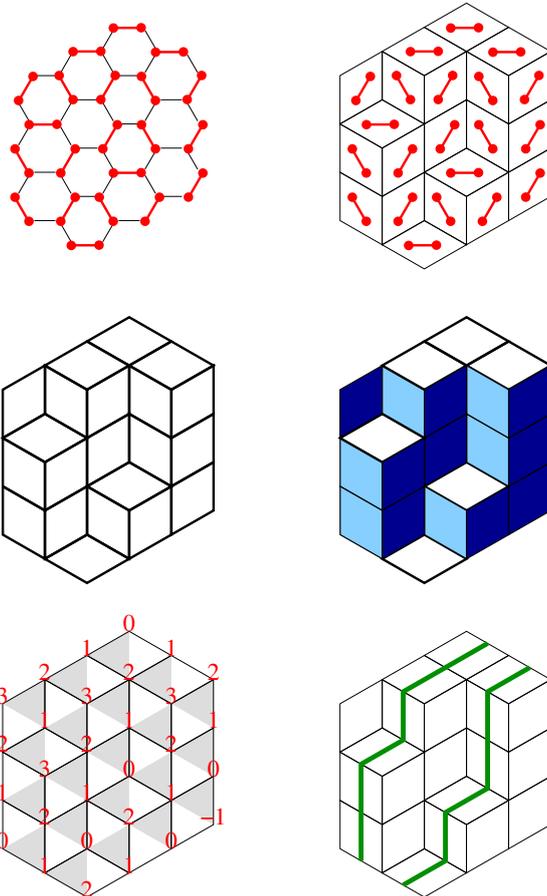


FIGURE 2.2 – Une configuration de dimères sur une grille hexagonale, associée à un pavage de l'hexagone par des losanges, qu'on peut voir comme des «boîtes» empilées, fonction de hauteur, et configuration de chemins non-intersectants

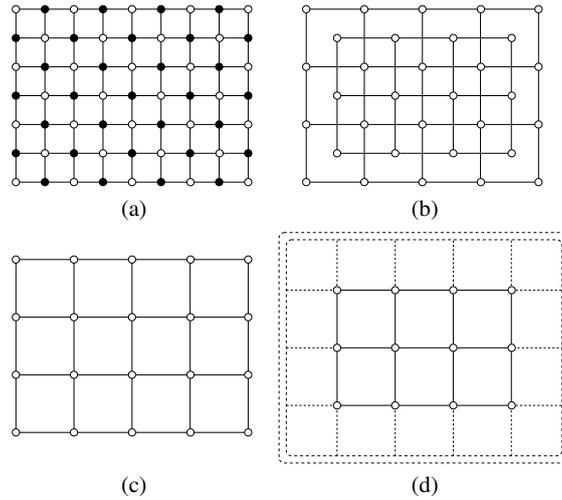


FIGURE 2.3 – Définition des grilles blanches impaire (c) et paire (d)

reliant tous les sommets sur le bord (deux fois dans le cas des coins). De cette manière, la grille impaire et la grille paire sont duales l'une à l'autre.

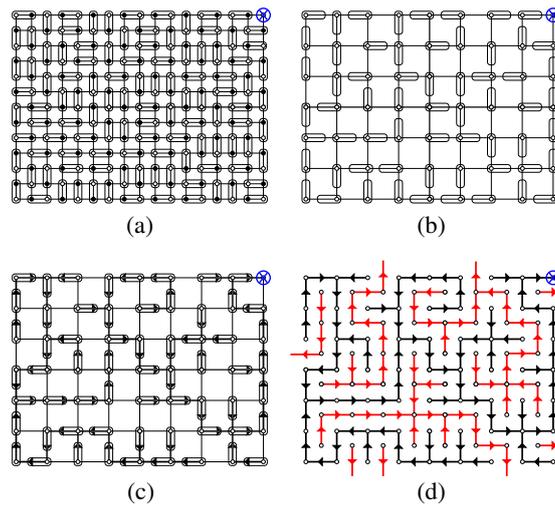


FIGURE 2.4 – D'une configuration de dimères à un arbre couvrant.

On considère à présent une configuration de dimères sur le rectangle $2M + 1 \times 2N + 1$ laissant vacant le coin supérieur droit, cf figure 2.4(a). On effectue alors la construction suivante : on ne conserve que les dimères recouvrant un sommet blanc impair, cf figure 2.4(b). On remplace ensuite chaque dimère par une «flèche» pointant dans la même direction, cf figure 2.4(c). On considère alors le sous-graphe orienté de la grille blanche formé par les flèches.

Proposition 2.2.1. *Cette construction définit une bijection entre :*

- configurations de dimères sur le rectangle $(2M + 1) \times (2N + 1)$ laissant vacant le coin supérieur droit,
- arbres couvrants sur la grille blanche impaire $(M + 1) \times (N + 1)$, où chaque arête de l'arbre est orientée en direction de la racine (coin supérieur droit).

Démonstration. Vérifions d'abord que l'objet obtenu est bien un arbre couvrant. D'une part, par construction, de chaque sommet il part une unique arête sortante, sauf de la racine d'où il ne part aucune arête. On peut voir le graphe comme celui d'une *application* de l'ensemble des sommets blancs impairs dans lui-même, dont la racine est point fixe, et qui à tout autre sommet associe un sommet adjacent (éventuellement la racine). Si on considère la suite des images successives d'un sommet donné par des itérées de l'application (i.e. on suit les flèches), deux choses peuvent se passer :

- soit on termine sur un point fixe,
- soit on tombe sur un cycle de longueur > 1 .

En fait le second cas est exclu, comme on peut voir en revenant aux dimères : un cycle correspondrait à une "boucle" de dimères sur le graphe de départ. Il est facile de voir qu'une telle boucle délimiterait une région contenant un nombre impair de sommets (p.ex. par récurrence sur l'aire couverte par la boucle), donc non-couvrable par des dimères. On a donc un sous-graphe acyclique. Il est de plus connexe car le seul point fixe est la racine. C'est donc un arbre.

La bijectivité se démontre en exhibant la construction réciproque. Partons d'un arbre couvrant, et considérons son dual, cf figure 2.4(d) (défini comme pour la percolation duale : le dual d'un arbre est un arbre, un sous-graphe couvrant étant acyclique ssi son dual est connexe). La racine de l'arbre dual est prise comme étant le sommet externe, et on oriente chaque arête vers elle. On obtient alors une configuration de dimères en remplaçant chaque «flèche» (duale ou non) par un dimère. Il est immédiat de voir que ceci est la configuration réciproque. \square

Mentionnons à présent les modifications de la construction pour les autres parités des tailles des côtés. Pour un rectangle $(2M + 1) \times (2N)$, on ajoute un sommet externe à la grille blanche impaire qu'on relie à tous les sommets du bord droit. Le dual est alors obtenu en reliant chaque sommet des bords gauche, haut et bas de la grille blanche pair à un sommet externe dual. Enfin, pour un rectangle $(2M) \times (2N)$, ce sont des sommets des bords droit et bas (resp. gauche et haut dans le dual) qu'on relie à un sommet externe. Dans tous les cas, l'arbre couvrant est obtenu à partir des dimères couvrant un sommet de la grille blanche impaire (la racine est alors le sommet externe).

Théorème de Kirchhoff Ainsi on ramène le problème du comptage des configurations de dimères sur une grille rectangulaire à celui du comptage des arbres couvrants sur une grille plus petite. Comme mentionné dans notre panorama, ce dernier problème peut être traité à l'aide du théorème de Kirchhoff ou *matrix-tree theorem*, qui est valable sur n'importe quel graphe, y compris pondéré (et orientés, à une petite variante près). Pour simplifier la discussion on va se restreindre ici au seul cas utile des graphes non-pondérés, et on laisse la généralisation en exercice (facile).

Rappelons qu'à tout graphe $G = (V, E)$ on peut associer son laplacien (ou matrice laplacienne) $L = (L_{ij})_{i,j \in V}$ défini par

$$L_{ij} = \begin{cases} -\#\{e \in E, e \text{ relie } i \text{ à } j\} & \text{si } i \neq j, \\ \#\{e \in E, e \text{ relie } i \text{ à un sommet } \neq i\} & \text{si } i = j. \end{cases}$$

Remarque 2.2.2. on donne ici une définition qui marche même en présence d'arêtes multiples (comptées avec multiplicités) et de "self-loops" (ignorées). Pour un graphe simple, tous les termes non-diagonaux valent -1 ou 0 .

Notons que L est clairement une matrice non-inversible, car les vecteurs constants sont dans son noyau. Pour $i_0 \in V$, on note $L^{(i_0)}$ la matrice obtenue en enlevant la ligne et la colonne i_0 de L .

Théorème 2.2.3 (Kirchhoff, version non pondérée). *Pour tout $i_0 \in V$, le nombre d'arbres couvrants sur G est égal à $\det L^{(i_0)}$.*

En sommant sur i_0 , on obtient le coefficient de degré 1 du polynôme caractéristique de L , et on déduit le

Corollaire 2.2.4. *Si G est connexe (i.e. possède au moins un arbre couvrant), alors L possède exactement $|V| - 1$ valeurs propres non-nulles $\lambda_1, \dots, \lambda_{|V|-1}$, et le nombre d'arbres couvrants de G est égal à $\frac{1}{|V|} \prod_{i=1}^{|V|-1} \lambda_i$.*

Démonstration. Le théorème de Kirchhoff admet 1001 preuves, voyons en une qui s'insère bien dans le contexte. On développe $\det L^{(i_0)}$ en somme sur les permutations (de $V' := V \setminus \{i_0\}$) et on cherche à représenter graphiquement les différents termes dans le développement.

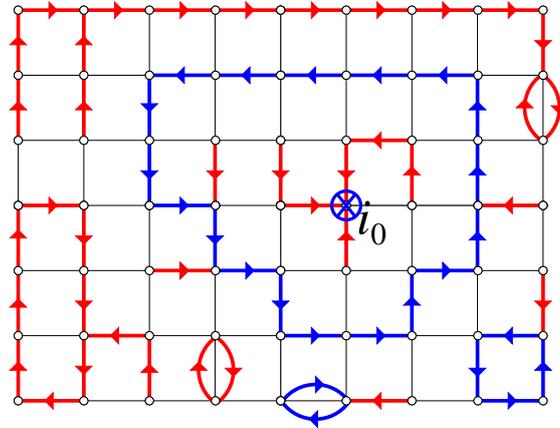


FIGURE 2.5 – det

Soit σ une permutation de V' , sa contribution est $\epsilon(\sigma) \prod_{i \in V'} L_{i, \sigma(i)}$ qui est un entier (relatif). Notons d'abord que le signe est égal $\epsilon(\sigma)(-1)^{\#\{i \in V', i \neq \sigma(i)\}}$. La valeur absolue de la contribution correspond au nombre de graphes orientés construits de la manière suivante : pour tout $i \in V'$,

- si i est point fixe de σ , alors on choisit une arête partant de i (pouvant mener à i_0), qu'on oriente et colorie en rouge
- si i n'est pas point fixe de σ , alors on choisit une arête allant de i à $\sigma(i)$, qu'on oriente et colorie en bleu.

Cf la figure 2.5 pour un exemple de tel graphe. Par construction, les arêtes bleues forment des cycles de longueur ≥ 2 , tandis que les arêtes rouges forment des “arborescences” pouvant mener à des cycles (rouges ou bleus), ou à i_0 . On voit facilement que le signe est égal à -1 puissance le nombre de cycles bleus. Lorsqu'on somme sur toutes les permutations, $\det L^{(i_0)}$ s'écrit comme une somme sur tous les graphes obtenus en choisissant, pour tout $i \in V'$, une arête partant de i , qu'on colorie en rouge ou bleu, avec la seule contrainte que les arêtes bleues forment des cycles.

À présent, on “oublie” les couleurs, et on regroupe ensemble tous les termes correspondant à un même graphe (non colorié). Alors, à cause du poids -1 par cycle bleu, la contribution de ce graphe va être égale à $(1-1)^{\#\{\text{cycles}\}}$, i.e. 0 s'il y a au moins un cycle, et 1 s'il n'y en a aucun. Ainsi, $\det L^{(i_0)}$ compte le nombre de graphes acycliques. Un tel graphe est nécessairement connexe (car on finit toujours par tomber sur i_0), et s'identifie bijectivement à un arbre couvrant (les orientations vont vers la racine i_0). \square

Formule de Fisher-Kasteleyn-Temperley Pour énumérer les configurations de dimères sur un rectangle, il reste à évaluer le déterminant du laplacien pour la grille rectangulaire. Ici on exploite la structure particulière de ce graphe, qui permet de diagonaliser explicitement le laplacien.

En fait, pour traiter les différentes parités de manière unifiée, il est légèrement plus simple de travailler sur la grille blanche paire (possédant toujours un sommet externe et au moins deux bords “ouverts”), dessin. Bien sûr, le résultat est le même puisqu'il y a autant d'arbres couvrants que sur la grille blanche impaire. On cherche à compter les configurations de dimères sur la grille $(2M+e) \times (2N+e')$, avec $e, e' \in \{0, 1\}$. D'après la bijection de Temperley, cela revient à compter des arbres couvrants sur une grille $M \times N$, avec les bords haut et gauche toujours ouverts, le bord droit ouvert si $e = 1$ et fermé sinon, le bord bas ouvert si $e' = 1$ et fermé sinon. Notons i_0 le sommet externe, on observe que le laplacien peut s'écrire sous la forme

$$L^{(i_0)} = B_{M,e} \otimes I_N + I_M \otimes B_{N,e'}$$

où I_N désigne la matrice identité de taille N , et $B_{N,e}$ est la matrice de taille N donnée par

$$B_{N,e} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 1+e \end{pmatrix}.$$

Il suffit alors de diagonaliser $B_{N,e}$, en effet si on note respectivement $v_{N,e}^{(i)}$ et $\lambda_{N,e}^{(i)}$ ses vecteurs et valeurs propres ($i = 1, \dots, N$), alors pour tout $i = 1, \dots, M$ et $j = 1, \dots, N$, $v_{M,e}^{(i)} \otimes v_{N,e'}^{(j)}$ est vecteur propre de L , de valeur propre $\lambda_{M,e}^{(i)} + \lambda_{N,e'}^{(j)}$.

Pour diagonaliser $B_{N,e}$, on observe que pour $\mu \in \mathbb{C}$, le vecteur $((-\mu)^k)_{1 \leq k \leq N}$ est quasiment un vecteur propre, pour la valeur propre $2 + \mu + \mu^{-1}$ (NB : on ajoute le signe - car cela simplifie les formules). En effet, tout marche bien dans le “bulk”, les seuls problèmes sont au bord. On répare le problème en $k = 1$ en prenant plutôt le vecteur $v = (v_k)_{1 \leq k \leq N}$ avec $v_k = (-\mu)^k - (-\mu)^{-k}$. On a clairement

$$2v_k - v_{k-1} - v_{k+1} = (2 + \mu + \mu^{-1})v_k$$

pour tout k donc v est aussi quasi-vecteur propre. Comme $v_0 = 0$, cela donne la condition voulue en $k = 1$. Quant à $k = N$:

- pour $e = 1$, il faut imposer $v_{N+1} = 0$, i.e. $\mu^{2(N+1)} = 0$ soit $\mu = e^{in\pi/(N+1)}$. On obtient une base en se restreignant à l'intervalle $n = 1, \dots, N$ (en effet $n = 0$ ou $N + 1$ donne le vecteur nul, tandis que $n \rightarrow -n$ et $n \rightarrow n + 2(N + 1)$ donne le même vecteur propre modulo un signe éventuel). La valeur propre associée est $2 + 2 \cos \frac{n\pi}{N+1} = 4 \cos^2 \frac{n\pi}{2N+2}$.
- pour $e = 0$, il faut imposer $v_N = v_{N+1}$, i.e. $\mu^{2N+1} = 1$ soit $\mu = e^{2in\pi/(2N+1)}$. On obtient à nouveau une base en se restreignant à l'intervalle $n = 1, \dots, N$ (toujours par symétrie/périodicité). La valeur propre associée est $2 + 2 \cos \frac{2n\pi}{2N+1} = 4 \cos^2 \frac{n\pi}{2N+1}$.

Ainsi, en réunissant les deux cas, les valeurs propres de $B_{N,e}$ sont $4 \cos^2 \frac{n\pi}{2N+1+e}$, $n = 1, \dots, N$.

On aboutit au :

Théorème 2.2.5 (FKT). *Le nombre de configurations de dimères sur la grille $\mathcal{M} \times \mathcal{N}$ (où on enlève le coin supérieur droit lorsque \mathcal{M} et \mathcal{N} sont tous deux impairs) est égal à*

$$D(\mathcal{M}, \mathcal{N}) = 4^{[\mathcal{M}/2][\mathcal{N}/2]} \prod_{m=1}^{[\mathcal{M}/2]} \prod_{n=1}^{[\mathcal{N}/2]} \left(\cos^2 \frac{m\pi}{\mathcal{M}+1} + \cos^2 \frac{n\pi}{\mathcal{N}+1} \right).$$

Remarque 2.2.6. Il est surprenant que le membre de droite soit un entier !

À partir de ce résultat *exact*, on peut s'intéresser au comportement asymptotique de $D(\mathcal{M}, \mathcal{N})$. On voit que

$$\frac{\ln D(\mathcal{M}, \mathcal{N})}{\mathcal{M}\mathcal{N}} = \frac{1}{\mathcal{M}\mathcal{N}} \sum_{m=1}^{[\mathcal{M}/2]} \sum_{n=1}^{[\mathcal{N}/2]} \ln \left(4 \cos^2 \frac{m\pi}{\mathcal{M}+1} + 4 \cos^2 \frac{n\pi}{\mathcal{N}+1} \right).$$

d'où, clairement, le membre de droite va tendre vers

$$c = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \ln(4 \cos^2 x + 4 \cos^2 y) dx dy$$

qui s'évalue en

$$c = \frac{G}{\pi} \quad \text{où } G = 1 - \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} - \frac{1}{7^2} + \dots$$

est la *constante de Catalan*. Numériquement $c \simeq 0,29156$, $e^c \simeq 1,34$.

Remarque 2.2.7. Contrairement à la situation usuelle en mécanique statistique, cette *entropie* dépend des conditions au bord ! Il existe en effet des régions du plan dont le nombre de pavage par domino croît à une “vitesse” différente.

2.3 Losanges et chemins évitants

On va maintenant considérer des configurations de dimères sur une portion «hexagonale» du réseau hexagonal, ce qui revient à compter des pavages par losanges d'un hexagone. Notons $a \times b \times c$ les dimensions de l'hexagone (p.ex. a est la longueur du bord supérieur droit, b celle du bord supérieur gauche, et c celle du bord vertical, $(a, b, c) = (2, 3, 3)$ sur la figure 2.2).

Ici la méthode la plus efficace est d'utiliser les chemins non-intersectants, ce qui est l'occasion d'introduire un autre «joyau» de la combinatoire énumérative, aux innombrables applications (notamment en combinatoire algébrique, théorie des fonctions symétriques...).

Lemme de Lindström-Gessel-Viennot Il s'agit de formaliser ce qu'on entend par «chemins non-intersectants». On se place sur un graphe $G = (V, E)$ orienté acyclique (i.e. les arêtes sont orientées, et il n'existe pas de cycle orienté) et pondéré (i.e. muni d'une application $w : E \rightarrow A$ où A est un anneau commutatif). Par chemin, on entend un chemin orienté sur G . Le poids d'un chemin $P = (e_1, \dots, e_l)$ est défini par $w(P) = w(e_1) \cdots w(e_l)$.

On fixe un entier $n \geq 1$ et deux n -uplets de sommets (s_1, \dots, s_n) (les *sources*) et (p_1, \dots, p_n) (les *puits*). On appelle *configuration de chemins non-intersectants* (CCNI) une famille de chemins $\mathcal{P} = (P_1, \dots, P_n)$ disjoints (des sommets) telle que, pour tout i , P_i a pour origine s_i et pour extrémité l'un des p_j (pas nécessairement p_i). À une CCNI $\mathcal{P} = (P_1, \dots, P_n)$ on associe :

- la permutation $\sigma = \sigma(\mathcal{P}) \in \mathfrak{S}_n$ telle que, pour tout i , P_i a extrémité $p_{\sigma(i)}$,
- le poids $w(\mathcal{P}) = w(P_1) \cdots w(P_n)$.

En deux dimensions, il arrive fréquemment que les sources et puits soient disposés de telle manière que la propriété suivante soit vérifiée : pour tous les entiers i, i', j, j' tels que $1 \leq i < i' \leq n$ et $1 \leq j < j' \leq n$, n'importe quel chemin reliant s_i à $p_{j'}$ intersecte nécessairement n'importe quel chemin reliant $s_{i'}$ à p_j . Dans ce cas, on a $\sigma(\mathcal{P}) = \text{id}$ pour toute toute CCNI \mathcal{P} .

Lemme 2.3.1 (LGV). Notons $M = (M_{ij})_{i,j \in \{1, \dots, n\}}$ la matrice définie par

$$M_{ij} = \sum_{P: s_i \rightarrow p_j} w(P)$$

(somme des poids des chemins reliant s_i à p_j). Alors on a

$$\det M = \sum_{\mathcal{P}} \epsilon(\sigma(\mathcal{P})) w(\mathcal{P})$$

où ϵ est la signature et la somme porte sur toutes les CCNI. En particulier, si $\sigma(\mathcal{P}) = \text{id}$ pour toute CCNI, alors

$$\det M = \sum_{\mathcal{P}} w(\mathcal{P}).$$

Démonstration. La preuve est tout à fait élémentaire. On développe $\det M$ comme somme sur les permutations, et pour $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ on peut interpréter le produit $M_{1\sigma(1)} \cdots M_{n\sigma(n)}$ comme la somme des poids de toutes les familles de chemins $\mathcal{P} = (P_1, \dots, P_n)$ (non-nécessairement non-intersectants) telles que, pour tout i , P_i relie s_i à $p_{\sigma(i)}$. Il s'agit de voir que lorsqu'on somme sur l'ensemble des permutations, avec le signe $\epsilon(\sigma)$, alors les contributions des familles de chemins *intersectants* s'annulent entre elles. Pour cela, il suffit d'exhiber une involution $\mathcal{P} \mapsto \mathcal{P}'$ sur l'ensemble des configurations de chemins intersectants (CCI) telle que $\epsilon(\sigma(\mathcal{P})) = -\epsilon(\sigma(\mathcal{P}'))$ et $w(\mathcal{P}) = w(\mathcal{P}')$.

Soit $\mathcal{P} = (P_1, \dots, P_n)$ une CCI, on considère le plus petit indice i tel que P_i intersecte un autre chemin, puis la première intersection x rencontrée le long de P_i , puis le plus petit indice $j > i$ tel que x appartienne à P_j . On "coupe" alors P_i et P_j à x et on les recombine en croisant les morceaux (dessins). Ceci définit clairement une CCI \mathcal{P}' telle que

- $w(\mathcal{P}') = w(\mathcal{P})$,
- $\sigma(\mathcal{P}') = (ij) \circ \sigma(\mathcal{P})$ donc $\epsilon(\sigma(\mathcal{P}')) = -\epsilon(\sigma(\mathcal{P}))$.

Il est facile de voir que $\mathcal{P} \mapsto \mathcal{P}'$ est une involution, ce qui conclut la preuve. \square

Remarque 2.3.2. L'hypothèse que G est acyclique est essentielle pour assurer l'involutive, il n'est pas difficile de construire un contre-exemple dans le cas contraire.

À titre d'exemple d'application du lemme LGV, en-dehors du contexte des modèles en deux dimensions, mentionnons le corollaire suivant dont la preuve est laissée en exercice.

Corollaire 2.3.3 (Formule de Binet-Cauchy). *Pour deux matrices A, B rectangulaires de tailles respectives $n \times m$ et $m \times n$ on a*

$$\det(AB) = \sum_S \det(A_S) \det(B^S)$$

où la somme porte sur les sous-ensembles à n éléments de $\{1, \dots, m\}$ et A_S (resp. B^S) désigne la sous-matrice de A (resp. B) dans laquelle on ne garde que les colonnes (resp.) les lignes dans S .

Formule de MacMahon Revenons au contexte des pavages par losanges de l'hexagone $a \times b \times c$, alors il s'agit de compter des CCNI reliant les sources sur le bord inférieur gauche aux puits sur le bord supérieur droit. Ici on associe à chaque arête un poids 1, $w \equiv 1$. Numérotions les sources de 1 à a en partant du bas, alors il n'est pas difficile de voir que le nombre de chemins reliant s_i à p_j est $\binom{b+c}{c+j-i}$ et, de plus, on est dans la situation où $\sigma(\mathcal{P}) = \text{id}$ pour toute CCNI. Par le lemme LGV, le nombre de CCNI est

$$\mathcal{M}(a, b, c) = \det_{1 \leq i, j \leq a} \binom{b+c}{c+j-i}.$$

Peut-on trouver une formule plus explicite? La réponse est oui, car le déterminant peut être évalué explicitement (voir par exemple l'article *Advanced determinant calculus* de Krattenthaler, 1999, pour des méthodes générales, et leur application à ce cas particulier fameux). Énonçons tout d'abord le résultat.

Théorème 2.3.4 (Formule de McMahon, 1915). *Le nombre de pavages $\mathcal{M}(a, b, c)$ de l'hexagone $a \times b \times c$ par des losanges est*

$$\mathcal{M}(a, b, c) = \prod_{i=1}^a \prod_{j=1}^b \prod_{k=1}^c \frac{i+j+k-1}{i+j+k-2}.$$

Démonstration. Voici une preuve reposant sur une “astuce combinatoire” (qui est intéressante en soi car elle s’applique à d’autres cas comme les “watermelons”). Tout d’abord observons que, quitte à déformer un peu le réseau, il s’agit de compter des CCNI sur le réseau \mathbb{Z}^2 dans lequel les arêtes verticales sont orientées vers le haut et les arêtes horizontales vers la droite. Les sources et puits ont alors pour coordonnées

$$s_i = (-i, i), \quad p_j = (b - j, c + j), \quad i, j = 1, \dots, n.$$

L’astuce consiste à modifier l’ensemble des sources, pour prendre à la place

$$s'_i = (-i, 1), \quad i = 1, \dots, n$$

et on observe alors que l’ensemble des CCNI reliant les s_i aux p_j est en bijection avec l’ensemble des CCNI reliant les s'_i aux p_j (c’est évident sur un dessin). On obtient ainsi l’expression déterminantale

$$\mathcal{M}(a, b, c) = \det_{1 \leq i, j \leq a} \begin{pmatrix} b + c + i - 1 \\ c + j - 1 \end{pmatrix}$$

qui s’avère beaucoup plus simple à évaluer (NB : si on préfère les arguments algébriques, l’égalité des déterminants résulte du fait que les matrices diffèrent par multiplication à gauche par une matrice unitriangulaire). En effet on a

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(a, b, c) &= \det_{1 \leq i, j \leq a} \frac{(b + c + i - 1)!}{(c + j - 1)!(b + i - j)!} = \det_{1 \leq i, j \leq a} \frac{(b + c + i - 1)!}{(b + i - 1)!(c + j - 1)!} \frac{(b + i - 1)!}{(b + i - j)!} \\ &= \prod_{i=1}^a \frac{(b + c + i - 1)!}{(b + i - 1)!(c + i - 1)!} \det_{1 \leq i, j \leq a} (b + i - 1)(b + i - 2) \cdots (b + i - j + 1) \end{aligned}$$

où on a cherché à sortir autant de facteurs dépendant uniquement des lignes ou des colonnes que possible. Le dernier déterminant peut être vu comme une spécialisation du déterminant de Vandermonde : rappelons que pour toute famille de polynômes en une variable $(q_j(X))_{j \geq 1}$ telle que, pour tout j , $q_j(X)$ est unitaire de degré $j - 1$, on a

$$\det_{1 \leq i, j \leq a} q_j(X_i) = \prod_{1 \leq k < \ell \leq a} (X_\ell - X_k)$$

où X_1, \dots, X_a sont des indéterminées (le déterminant de Vandermonde usuel étant obtenu pour $q_j(X) = X^{j-1}$). En prenant $q_j(X) = (X - 1)(X - 2) \cdots (X - j + 1)$ et $X_i = b + i$, on obtient que

$$\det_{1 \leq i, j \leq a} (b + i - 1)(b + i - 2) \cdots (b + i - j + 1) = \prod_{i=1}^a (i - 1)!$$

et ainsi

$$\mathcal{M}(a, b, c) = \prod_{i=1}^a \frac{(b+c+i-1)!(i-1)!}{(b+i-1)!(c+i-1)!}.$$

Pour rendre manifeste la symétrie entre a , b et c , sous-jacente au problème de comptage, on peut réécrire

$$\mathcal{M}(a, b, c) = \prod_{i=1}^a \prod_{j=1}^b \frac{c+i+j-1}{i+j-1} = \prod_{i=1}^a \prod_{j=1}^b \prod_{k=1}^c \frac{i+j+k-1}{i+j+k-2}$$

qui donne bien la forme voulue. □

Remarque 2.3.5. Une autre preuve, par récurrence, utilise l'identité de Desnanot-Jacobi. Cf l'article de Krattenthaler sus-mentionné, section 2.3.

Remarque 2.3.6. On a en fait une “ q -déformation” qui consiste à pondérer un pavage par le «nombre de boîtes» (=distance en flips au vide) :

$$M(q; a, b, c) = \prod_{i=1}^a \prod_{j=1}^b \prod_{k=1}^c \frac{1 - q^{i+j+k-1}}{1 - q^{i+j+k-2}}.$$

Pour $|q| < 1$, on peut prendre la limite $a, b, c \rightarrow \infty$ qui vaut

$$M(q) = \prod_{k \geq 1} \frac{1}{(1 - q^k)^k}$$

qui est la série génératrice des *partitions planes* (pour les partitions usuelles c'est pareil sans le k).

2.4 La méthode de Kasteleyn

Nous allons à présent introduire une méthode générale de calcul des fonctions de partition de modèles de dimères sur réseau 2D régulier. Cette méthode, due à Kasteleyn, repose sur le fait que pour une certaine classe de graphes (contenant les graphes planaires), la fonction de partition des dimères se réécrit sous forme de pfaffien.

Pfaffien Considérons une matrice $M = (M_{ij})$ antisymétrique de taille n : $M = -M^T$. Comme

$$\det M = \det M^T = \det(-M) = (-1)^n \det M$$

on déduit que $\det M = 0$ si n est impair. Lorsque n est pair, $\det M$ est un polynôme non-nul en les M_{ij} :

- pour $n = 2$, $\det M = (M_{12})^2$,
- pour $n = 4$, $\det M = (M_{12}M_{34} - M_{13}M_{24} + M_{14}M_{23})^2$.

On observe que, pour ces deux valeurs de n , $\det M$ est le carré d'un polynôme en les coefficients de M , où chaque monôme correspond à une partition de $\{1, \dots, n\}$ en paires, avec un signe. Ce phénomène est général.

Définition 2.4.1. Un *appariement* de $\{1, \dots, n\}$ est une partition de $\{1, \dots, n\}$ en $n/2$ paires, qu'on notera de manière concise

$$\mu = i_1 j_1, i_2 j_2, \dots, i_{n/2} j_{n/2} \quad \text{avec } i_k < j_k \text{ pour tout } k$$

(cette écriture est unique si on suppose $i_1 < i_2 < \dots < i_{n/2}$). Le *nombre de croisements* d'un appariement μ , noté $c(\mu)$, est le nombre de paires k, ℓ telles que $i_k < i_\ell < j_k < j_\ell$.

Il y a $(n-1)!! := (n-1)(n-3) \dots 3 \cdot 1$ appariements et, étant donné M antisymétrique, on pose

$$M_\mu = M_{i_1 j_1} M_{i_2 j_2} \dots M_{i_{n/2} j_{n/2}}.$$

(Rappelons qu'on suppose $i_k < j_k$, l'ordre de $i_1, i_2, \dots, i_{n/2}$ étant sans importance.)

Définition 2.4.2. Le *pfaffien* de M est défini par

$$\text{Pf } M = \sum_{\mu} (-1)^{c(\mu)} M_\mu$$

où la somme porte sur tous les appariements de $\{1, \dots, n\}$.

Théorème 2.4.3 (Cayley). *Pour M antisymétrique de taille paire, on a*

$$\det M = (\text{Pf } M)^2.$$

Démonstration. On part de l'expression usuelle du déterminant

$$\det M = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} \epsilon(\sigma) M_\sigma$$

où

$$M_\sigma := M_{1\sigma(1)} M_{2\sigma(2)} \dots M_{n\sigma(n)}.$$

Par antisymétrie de M , de nombreuses annulations ont lieu dans cette somme. Plus précisément, on va montrer que la somme des contributions des permutations possédant au moins un cycle de longueur impaire est nulle. Notons S l'ensemble de ces permutations, et considérons l'application $\varphi : S \rightarrow S$ définie de la manière suivante : pour $\sigma \in S$, on considère sa décomposition en cycles $\sigma = \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_t$ où σ_1 est le cycle impair contenant le plus petit élément possible, et on pose $\varphi(\sigma) = \sigma_1^{-1} \sigma_2 \dots \sigma_t$. Clairement φ est une involution de S . On a de plus

$$M_{\varphi(\sigma)} = -M_\sigma$$

pour tout $\sigma \in S$, en effet on peut écrire

$$\frac{M_{\varphi(\sigma)}}{M_\sigma} = \prod_i \frac{A_{i\sigma_1^{-1}(i)}}{A_{i\sigma_1(i)}} = \prod_i \frac{A_{\sigma_1(i)i}}{A_{i\sigma_1(i)}} = -1$$

où on utilise le fait que σ_1 a longueur impaire.

Il s'ensuit que

$$\det M = \sum_{\sigma \in \mathfrak{E}_n} \epsilon(\sigma) M_\sigma$$

où $\mathfrak{E}_n \subset \mathfrak{S}_n$ est l'ensemble des permutations ne contenant que des cycles de longueur paire. Pour montrer le théorème, il suffit d'exhiber une bijection ϕ entre l'ensemble des paires d'appariements et \mathfrak{E}_n , telle que si $\phi(\mu_1, \mu_2) = \sigma \in \mathfrak{E}_n$ alors

$$(-1)^{c(\mu_1)} M_{\mu_1} \cdot (-1)^{c(\mu_2)} M_{\mu_2} = \epsilon(\sigma) M_\sigma. \quad (2.1)$$

Une telle bijection est évidente à définir graphiquement (dessin : $\mu_1 = 14, 28, 35, 67$ et $\mu_2 = 15, 26, 34, 78$ donnent $\sigma = (1435)(2876)$) et sa réciproque de même (dessin : $\sigma = (13)(2658)(41097)$ donne $\mu_1 = 13, 26, 410, 58, 79$ et $\mu_2 = 13, 28, 47, 56, 910$). Reste à montrer la propriété (2.1). On a, d'une part,

$$M_{\mu_1} M_{\mu_2} = (-1)^{e(\sigma)} M_\sigma, \quad e(\sigma) := \#\{i : \sigma(i) < i\}$$

par construction de ϕ et, d'autre part, en notant $t(\sigma)$ le nombre de cycles de σ ,

$$\epsilon(\sigma) = (-1)^{t(\sigma)}$$

(puisque chaque cycle a longueur paire donc signature -1). Il suffit donc de montrer que

$$c(\mu_1) + c(\mu_2) \equiv e(\sigma) + t(\sigma) \pmod{2}. \quad (2.2)$$

Fixons un entier i entre 1 et $n-1$ et posons $\sigma' = (i, i+1)\sigma(i, i+1)$ (autrement dit on conjugue σ par la transposition échangeant i et $i+1$) et $(\mu'_1, \mu'_2) = \phi^{-1}(\sigma')$. On a bien sûr $t(\sigma') = t(\sigma)$. En distinguant plusieurs cas, on voit facilement (par un dessin) que

- si $\sigma(i) = i+1$ et $\sigma(i+1) = i$ alors $\sigma = \sigma'$,
- si $\sigma(i) = i+1$ et $\sigma(i+1) \neq i$ alors $e(\sigma') = e(\sigma) + 1$ et $c(\mu'_1) + c(\mu'_2) = c(\mu_1) + c(\mu_2) \pm 1$,
- si $\sigma(i) \neq i+1$ et $\sigma(i+1) = i$ alors $e(\sigma') = e(\sigma) - 1$ et $c(\mu'_1) + c(\mu'_2) = c(\mu_1) + c(\mu_2) \pm 1$,
- si $\sigma(i) \neq i+1$ et $\sigma(i+1) \neq i$ alors $e(\sigma') = e(\sigma)$ et $c(\mu'_1) = c(\mu_1) \pm 1$ et $c(\mu'_2) = c(\mu_2) \pm 1$,

et on conclut que, dans tous les cas,

$$c(\mu'_1) + c(\mu'_2) + e(\sigma') + t(\sigma') \equiv c(\mu_1) + c(\mu_2) + e(\sigma) + t(\sigma) \pmod{2}.$$

Par un nombre fini de transpositions simples, on peut ainsi “réordonner” les cycles de σ , i.e. se ramener au cas où

$$\sigma = (1 \dots k_1)(k_1 + 1 \dots k_2) \dots (k_{t(\sigma)-1} + 1 \dots n)$$

pour lequel $c(\mu_1) = c(\mu_2) = 0$ et $e(\sigma) = t(\sigma)$ d'où on déduit (2.2) et le théorème s'ensuit. \square

Orientations pfaffiennes Considérons à présent un graphe simple $G = (V, E)$ muni d'une pondération des arêtes $z : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ (NB : on peut en fait traiter les poids comme des variables commutatives formelles), et sa matrice d'adjacence $A = (A_{ij})_{i,j \in V}$:

$$A_{ij} = \begin{cases} z_{(ij)} & \text{si } i \sim j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On peut remarquer que la fonction de partition des dimères n'est autre qu'une somme sur les appariements de V (dont on numérote les éléments de 1 à $n = |V|$) :

$$Z = \sum_{\mu} A_{\mu}.$$

Le membre de droite est appelé le "hafnien" de A , cependant contrairement au déterminant il ne possède ni propriétés algébriques spéciales ni algorithmes de calcul efficaces. Toutefois cette expression est proche de la définition du pfaffien, modulo l'absence de signes et le fait que A est symétrique et non antisymétrique. L'idée de Kasteleyn est alors de considérer un graphe *orienté* et de définir la matrice $K = (K_{ij})_{i,j=1}^n$ par

$$K_{ij} = \begin{cases} z_{(ij)} & \text{si } i \rightarrow j, \\ -z_{(ij)} & \text{si } j \rightarrow i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Si l'orientation est telle que le signe de $(-1)^{c(\mu)} K_{\mu}$ ne dépend pas de μ , alors on a

$$Z = |\text{Pf } K| = \sqrt{\det K}.$$

Au vu de la relation (2.1) apparaissant dans la preuve de la relation $\det M = (\text{Pf } M)^2$, la précédente condition est satisfaite si et seulement si $\epsilon(\sigma) K_{\sigma} \geq 0$ pour toute permutation $\sigma \in \mathfrak{E}_n$. Soit σ une telle permutation avec $K_{\sigma} \neq 0$ (ce qui implique que $i \sim \sigma(i)$ pour tout i) : on a d'une part $\epsilon(\sigma) = (-1)^{t(\sigma)}$ où $t(\sigma)$ est le nombre de cycles de σ , d'autre part le signe de K_{σ} est $(-1)^{\#\{j: \sigma(j) \rightarrow j\}}$. La condition à satisfaire se réécrit donc

$$t(\sigma) + \#\{j : \sigma(j) \rightarrow j\} \equiv 0 \pmod{2} \quad \text{pour tout } \sigma \in \mathfrak{E}_n.$$

Cette condition est a fortiori satisfaite si, le long de chaque cycle de σ , le nombre d'arêtes "mal" orientées est impair, ce qui revient à demander que le nombre d'arêtes "bien" orientées soit également impair puisque tout cycle a longueur paire.

Définition 2.4.4. Une orientation de G est dite *pfaffienne* si, pour toute permutation $\sigma \in \mathfrak{E}_n$ telle que $K_{\sigma} \neq 0$, et pour tout cycle $(i_1 i_2 \dots i_{2k})$ de σ , le nombre d'indices $j \in \{1, 2, \dots, 2k\}$ tels que l'arête $(i_j i_{j+1})$ est orientée de i_j vers i_{j+1} est impair (où $i_{2k+1} = i_1$ par convention).

Proposition 2.4.5 (Kasteleyn). *Si G est muni d'une orientation pfaffienne alors la fonction de partition des dimères est égale à $|\text{Pf } K|$.*

On ne sait pas caractériser les graphes possédant une orientation pfaffienne, mais Kasteleyn a montré que tout graphe planaire en possède une, ce que nous allons montrer à présent.

Existence d'une orientation pfaffienne dans le cas planaire Considérons un graphe G dessiné dans le plan sans croisement d'arêtes, et notons F l'ensemble de ses faces. Pour $f \in F$, on note B_f l'ensemble des arêtes incidentes à f qui ne sont pas des isthmes (une arête est un isthme ssi ses deux côtés sont sur une même face).

Définition 2.4.6. On dit qu'une orientation de G respecte la *règle de Kasteleyn* (parfois appelée "clockwise-odd rule" en anglais, horaire-impair en français?) si, autour de toute face f (sauf éventuellement la face externe), le nombre d'arêtes $e \in B_f$ orientées dans le sens horaire (i.e. avec f à droite) est impair.

Lemme 2.4.7. *Il existe une orientation de G respectant la règle de Kasteleyn.*

Démonstration. On procède par récurrence sur le nombre de faces. Si $|F| = 1$, la règle est trivialement respectée : toutes les arêtes sont des isthmes et on peut les orienter de n'importe quelle manière. Si $|F| > 1$, il existe une arête e qui est incidente à la face externe et qui n'est pas un isthme, notons alors f l'autre face incidente à e . Dans le graphe $G \setminus e$, la face f est fusionnée avec la face externe. Par hypothèse de récurrence on peut construire une orientation de $G \setminus e$ respectant la règle de Kasteleyn. On oriente alors e de telle sorte que la règle soit également respectée autour de f . \square

Remarque 2.4.8. En pratique dans le cas de réseaux réguliers on cherchera plutôt des orientations pfaffiennes possédant des propriétés de périodicité.

Lemme 2.4.9. *Soit G un graphe sans isthme muni d'une orientation respectant la règle de Kasteleyn. Soit C un chemin simple fermé de G , alors le nombre d'arêtes orientées dans le sens horaire le long de C (i.e. avec l'intérieur de C à droite) et le nombre de sommets dans l'intérieur de C sont de parités opposées.*

Démonstration. Considérons le sous-graphe $H = (V', E', F')$ constitué de C et de son intérieur. Par la relation d'Euler, et en excluant la face externe, on a

$$|V'| - |E'| + |F'| = 1.$$

Notons p, q, r les nombres respectifs de sommets, arêtes et faces dans l'intérieur de C , et ℓ la longueur de C , alors

$$|V'| = p + \ell, \quad |E'| = q + \ell, \quad |F'| = r$$

d'où

$$p - q + r = 1.$$

Numérotons les faces de H et notons c_i le nombre d'arêtes horaires autour de la i -ème face (impair par hypothèse). Notons par ailleurs c_0 le nombre d'arêtes horaires le long de C . Comme toute arête dans l'intérieur de C ou horaire le long de C est horaire autour d'exactly une face de H , on a

$$\sum_{i=1}^r c_i = q + c_0$$

d'où, comme tous les c_i sont impairs par hypothèse,

$$r \equiv q + c_0 \pmod{2}.$$

Par la relation d'Euler ci-dessus, on déduit que $p + c_0 \equiv 1 \pmod{2}$. \square

Proposition 2.4.10. *Soit G un graphe sans isthme. Alors toute orientation respectant la règle de Kasteleyn est pfaffienne.*

Démonstration. Soient K la matrice de Kasteleyn définie comme ci-dessus, $\sigma \in \mathfrak{E}_n$ telle que $K_\sigma \neq 0$, et $(i_1 i_2 \dots i_{2k})$ un cycle de σ . Si $k = 1$ il y a bien un nombre impair (1) d'arêtes bien orientées le long du cycle. Si $k \geq 2$, le cycle définit un chemin simple fermé C de G . Par planarité, l'intérieur de C contient un nombre pair de sommets (puisque que les différents cycles de σ ne peuvent se croiser), et par le lemme précédent on déduit qu'il y a un nombre impair d'arêtes horaires le long de C . La longueur de C étant paire, on déduit qu'il y a bien un nombre impair d'arêtes bien orientées quel que soit le sens dans lequel C est parcouru par σ . \square

Applications

Exercice 2.4.11. À l'aide de la méthode de Kasteleyn, retrouver la formule de Kasteleyn-Temperley-Fisher pour le nombre de configuration de dimères sur une grille rectangulaire.

Mentionnons également que la méthode de Kasteleyn permet non seulement de calculer la fonction de partition mais également (dans le cas des graphes planaires) les "statistiques locales" : probabilité que les arêtes e_1, \dots, e_p soient chacune couverte par un dimère. La règle de Kasteleyn étant stable par retrait d'arêtes, cette probabilité vaut

$$\frac{z_{e_1} \cdots z_{e_p} |\text{Pf } \tilde{K}|}{|\text{Pf } K|}$$

où \tilde{K} est obtenue à partir de K en retirant les lignes et colonnes correspondant aux extrémités de e_1, \dots, e_p . On peut montrer que cette probabilité se réécrit

$$z_{e_1} \cdots z_{e_p} |\text{Pf } (K^{-1})_{e_1, \dots, e_p}|$$

où $(K^{-1})_{e_1, \dots, e_p}$ désigne la restriction de K^{-1} aux lignes et colonnes correspondant aux extrémités de e_1, \dots, e_p . L'intérêt de cette formule est que le déterminant est de taille $2p$, indépendamment de la taille du graphe.

2.5 Solution du modèle d'Ising sur réseau carré

Nous allons à présent employer la méthode de Kasteleyn afin de retrouver la solution d'Onsager du modèle d'Ising en champ magnétique nul sur réseau carré. La première étape consiste à reformuler le modèle d'Ising comme un modèle de dimères.

Modèle d'Ising et circuits eulériens On commence par une transformation classique, déjà utilisée dans ce cours pour reformuler le modèle $O(n)$ comme un modèle de boucles. Le modèle d'Ising correspond à $n = 1$, mais ici on est sur un réseau tétravalent et non trivalent ce qui change un peu le résultat. On réécrit la fonction de partition comme

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \sum_{\sigma \in \{-1,+1\}^V} e^{\beta \sum_{(ij) \in E} \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\sigma \in \{-1,+1\}^V} \prod_{(ij) \in E} (\cosh \beta + \sinh \beta \sigma_i \sigma_j) \\
&= (\cosh \beta)^{|E|} \sum_{\sigma \in \{-1,+1\}^V} \sum_{E' \subset E} (\tanh \beta)^{|E'|} \prod_{(ij) \in E'} \sigma_i \sigma_j \\
&= (\cosh \beta)^{|E|} \sum_{E' \subset E} (\tanh \beta)^{|E'|} \sum_{\sigma \in \{-1,+1\}^V} \prod_{(ij) \in E'} \sigma_i \sigma_j \\
&= 2^{|V|} (\cosh \beta)^{|E|} \sum_{\substack{E' \subset E \\ (V, E') \text{ eulérien}}} (\sinh \beta)^{|E'|}.
\end{aligned}$$

En effet, on voit aisément que pour $E' \subset E$ donné, $\sum_{\sigma \in \{-1,+1\}^V} \prod_{(ij) \in E'} \sigma_i \sigma_j$ vaut $2^{|V|}$ si chaque sommet est incident à un nombre pair d'arêtes dans E' (on dit alors que le graphe (V, E') est *eulérien*), et 0 sinon. La fonction de partition du modèle d'Ising est donc égale à la série génératrice des sous-graphes eulériens (notons que cela est vrai pour n'importe quel graphe).

Dans le cas du réseau carré, un sous-graphe eulérien peut également être vu comme une configuration du «modèle à 8 vertex», pour des poids particuliers.

Graphe de Fisher L'étape suivante consiste à mettre en bijection les sous-graphes eulériens du réseau carré avec une configuration de dimères sur un réseau modifié. Plusieurs constructions existent, on utilise ici le *graphe de Fisher*, nommé d'après Michael E. Fisher (1966).

Comme illustré sur la figure 2.6, chaque sommet du réseau carré est remplacé par un «sablier» comprenant 6 sommets (dessin). Il convient d'associer un poids $z = \tanh \beta$ à chaque dimère couvrant une arête horizontale/verticale «principale», et un poids 1 aux autres.

Matrice de Kasteleyn On vérifie ensuite qu'une orientation pfaffienne du graphe de Fisher est donnée en orientant chaque triangle dans le sens horaire, chaque arête horizontale principale vers l'est, chaque arête verticale principale vers le nord, et chaque arête diagonale vers le nord-est. En effet la règle de Kasteleyn est respectée : autour de chaque face (triangulaire ou dodécagonale), il y a trois arêtes orientées dans le sens horaire.

En raison de la périodicité du graphe, la matrice de Kasteleyn se décompose en blocs (on pourrait écrire cela sous forme de produits tensoriels mais un schéma est probablement plus clair). Si on se place sur une grille de taille $M \times N$, la matrice a taille $6MN$ et on peut la décomposer en blocs de taille 6, chaque bloc étant indexé par deux paires d'entiers (m, n) , $1 \leq m \leq M$, $1 \leq n \leq N$ (une paire pour la ligne, une paire pour la

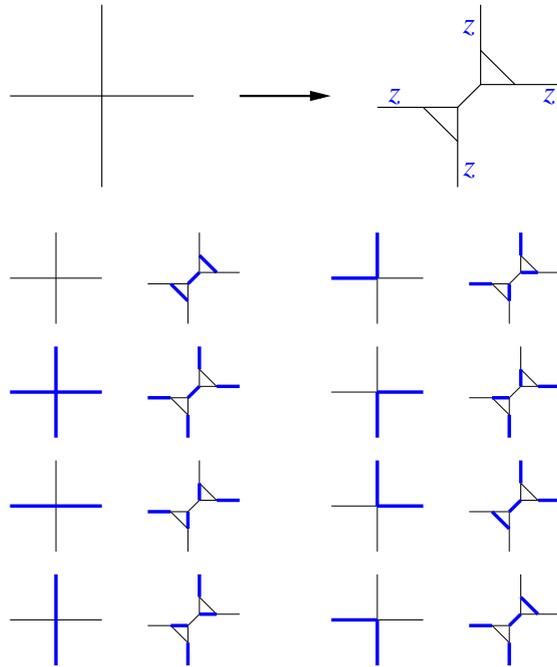


FIGURE 2.6 – Correspondance entre circuits eulériens et configurations de dimères sur le graphe de Fisher

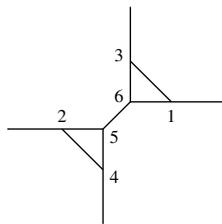


FIGURE 2.7 – Numérotation des sommets d'un domaine fondamental du graphe de Fisher.

colonne). Par périodicité, le bloc $(m, n) - (m+a, n+b)$ ne dépend que (a, b) , on le notera $k_{a,b}$. Clairement les seuls blocs non-nuls sont $k_{0,0}$ (blocs diagonaux), $k_{\pm 1,0}$ et $k_{0,\pm 1}$.

Commençons par les blocs diagonaux, on a

$$k_{0,0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

où on a pris les sommets dans l'ordre de la figure 2.7. Par ailleurs

$$k_{0,1} = -k_{0,-1} = \begin{pmatrix} 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad k_{1,0} = -k_{-1,0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On peut en fait immédiatement réduire la taille du déterminant de la matrice de Kasteleyn, par des manipulations de colonnes : dans chaque bloc, effectuons les manipulations $1 \text{ --} 5$, $2 \text{ +} 6$, $3 \text{ +} 5$, $4 \text{ --} 6$. Ceci permet d'éliminer les lignes et colonnes d'indices 5 et 6, sans modifier la valeur du déterminant. Le bloc diagonal est ainsi réduit :

$$k'_{0,0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Remarque 2.5.1. La matrice K' ainsi obtenue est la matrice d'adjacence signée du graphe "terminal". Ce graphe est non-planaire, il n'est donc pas évident (mais néanmoins vrai, comme montré par Kasteleyn en 1963) que son orientation est pfaffienne. Comme nous sommes passés par le graphe de Fisher qui est bien planaire, nous n'avons pas besoin de le montrer.

Pour pouvoir calculer $\text{Pf}K'$, nous supposons des conditions aux limites périodiques (afin de pouvoir diagonaliser par blocs via transformée de Fourier) : notons que ceci brise la planarité, et donc que $\text{Pf}K'$ n'a pas de raison de compter des configurations de dimères. Cependant, on peut montrer que l'erreur ainsi faite est négligeable dans le calcul de l'énergie libre thermodynamique (ce qui est notre objectif ici). En effet, la vraie fonction de partition est combinaison linéaire de 4 pfaffiens, qui sont obtenus à partir de celui de K' en changeant certains signes, ce qui n'affecte pas le comportement dominant, cf le livre de McCoy et Wu. Sous l'hypothèse des CL périodiques, la matrice K' est "cyclique par blocs". Elle peut être diagonalisée par blocs par la matrice unitaire P dont les blocs sont

$$P_{(m,n)(m',n')} = \frac{1}{\sqrt{MN}} e^{2i\pi(\frac{mm'}{M} + \frac{nn'}{N})} I_6$$

en effet le bloc $(m, n) - (m', n')$ de $P^{-1}K'P$ s'écrit

$$\begin{aligned}
(P^{-1}K'P)_{(m,n)(m',n')} &= \frac{1}{MN} \sum_{m_1, m_2=1}^M \sum_{n_1, n_2=1}^N e^{-2i\pi(\frac{mm_1}{M} + \frac{nn_1}{N})} K'_{m_2-m_1, n_2-n_1} e^{2i\pi(\frac{m_2m'}{M} + \frac{n_2n'}{N})} \\
&= \frac{1}{MN} \sum_{m_1=1}^M \sum_{n_1=1}^N e^{2i\pi(\frac{(m'-m)m_1}{M} + \frac{(n'-n)n_1}{N})} \sum_{a=1}^M \sum_{b=1}^N e^{2i\pi(\frac{am'}{M} + \frac{bn'}{N})} k'_{a,b} \\
&= \delta_{m,m'} \delta_{n,n'} \sum_{a=1}^M \sum_{b=1}^N e^{2i\pi(\frac{am}{M} + \frac{bn}{N})} k'_{a,b} \\
&= \delta_{m,m'} \delta_{n,n'} \begin{pmatrix} 0 & 1 + ze^{2i\pi m/M} & -1 & -1 \\ -1 - ze^{-2i\pi m/M} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + ze^{2i\pi n/N} \\ 1 & 1 & -1 - ze^{-2i\pi n/N} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

d'où on déduit que

$$\begin{aligned}
\det K' &= \prod_{m=1}^M \prod_{n=1}^N \det \begin{pmatrix} 0 & 1 + ze^{2i\pi m/M} & -1 & -1 \\ -1 - ze^{-2i\pi m/M} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + ze^{2i\pi n/N} \\ 1 & 1 & -1 - ze^{-2i\pi n/N} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \prod_{m=1}^M \prod_{n=1}^N \left[(1+z^2)^2 - 2z(1-z)^2 \left(\cos \frac{2\pi m}{M} + \cos \frac{2\pi n}{N} \right) \right].
\end{aligned}$$

Dans la limite thermodynamique $M, N \rightarrow \infty$, en passant au logarithme les produits deviennent des sommes, qu'on peut approximer par des intégrales

$$\frac{\ln \det K'}{MN} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[(1+z^2)^2 - 2z(1-z)^2 (\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2) \right] d\varphi_1 d\varphi_2.$$

Par ailleurs, au vu de la relation entre fonction de partition du modèle d'Ising $Z(\beta)$ et le problème de dimères, il vient

$$\frac{\ln Z(\beta)}{MN} \sim \ln(2 \cosh^2 \beta) + \frac{1}{2} \frac{\ln \det K'}{MN}.$$

En se rappelant que $z = \tanh \beta$ on déduit les identités

$$(1+z^2)^2 = \frac{\cosh^2 2\beta}{\cosh^4 \beta}, \quad 2z(1-z)^2 = 2 \frac{\sinh \beta}{\cosh^3 \beta}$$

ce qui aboutit à la formule finale :

Théorème 2.5.2 (Onsager, 1944). *L'énergie libre thermodynamique du modèle d'Ising en champ magnétique nul (à $J = 1$) est*

$$f(\beta) = -\beta^{-1} \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta (\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2) \right] \right\}.$$

Exercice 2.5.3. Comment cette expression est-elle modifiée lorsqu'on considère un modèle anisotrope, où le couplage le long des arêtes horizontales vaut J_1 et le couplage le long des arêtes verticales J_2 ? Réponse :

$$f(\beta) = -\beta^{-1} \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [\cosh 2\beta J_1 \cosh 2\beta J_2 - \sinh 2\beta J_1 \cos \varphi_1 - \sinh 2\beta J_2 \cos \varphi_2] d\varphi_1 d\varphi_2 \right\}.$$

Remarque 2.5.4. Dans le cas isotrope (à $J = 1$) on peut effectuer explicitement l'un des intégrales ce qui conduit à la forme

$$f(\beta) = -\beta^{-1} \left\{ \ln \left(\sqrt{2} \cosh 2\beta \right) + \pi^{-1} \int_0^{\pi/2} \ln \left[1 + (1 - k^2 \sin^2 \omega)^{1/2} \right] d\omega \right\}$$

avec

$$k = 2 \frac{\sinh 2\beta}{\cosh^2 2\beta} = \frac{2}{\sinh 2\beta + \sinh^{-1} 2\beta}$$

On a donc $k^2 \leq 1$ pour tout $\beta > 0$, avec égalité ssi $\beta = \beta_c$ où $\sinh 2\beta_c = 1$. Avec cette écriture, $f(\beta)$ est manifestement une fonction analytique de β pour tout $\beta \neq \beta_c$ (puisque l'intégrande est analytique pour tout ω). La seule singularité possible est à la température critique : avec un peu d'analyse (cf le livre de McCoy-Wu), on peut montrer que la chaleur spécifique (donnée par une seconde dérivée de l'énergie libre) a une divergence logarithmique en $\beta = \beta_c$, ce qui donne un exposant critique $\alpha = 0$.

Remarque 2.5.5. Dans le cas non-isotrope la température critique est donnée par

$$\sinh 2\beta_c J_1 \sinh 2\beta_c J_2 = 1.$$

On peut montrer (mais c'est plus technique) qu'on reste bien dans la même classe d'universalité : la singularité reste logarithmique.

Remarque 2.5.6. On ne sait pas étendre ce calcul en présence d'un champ magnétique. Au prix de difficultés supplémentaires, on sait calculer ou estimer asymptotiquement selon les mêmes techniques un peu plus, cf McCoy-Wu :

- énergie libre et corrélations spin-spin pour un réseau cylindrique avec champ magnétique appliqué au bord,
- corrélation spin-spin en champ nul (l'analyse est bien plus ardue, et emploie la théorie des déterminants de Toeplitz).