

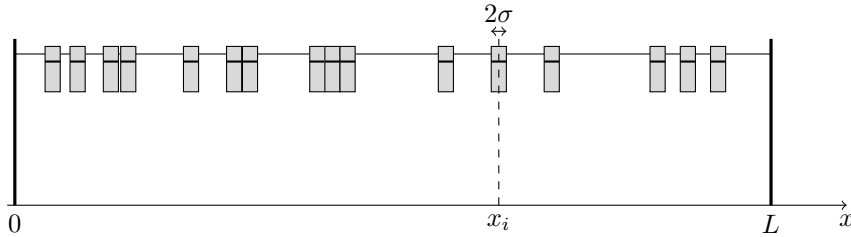
## Homework 2: Sphères dures unidimensionnelles

**Consignes de rendu :** Pour les questions numériques (indiquées par un astérisque), veuillez soumettre un notebook Jupyter qui peut être exécuté de bout en bout sans erreur et qui reproduit tous les résultats demandés dans ce document. Assurez-vous que votre code soit clair, bien commenté, et que toutes les dépendances nécessaires soient clairement indiquées. Pour les questions théoriques, vous avez deux options :

- Vous pouvez inclure vos réponses directement dans le notebook Jupyter, en utilisant des cellules de texte Markdown pour une présentation claire et structurée.
- Alternativement, vous pouvez soumettre un fichier PDF séparé contenant vos réponses aux questions théoriques. Dans ce cas, assurez-vous que vos réponses soient bien organisées et correspondent clairement aux numéros des questions.

Dans les deux cas, veuillez à ce que vos explications soient claires, concises, et rigoureuses. N'hésitez pas à inclure des schémas ou des équations lorsque cela est pertinent pour illustrer vos raisonnements.

### Exercice 1 Le modèle des pinces à linge



Nous allons étudier un modèle simple de particules dures en une dimension. Vous pouvez vous les représenter comme des pinces à linge placées sur une corde à linge. Chaque pince a une largeur de  $2\sigma$  et est placée sur un segment de longueur  $L$ . Les pinces ne peuvent pas se chevaucher, et doivent rester à une distance d'au moins  $\sigma$  des extrémités du segment. Malgré sa simplicité, ce modèle permet d'illustrer des concepts fondamentaux en physique statistique : c'est un bon modèle de particules "dures" unidimensionnelles, et un exemple de force de déplétion (Asakura, Oosawa, 1954).

- Q1.** Soit  $\pi_L(x_1, \dots, x_N)$  la densité de probabilité de trouver les pinces aux positions  $\{x_1, \dots, x_N\}$  sur un fil. La pince  $i$  se trouve en position  $x_i$ . Pour ce système, cette distribution (non-normalisée) s'écrit

$$\pi_L(x_1, \dots, x_N) = \left[ \prod_{i < j} \Theta(|x_i - x_j| - 2\sigma) \right] \left[ \prod_{i=1}^N \Theta(L - \sigma - x_i) \Theta(x_i - \sigma) \right] \quad (1)$$

où  $\Theta(x)$  est on appelle  $Z_{N,L}$  la fonction de partition.

- Expliquez la signification physique de cette distribution. Pourquoi utilise-t-on la fonction de Heaviside ?
- Interprétez les différents termes de l'équation. Que représente chacun des deux produits ?
- Est-ce que cette distribution considère les pinces comme distinguables ou indistinguables ? Justifiez votre réponse.

- \* **Q2.** Nous voulons générer des configurations de pinces qui respectent les contraintes géométriques et qui échantillonnent **uniformément** l'espace des configurations permises. Pour cela, on considère deux approches différentes :

**A :** On place les pincés une par une à des positions aléatoires uniformément échantillonnées dans  $[\sigma, L - \sigma]$ . Si une pince chevauche une autre ou sort des limites, on la remplace à une nouvelle position aléatoire jusqu'à trouver une position valide, puis on passe à la pince suivante.

**B :** On place les pincés une par une à des positions aléatoires uniformément échantillonnées dans  $[\sigma, L - \sigma]$ . Si une pince chevauche une autre ou sort des limites, on recommence *depuis le début* avec la première pince.

a) Implémentez les deux approches **A** et **B** en créant une fonction:

• `is_valid_pair(x1: float, x2: float, sigma: float) -> bool` qui vérifie si deux pincés aux positions `x1` et `x2` ne se chevauchent pas

Avant de commencer la génération de configurations, vérifiez que la condition  $L > 2\sigma N$  est satisfaite. Quelle est la signification physique de cette condition ?

- b) Comparez les histogrammes obtenus pour  $N = 2$ ,  $L = 1$  et  $\sigma = 0.1$  avec  $n_s = 10^7$ .<sup>1</sup> Commentez les deux histogrammes (similarité et différences). Ils devraient montrer la distribution jointe des positions  $(x_1, x_2)$ . Vous devriez observer que l'un des deux algorithmes ne produit pas un échantillonnage uniforme! Quel algorithme devons nous choisir pour faire du sampling *uniforme* dans l'espace des configurations de la distribution eq. (1) ?
- c) Montrez que, si la distribution jointe  $P(x_1, x_2)$  est bien uniforme, la distribution individuelle d'une seule particule ne l'est pas et qu'il existe une sorte de force "effective" d'attraction par les bords. C'est un exemple de forces dites de *déplétion*, qui sont purement d'origine entropique!

**Q3.** Nous allons calculer analytiquement la fonction de partition  $Z_{N,L}$  de ce problème à  $N$  particules sur une corde de longueur  $L$ .

a) La fonction de partition (normalisation du  $\pi_L$ ) du système s'écrit

$$Z_{N,L} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \pi_L(x_1, \dots, x_N) \quad (2)$$

Montrez que cette intégrale se décompose en  $N!$  *secteurs d'intégration*, correspondant chacun à un ordonnancement différent des pincés. Pourquoi chaque secteur contribue-t-il de manière identique à l'intégrale totale ?

b) En choisissant un ordonnancement particulier (par exemple  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$ ), montrez que la fonction de partition peut s'écrire

$$Z_{N,L} = N! \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \pi_L(x_1, \dots, x_N) \mathcal{T}(x_1, \dots, x_N) \quad (3)$$

où  $\mathcal{T}(x_1, \dots, x_N)$  vaut 1 si  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$  et 0 sinon.

c) Considérez le changement de variable suivante:

$$y_k = x_k - (2k-1)\sigma \quad \forall k = 1, \dots, N \quad (4)$$

Cette transformation "retire" l'espace minimal nécessaire pour chaque pince. Pourquoi le terme  $(2k-1)\sigma$  représente l'espace minimal cumulé nécessaire jusqu'à la pince  $k$ ? Quelles sont les nouvelles bornes d'intégration pour les variables  $y_k$ ? Comment s'exprime la condition d'ordre  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$  en termes des  $y_k$  ?

d) En utilisant cette transformation, démontrez que

$$Z_{N,L} = (L - 2N\sigma)^N \quad \text{si } L > 2N\sigma \quad (5)$$

**Q4.** Considerons le "bon" algorithme de la **Q2**, avec  $N$  pas successifs.

a) Pourquoi, en moyenne, la probabilité d'acceptance du  $N$ -ième pas est-elle donnée par

$$p_{\text{acc}}^{N-\text{eme}} = \mathbb{E}_{X_1, \dots, X_{N-1}} \left[ \int_{\sigma}^{L-\sigma} \frac{dx_N}{L - 2\sigma} \pi(X_1, X_2, \dots, X_{N-1}, x_N) \right] \quad (6)$$

Montrer que  $p_{\text{acc}}^{N-\text{eme}}$  peut s'exprimer, à une constante près que l'on déterminera, comme un rapport de deux fonctions de partition  $Z$ . En déduire que la probabilité d'accepter les  $N$  pas successifs avec le algorithme de la **Q2** est donnée par :

$$p_{\text{acc}}^{\text{alg.}} = \left( \frac{L - 2N\sigma}{L - 2\sigma} \right)^N ? \quad (7)$$

<sup>1</sup>Utiliser la fonction `matplotlib.pyplot.hist2d`

Pour  $L = 10$  et  $\sigma = 0.1$ , tracez cette probabilité en fonction de  $N$  et comparez-la avec le nombre moyen d'essais nécessaires dans vos simulations précédentes. Pourquoi cela motive-t-il la recherche d'un autre algorithme?

- b) Cette analyse suggère un algorithme d'échantillonnage bien plus efficace que ceux de la **Q2**. Pour échantillonner les variables  $y_k$  directement, une approche naïve serait de les tirer uniformément sur  $[0, L - 2N\sigma]$  et de ne garder que les configurations où  $y_1 < y_2 < \dots < y_N$ . Montrez que la probabilité d'acceptation serait alors  $1/N!$ , ce qui est encore pire que les algorithmes précédents.
- c) Au lieu de rejeter les configurations où les  $y_k$  ne sont pas ordonnés, on peut simplement les trier ! Cela préserve-t-il l'uniformité de l'échantillonnage? Est-ce que la transformation inverse  $x_k = y_k + (2k - 1)\sigma$  donne des configurations valides? Quelle est la probabilité d'acceptation de cet algorithme?

\* **Q5.** Implémentez l'algorithme basé sur le tri des  $\{y_k\}$ . L'algorithme est le suivant:

**C :** Tirez  $N$  variables uniformément dans  $[0, L - 2N\sigma]$ . Triez-les pour obtenir les  $\{y_k\}$  ordonnés. Appliquez la transformation inverse  $x_k = y_k + (2k - 1)\sigma$ .

- a) Comparons l'efficacité des deux approches en **Q2** et **C** pour  $L = 10$  et  $\sigma = 0.1$ . Comparez le nombre moyen d'essais nécessaires en fonction de  $N$  pour les deux algorithmes. Mesurez le temps de calcul en fonction de  $N$  et tracez les deux courbes sur un même graphique.

**Q6.** Nous allons maintenant étudier la distribution de densité de probabilité  $\pi_{L,N,\sigma}(x)$  qu'une pince quelconque se trouve à la position  $x$ .

- a) Considérons une pince fixée à la position  $x$ . Pourquoi les autres pinces doivent nécessairement se trouver soit à gauche (dans l'intervalle  $[0, x - \sigma]$ ), soit à droite (dans l'intervalle  $[x + \sigma, L]$ ) de cette pince. Illustrez votre raisonnement par un schéma.
- b) Pour une configuration avec  $k$  pinces à gauche de  $x$ , Combien y a-t-il de façons de choisir les  $k$  pinces qui seront placées à gauche parmi les  $N - 1$  pinces restantes? En déduire que :

$$\pi_{L,N,\sigma}(x) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{Z_{N,L}} \binom{N-1}{k} Z_{k,x-\sigma} Z_{N-1-k,L-x-\sigma} \quad (8)$$

- c) Étudions le comportement près des bords du segment, c'est-à-dire pour  $x \gtrsim \sigma$ . Démontrez que pour des valeurs  $x$  qui sont proche au bord gauche on a

$$\pi_{L,N}(x \gtrsim \sigma) \approx \frac{1}{L - 2N\sigma} \left[ 1 - \frac{N-1}{L - 2N\sigma}(x - \sigma) \right] \quad (9)$$

Interprétez physiquement ce résultat. Comment interprétez-vous la décroissance linéaire en  $(x - \sigma)$ ?

\* **Q7.** Nous allons maintenant étudier numériquement la distribution de probabilité  $\pi_{L,N,\sigma}(x)$ . Fixons les paramètres  $L = 20$  et  $\sigma = 0.75$ .

- a) Pour toutes  $N \in \{1, 5, 10\}$  comparez l'histogramme obtenu par simulation de l'algorithme en **C** avec la formule analytique de la distribution  $\pi_{L,N,\sigma}(x)$  défini en eq. (8).
- b) Intéressons-nous maintenant à la forme de la distribution  $\pi_{L,N,\sigma}(x)$  en étudiant directement l'expression théorique donnée par l'équation (8). Définissons trois ensembles de points caractéristiques pour la distribution  $\pi_{L,N,\sigma}$  :

$$\mathcal{A}_{N,L,\sigma} = \{x \in [\sigma, L - \sigma] \mid x \text{ est un minimum local de } \pi_{L,N,\sigma}\}, \quad (10)$$

$$\mathcal{B}_{N,L,\sigma} = \{x \in [\sigma, L - \sigma] \mid \pi_{L,N,\sigma}(x) = L^{-1}\}, \quad (11)$$

$$\mathcal{C}_{N,L,\sigma} = \{x \in [\sigma, L - \sigma] \mid x \text{ est un maximum local de } \pi_{L,N,\sigma}\}, \quad (12)$$

Pour toutes les valeurs de  $N \in \{1, 2, \dots, 9, 10\}$  et les valeurs de  $L$  et  $\sigma$  définies précédemment, déterminez numériquement<sup>2</sup> les ensembles  $\mathcal{A}_{N,L,\sigma}$ ,  $\mathcal{B}_{N,L,\sigma}$  et  $\mathcal{C}_{N,L,\sigma}$ .

Comment évolue la cardinalité de ces ensembles avec  $N$ ?

- c) Représentez sur un même graphique les points de  $\mathcal{A}_{N,L,\sigma}$ ,  $\mathcal{B}_{N,L,\sigma}$  et  $\mathcal{C}_{N,L,\sigma}$  en fonction de  $N$  : pour chaque  $N$  et pour chaque ensemble placez un point dans le plan cartésien de coordonnées  $(N, x)$  avec un couleur spécifique pour chaque ensemble.

<sup>2</sup>La méthode la plus simple consiste à évaluer la fonction de l'équation (8) pour  $n$  points uniformément répartis dans l'intervalle  $[\sigma, L - \sigma]$ . À partir de ce tableau de valeurs, identifiez les points recherchés. L'erreur sur les valeurs sera approximativement de  $(L - 2\sigma)/n$ . Une valeur de  $n = 10^6$  sera suffisante.

- d) Comment peut-on interpréter physiquement les régions autour des maxima et des minima de  $\pi_{N,L,\sigma}$ ? Que représentent ces zones en termes de configurations des pinces?

### Solution of Exercise 1

- Q1.** a) La distribution de probabilité dans l'équation (1) est donnée par un produit de plusieurs fonctions de Heaviside, chacune représentant une limite sur les valeurs que les variables impliquées peuvent prendre. L'absence de termes supplémentaires rend la distribution de probabilité uniforme sur toutes les configurations autorisées.  
b) Le premier produit, impliquant  $N(N-1)/2$  termes, passe en revue tous les couples de variables et les contraint à avoir une distance d'au moins  $2\sigma$  entre eux, puisque c'est la distance minimale entre les centres des broches qui leur permet de ne pas se chevaucher. Le second produit, impliquant toutes les  $N$  variables, s'assure que les épingles sont complètement à l'intérieur de l'intervalle  $[0, L]$ , en imposant que le centre de l'épingle soit à une distance d'au moins  $\sigma$  de la frontière.  
c) Puisque les épingles sont étiquetées et que chacune des positions est attachée à une épingle donnée, on considère que les particules peuvent être distinguées.

**Q2.** Voir le notebook

- Q3.** a) En outre,  $\pi_L(x_1, x_2, \dots, x_N)$  est symétrique dans ses arguments. Cela signifie que pour toute permutation  $\sigma \in \mathcal{S}_N$  des  $N$  indices, nous avons

$$\pi(x_1, \dots, x_N) = \pi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}). \quad (13)$$

Au total, il y a  $N!$  permutations, chacune donnant la même contribution à la fonction de partition. Nous voulons maintenant argumenter que cela implique différents secteurs d'intégrations pour l'intégrale de la fonction de partition. Nous précisons qu'un secteur d'intégration est une région de composantes connectées où la valeur de  $\pi$  est non nulle. Grâce à la réponse précédente, nous savons qu'en raison de la symétrie de permutation, l'intégration peut être divisée en  $N!$  régions. Ces régions sont également déconnectées parce que pour passer d'un ordre donné à un autre, il faut passer par une configuration non autorisée, c'est-à-dire  $\pi = 0$ .

Nous pouvons alors sélectionner un ordre et le multiplier par  $N!$  pour obtenir la fonction de partition totale.

- b) Si l'on choisit l'ordre  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$ , la fonction  $\mathcal{T}$  permet de ne sélectionner que les configurations ayant cet ordre, donc un seul des secteurs d'intégration. Par l'argument du point précédent, si on multiplie par  $N!$  on obtient la fonction de partition totale. La restriction dans le domaine d'intégration vient directement de la définition de  $\pi$ , comme nous l'avons vu dans Q1. Cela ne permet pas aux épingles d'être en dehors de l'intervalle  $[0, L]$ . Cela devient donc

$$Z_{N,L} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \pi_L(x_1, \dots, x_N) \quad (14)$$

$$\stackrel{(a)}{=} \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \pi_L(x_1, \dots, x_N) \quad (15)$$

$$\stackrel{(b)}{=} \left[ \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \mathcal{T}(x_1, x_2, \dots, x_N) + \right. \quad (16)$$

$$\int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \mathcal{T}(x_2, x_1, \dots, x_N) + \dots$$

$$\left. \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \mathcal{T}(x_N, x_{N-1}, \dots, x_1) \right] \pi_L(x_1, \dots, x_N)$$

$$\stackrel{(c)}{=} N! \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \cdots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \mathcal{T}(x_1, x_2, \dots, x_N) \pi_L(x_1, \dots, x_N) \quad (17)$$

nous pouvons également supprimer la partie de l'intégration liée au fait que les broches doivent être sur la ligne en  $[\sigma, L - \sigma]$ .

Plus précisément, nous avons que (a) découle du fait qu'en dehors de la plus petite région  $\pi_L$  est nul, (b) de l'analyse précédente des différentes régions d'intégration et enfin (c) du fait que l'intégrale dans chacune de ces régions est la même, rappelons que le nombre de permutations est  $N!$ .

- c) Nous pouvons commencer le calcul à partir de la première épingle,  $k = 1$ . En raison de la bordure gauche, nous avons besoin d'un espace  $\sigma$  comme espace minimal avant la quille. Il en va de même pour  $k = 2$ , mais nous devons maintenant tenir compte de l'espace occupé par la première cheville (qui est de  $2\sigma$ ). En général, puisque la quille  $k$  aura  $k - 1$  quilles à sa gauche, l'espace minimal à sa gauche sera  $(k - 1) \cdot 2\sigma + \sigma = (2k - 1)\sigma$ .

Pour les limites d'intégration des variables  $y_k$ , à partir des bornes sur  $x_k$  on obtient directement

$$\sigma - (2k - 1)\sigma < y_k < L - \sigma - (2k - 1)\sigma = L - 2k\sigma. \quad (18)$$

De plus, la condition d'ordre imposée aux variables  $x$  combinée au terme  $\theta(|x_i - x_j| - 2\sigma)$  pour tous  $i < j$  provenant de la définition de  $\pi_L$ , nous avons le terme  $\theta(x_{k+1} - x_k - 2\sigma)$  pour tout  $k$ , qui en termes de nouvelles variables devient simplement  $\theta(y_{k+1} - y_k)$ , ce qui signifie que les nouvelles variables sont également ordonnées.

Mais alors, en regardant l'Eq. (18), combiné avec l'ordonnancement, il impose les contraintes suivantes

$$0 = \sigma - (2 - 1)\sigma < y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N < L - 2N\sigma. \quad (19)$$

- d) Pour revenir à l'Eq. (14), en termes de nouvelles variables, elle devient

$$Z_{N,L} = N! \int_{y_{N-1}}^{L-2N\sigma} dy_N \dots \int_{y_1}^{y_3} dy_2 \int_0^{y_2} dy_1 = \quad (20)$$

$$= N! \int_0^{L-2N\sigma} dy_N \dots \int_0^{L-2N\sigma} dy_2 \int_0^{L-2N\sigma} dy_1 \mathcal{T}(y_1, y_2, \dots, y_N), \quad (21)$$

où  $\mathcal{T}$  est à nouveau la même fonction d'ordonnancement. Maintenant, par le même raisonnement pour lequel au point b) nous avons fait apparaître le facteur  $N!$  (en choisissant un ordre), nous pouvons maintenant relâcher l'ordre et cela fera disparaître le facteur  $N!$  :

$$Z_{N,L} = \int_0^{L-2N\sigma} dy_N \dots \int_0^{L-2N\sigma} dy_2 \int_0^{L-2N\sigma} dy_1 = (L - 2N\sigma)^N. \quad (22)$$

- Q4.** a) Par définition de l'algorithme B, à la  $n$ -ième étape, nous essayons de placer la  $n$ -ième épingle en générant sa position uniformément aléatoire dans  $[\sigma, L - \sigma]$  et en vérifiant qu'elle satisfait aux conditions de  $\pi_N$ . A valeur fixe des  $N - 1$  quilles précédentes  $x_1, \dots, x_{N-1}$ , nous avons que

$$\text{Prob}(\text{Acc N-eme} | x_1, \dots, x_{N-1}) = \frac{1}{L - 2\sigma} \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \pi(x_N | x_1, \dots, x_{N-1}) \quad (23)$$

où  $\pi(x_N | x_1, \dots, x_{N-1})$  est la probabilité que  $x_N$  satisfasse les contraintes de  $\pi$ , étant donné que les  $N - 1$  précédents satisfont les contraintes elles-mêmes. Si l'on veut la probabilité moyenne, il faut faire la moyenne sur les autres variables, ce qui donne l'expression du texte.

Rendre l'espérance explicite :

$$p_{\text{acc}}^{N-\text{eme}} = \mathbb{E}_{X_1, \dots, X_{N-1}} [\text{Prob}(\text{Acc N-eme} | x_1, \dots, x_{N-1})] = \quad (24)$$

$$= \frac{1}{Z_{N-1}} \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \dots \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_{N-1} \frac{1}{L - 2\sigma} \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_N \pi(x_N | x_1, \dots, x_{N-1}) \pi(x_1, \dots, x_{N-1}) = \quad (25)$$

$$= \frac{Z_N}{(L - 2\sigma) Z_{N-1}}. \quad (26)$$

Pour revenir à la probabilité d'acceptation de l'ensemble de l'algorithme, nous avons que

$$p_{\text{acc}}^{\text{alg}} = p_{\text{acc}}^{1-\text{er}} * p_{\text{acc}}^{2-\text{eme}} * \dots * p_{\text{acc}}^{N-\text{eme}}. \quad (27)$$

Il est facile de comprendre que  $p_{\text{rmacc}}^{1-\text{er}} = 1$ , puisque la première épingle est toujours acceptée, et que  $Z_1 = \int_{\sigma}^{L-\sigma} dx_1 \pi(x_1) = L - 2\sigma$ . La probabilité d'acceptation totale sera alors

$$p_{\text{acc}}^{\text{alg}} = 1 * \frac{\cancel{Z_2}}{(L - 2\sigma) Z_1} * \frac{\cancel{Z_3}}{(L - 2\sigma) \cancel{Z_2}} * \frac{\cancel{Z_4}}{(L - 2\sigma) \cancel{Z_3}} * \dots * \frac{Z_N}{(L - 2\sigma) Z_{N-1}} = \quad (28)$$

$$= \frac{Z_N}{(L - 2\sigma)^{N-1} Z_1} = \frac{(L - 2N\sigma)^N}{(L - 2\sigma)^N} \quad (29)$$

(Voir notebook python pour la comparaison avec les simulations).

- b) Le résultat  $p_{\text{acc}} = 1/N!$  provient d'un simple argument combinatoire : Étant donné  $N$  broches indépendantes, générées uniformément dans le même intervalle, tous les ordres sont également probables. Puisqu'il y a  $N!$  de ces commandes au total, la probabilité d'obtenir une commande spécifique est de  $1/N!$ .
- c) Pour justifier le fait que la réorganisation n'affecte pas la validité de l'algorithme d'échantillonnage, nous pouvons décomposer la procédure en deux étapes : Nous commençons par échantillonner les valeurs des  $N$  nombres, sans décider de leur ordre, puis nous échantillonons une permutation  $P$  donnant l'ordre aux nombres. La fonction de partition correspondant à cette procédure is

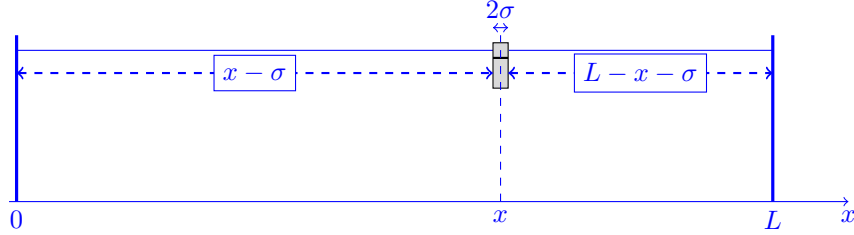
$$\sum_P \int_0^{L-2N\sigma} dy_{P_1} \cdots \int_0^{L-2N\sigma} dy_{P_N} \mathcal{T}(y_{P_1}, \dots, y_{P_N}), \quad (30)$$

ce qui n'est qu'une autre façon de réécrire la fonction de partition dans l'Eq. (20). Mais maintenant, parmi toutes les permutations possibles, effectivement la seule qui donne une contribution non nulle est celle qui trie les nombres, ce qui correspond au choix fait dans l'algorithme proposé. Comme cette procédure n'est jamais rejetée, la probabilité d'acceptation est de un.

**Q5.** Voir le notebook

- Q6.** a) Considérons une pince positionnée à  $x$ . En raison de la contrainte de volume exclu (les pinces ont une largeur  $2\sigma$ ), aucune autre pince ne peut être placée dans les intervalles  $[x-\sigma, x]$  et  $[x, x+\sigma]$  car cela créerait un chevauchement. Cette contrainte divise naturellement l'espace disponible en deux régions distinctes où les autres pinces peuvent être placées: à gauche on a l'intervalle  $[0, x-\sigma]$  et à droite l'intervalle  $[x+\sigma, L]$ .

On peut illustrer cette contrainte avec le schéma suivant



- b) Pour calculer la probabilité totale de trouver une pince en  $x$  parmi le  $N$  pinces totales, nous devons compter toutes les événements favorables pour obtenir ce résultat. Pour avoir une pince en position  $x$  on doit avoir nécessairement que  $k$  pinces à gauche et  $N-1-k$  pinces à droite pour toutes les valeurs de  $k$ .

Pour un  $k$  donné on a que

- Nous devons choisir  $k$  pinces parmi les  $N-1$  pinces restantes pour les placer à gauche, ce nombre est  $\binom{N-1}{k}$
- Les  $k$  pinces de gauche doivent être placées dans l'intervalle  $[0, x-\sigma]$ . On doit compter toutes les configurations de ces  $k$  pinces et donc on peut écrire la  $Z_{k, x-\sigma}$ . Également pour la partie droite.

Pour une valeur de  $k$  fixée, la probabilité est donc proportionnelle à

$$\binom{N-1}{k} Z_{k, x-\sigma} Z_{N-1-k, L-x-\sigma} \quad (31)$$

En sommant sur toutes les valeurs possibles de  $k$  et en normalisant par  $Z_{N,L}$  pour obtenir une densité de probabilité, on obtient eq. (8).

- c) Pour  $x \gtrsim \sigma$ , seul le terme  $k=0$  contribue à la somme car il n'y a pas assez d'espace à gauche pour placer d'autres pinces. Equation (8) se réduit donc à

$$\pi_{L,N}(x \gtrsim \sigma) = \frac{Z_{N-1, L-x-\sigma}}{Z_{N,L}} \quad (32)$$

En utilisant la formule pour la fonction de partition obtenue précédemment

$$Z_{N,L} = (L - 2N\sigma)^N \quad (33)$$

$$Z_{N-1, L-x-\sigma} = (L - x - \sigma - 2(N-1)\sigma)^{N-1} \quad (34)$$

on peut écrire

$$\pi_{L,N}(x \gtrsim \sigma) = \frac{(L - x - \sigma - 2(N-1)\sigma)^{N-1}}{(L - 2N\sigma)^N} \quad (35)$$

$$= \frac{1}{L - 2N\sigma} \left( 1 - \frac{x - \sigma}{L - 2N\sigma} \right)^{N-1} \quad (36)$$

$$\approx \frac{1}{L - 2N\sigma} \left[ 1 - \frac{N-1}{L - 2N\sigma} (x - \sigma) \right] \quad (37)$$

où la dernière ligne utilise le développement  $(1 + y)^n \approx 1 + ny$  pour  $y \ll 1$ .

Ce résultat montre deux choses importants

- La probabilité au bord ( $x = \sigma$ ) est  $\frac{1}{L-2N\sigma}$ , soit bien plus grande que la densité uniforme de  $\frac{1}{L}$
- La probabilité décroît linéairement (en première approximation) avec la distance au bord ( $x - \sigma$ )

*Ce modèle simple de pinces à linge illustre le concept fondamental des forces entropiques. Contrairement aux forces usuelles comme la gravité ou l'électromagnétisme, ces forces émergent purement de considérations statistiques et géométriques. La surconcentration des pinces près des bords, révélée par le dernière développement est une manifestation de cette force entropique. Ce phénomène se retrouve dans de nombreux systèmes biologiques et colloïdaux, comme l'interaction de déplétion d'Asakura-Oosawa entre particules colloïdales en présence de polymères. Cette force, bien que d'origine purement entropique, peut être suffisamment forte pour induire des transitions de phase et joue un rôle crucial dans l'auto-organisation de la matière molle.*

**Q7.** Voir le notebook