

Projet 1

Sphères dures en dimension 1

sujet proposé par Lucas Gerin

lucas.gerin@polytechnique.edu

Outils de MAP361 : Probabilités conditionnelles, Combinatoire, Convergence de variables aléatoires...
Domaine d'application : Physique statistique

En physique statistique, les sphères dures sont un modèle d'interaction entre particules dans lequel ces dernières sont représentées par des sphères de taille identique disposées sur un réseau régulier (typiquement, \mathbb{Z}^d) et qui ne peuvent se toucher. Ce modèle d'apparence très simple est très difficile à analyser mathématiquement en dimension $d \geq 2$.

L'objectif du projet est d'analyser et simuler deux modèles aléatoires de sphères dures en dimension 1.

1.1 Modèle dynamique

1.1.1 Définition et simulation du modèle

Soit $N \geq 2$ fixé, on considère l'ensemble $\mathcal{I}_N = \{0, 1, 2, \dots, N, N+1\}$ qui est vu comme un milieu en dimension 1 sur lequel vont s'accrocher des particules appelées *sphères dures*.

Pour $t \in \mathbb{N}$ et $1 \leq k \leq N$ on va noter $M_t(k) = 0$ ou 1 selon que la position k est libre ou occupée par une sphère à l'instant t . Initialement tout est vide :

$$M_0(0) = M_0(1) = M_0(2) = M_0(3) = \dots = M_0(N) = M_0(N+1) = 0.$$

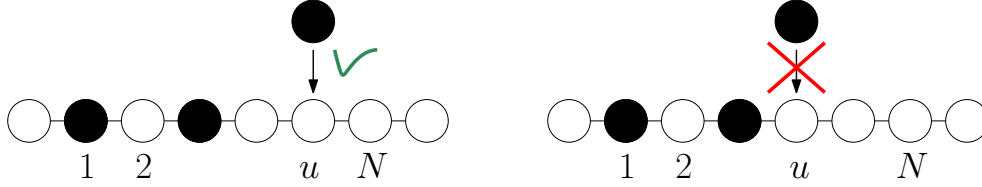
Le processus $t \mapsto (M_t(k))_{t \geq 0, k \leq N}$ évolue de la façon suivante :

- Pour chaque $t \geq 1$ on tire une variable aléatoire U_t uniforme dans $\{1, 2, \dots, N\}$. Les (U_t) sont supposées indépendantes. Supposons que $U_t = u$, deux situations sont possibles (voir le schéma plus bas) :
 - Si les positions $u-1, u, u+1$ sont libres (c'est-à-dire $M_{t-1}(u-1) = M_{t-1}(u) = M_{t-1}(u+1) = 0$) alors une sphère vient s'accrocher en u :

$$M_t(u) = 1$$

et les N autres coordonnées restent inchangées : $M_t(v) = M_{t-1}(v)$ pour tout $v \neq u$. C'est le cas de gauche dans le schéma.

- Si l'une au moins des positions $u - 1, u, u + 1$ est occupée alors rien ne se passe et $M_t(v) = M_{t-1}(v)$ pour tout v . C'est le cas de droite.
- On remarque au passage que les positions 0 et $N + 1$ vont toujours rester libres.



Le processus continue jusqu'à ce qu'il n'y ait plus dans la configuration M_t trois positions consécutives inoccupées. On dit que la configuration est *saturée*.

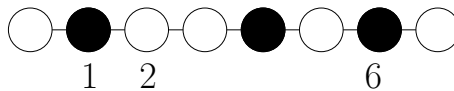
Remarque : On admet pour l'instant que le processus finit forcément par s'arrêter et atteindre une configuration saturée. Ceci sera démontré à la Question T4.

On note $M_t = (M_t(0), M_t(1), \dots, M_t(N + 1))$ la configuration à l'instant t et on note $M_\infty := (M_\infty(0), M_\infty(1), \dots, M_\infty(N + 1))$ la configuration finale après saturation. Les variables aléatoires M_t et M_∞ sont donc à valeurs dans $\{0, 1\}^{N+2}$.

Voici un exemple d'évolution du processus (M_t) dans le cas $N = 6$:

$$\begin{aligned}
 M_0 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\
 U_1 &= 6, & M_1 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0) \\
 U_2 &= 5, & M_2 &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0) \\
 U_3 &= 4, & M_3 &= (0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0) \\
 U_4 &= 1, & M_4 &= (0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0)
 \end{aligned}$$

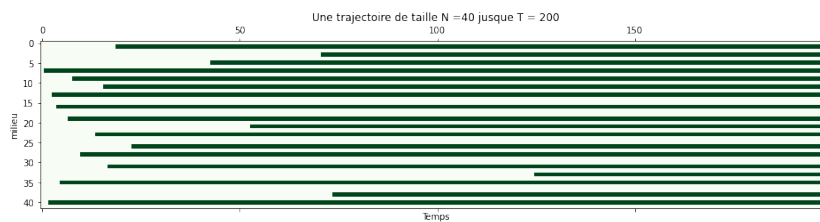
et le processus s'arrête, on a donc $M_\infty = (0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0)$. Schématiquement, M_∞ peut se représenter par :



S1. Afficher une trajectoire du processus $(M_t)_{0 \leq t \leq T}$. On utilisera la représentation suivante : la trajectoire va être codée par une matrice $(N + 2) \times T$ où le coefficient (k, t) est la variable $M_t(k)$. Pour afficher une matrice M , et donc la trajectoire, une façon simple avec `matplotlib` est d'utiliser `plt.matshow(M)`.

On choisira les paramètres suivants : $N = 40, T = 200$.

Solution.



1.1.2 Densité de sphères

On note $X_t(N) \in \{0, 1, \dots, N\}$ (resp. $X_\infty(N)$) le nombre de positions occupées par une sphère après l'étape t (resp. à la fin du processus) c'est-à-dire

$$\begin{aligned} X_t(N) &= M_t(1) + M_t(2) + \dots + M_t(N) \\ X_\infty(N) &= M_\infty(1) + M_\infty(2) + \dots + M_\infty(N). \end{aligned}$$

Un résultat remarquable¹ est que $X_\infty(N)$ croît linéairement et que plus précisément

$$\frac{1}{N} \mathbb{E}[X_\infty(N)] \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{2}(1 - e^{-2}) \approx 0.43233\dots$$

Remarque : Ce résultat théorique semble compatible avec des résultats expérimentaux réalisés avec du méthylvinylcétone².

T1. Pour le cas $N = 3$ déterminer la loi de $M_\infty(3)$, la loi de $X_\infty(3)$ et en déduire $\mathbb{E}[X_\infty(3)]$.

Solution. On fixe donc $N = 3$. On a pour $t = 1$ trois cas (équiprobables) :

$$M_1 = (0, 0, 1, 0, 0), \quad M_1 = (0, 1, 0, 0, 0), \quad M_1 = (0, 0, 0, 1, 0).$$

Le premier cas est saturé alors que les deux autres cas vont mener à $(0, 1, 0, 1, 0)$. Finalement

$$M_\infty(3) = \begin{cases} (0, 1, 0, 1, 0) \text{ avec proba. } 2/3 \\ (0, 0, 1, 0, 0) \text{ avec proba. } 1/3 \end{cases}.$$

Et donc

$$X_\infty(3) = \begin{cases} 2 \text{ avec proba. } 2/3 \\ 1 \text{ avec proba. } 1/3 \end{cases}.$$

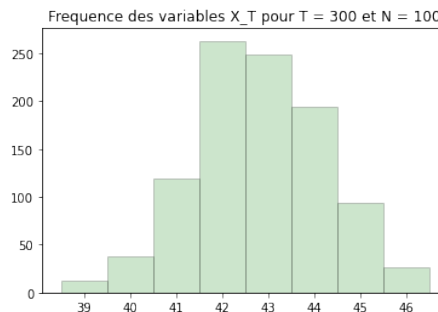
et on a $\mathbb{E}[X_\infty(3)] = 5/3$.

S2. Simuler $K = 1000$ fois la variable $X_T(N)$ pour $N = 100$ et $T = 300$. Afficher un histogramme des valeurs obtenues. Calculer également la moyenne de vos K valeurs et comparer avec $\frac{1}{2}(1 - e^{-2})$. Avec `matplotlib` un histogramme des valeurs `Donnees` avec comme classes $\{39, 40, \dots, 47\}$ s'affiche avec

```
plt.hist(Donnees, np.arange(38.5, 48.5), ec='black')
```

(l'argument `ec='black'` sert à dessiner les bords des bâtons).

Solution. Je trouve une moyenne de 0,428.... assez proche du résultat théorique. On observe par ailleurs un histogramme assez concentré :



¹Une preuve accessible au niveau MAP361 est donnée ici : R.Pinsky. *Problems from the Discrete to the Continuous*. Springer (2014).

²C.S.Marvel, C.L.Levesque, *Journal of the American Chemical Society*, vol.60 (1938).

On cherche maintenant à valider la convergence théorique vers $(1 - e^{-2})/2$ par un calcul numérique exact (et pas par simulation). On pose $e_{-1} = 0, e_0 = 0, e_1 = 1$ et pour $N \geq 2$, $e_N = \mathbb{E}[X_\infty(N)]$. On cherche un moyen de calculer numériquement e_N .

T2. Justifier que pour tout $N \geq 2$ on a

$$e_N = 1 + \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N (e_{u-2} + e_{N-u-1}). \quad (\star)$$

(Indication : On peut conditionner par rapport à U_1 .)

Solution. On conditionne par rapport à la position U_1 de la première sphère. D'après le Th.3.33 du Polycopié on a

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X_\infty(N)] &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[X_\infty(N) \mid U_1]] \\ &= \sum_{u=1}^N \mathbb{E}[X_\infty(N) \mid U_1 = u] \mathbb{P}(U_1 = u) \\ &= \sum_{u=1}^N \frac{1}{N} \mathbb{E}[X_\infty(N) \mid U_1 = u] \end{aligned}$$

Si maintenant on a $U_1 = u$ alors tout va se passer comme si deux processus indépendants se déroulent à gauche et à droite de u , d'où la formule.

S3. Écrire un script python qui permet de calculer e_N en utilisant l'équation (\star) . Donner la valeur de e_{100} .

Solution. Je trouve $e_{100} = 43.53023291\dots$

1.1.3 Courbe limite du processus de densité X_t

À N fixé le processus $(X_t)_{t \geq 0}$ est croissant au cours du temps et finit par s'arrêter à la valeur $X_\infty(N)$, dont l'espérance est proche de $N(1 - e^{-2})/2$ d'après les questions précédentes. On cherche maintenant à décrire plus précisément le processus $(X_t)_{t \geq 0}$.

On pose

$$\mathbf{x} : s \mapsto \frac{1}{2} (1 - \exp(-2(1 - e^{-s}))).$$

Il a été démontré³ que lorsque $N \rightarrow +\infty$ le processus $(X_t)_{t \geq 0}$ suit une courbe de plus en plus proche de celle de $N \times \mathbf{x}(t/N)$. Formellement, pour tout réel $S > 0$ et tout réel $\varepsilon > 0$

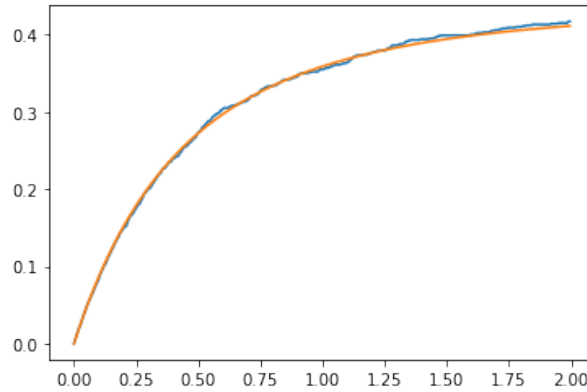
$$\mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq s \leq S} \left| \frac{1}{N} X_{\lfloor sN \rfloor} - \mathbf{x}(s) \right| > \varepsilon \right) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0, \quad (\oplus)$$

où $\lfloor z \rfloor$ désigne la partie entière d'un réel z .

S4. Afficher le graphique d'une simulation qui permet d'illustrer la convergence (\oplus) . (À vous de choisir le type de simulation, ainsi que N, S .)

³C'est une conséquence de l'éq.(19) dans : P.C.Hemmer. The random parking problem. *Journal of Statistical Physics*, vol.57, n.3, p. 865-869 (1989).

Solution. Pour $N = 1000$, $T = 2$ on trace sur le même graphique une simulation du processus $s \mapsto \frac{1}{N}X_{[sN]}$ et la courbe $t \mapsto x(s)$:



1.1.4 Fin du processus

On cherche à montrer que le processus s'arrête forcément, et donner une estimation du temps nécessaire pour saturer. On note $F_N \in \{0, 1, 2, \dots\}$ la variable aléatoire donnée par le premier instant auquel la configuration est saturée.

T3. Justifier que

$$\{F_N > t\} \subset \bigcup_{u \in \{1, 2, \dots, N\}} \{ \text{Pour tout } s \leq t, U_s \neq u \}.$$

T4. En déduire que

$$\mathbb{P}(F_N > t) \leq N \left(1 - \frac{1}{N}\right)^t. \quad (\#)$$

et démontrer que le processus s'arrête forcément : $F_N < +\infty$ presque-sûrement.

Solution. Supposons $F_N > t$. Alors il existe (au moins) deux positions $(u-1, u, u+1)$ dans le milieu qui sont vides à l'instant t :

$$\{F_N > t\} \subset \bigcup_{u \in \{1, 2, \dots, N\}} \{M_t(u-1) = M_t(u) = M_t(u+1) = 0\}.$$

Mais si cet événement est réalisé alors forcément pour tout $s \leq t$ on a $U_s \neq u$.

On utilise $\mathbb{P}(\cup) \leq \sum \mathbb{P}$ dans l'inclusion ci-dessus. On a pour tout t :

$$\mathbb{P}(F_N = +\infty) \leq \mathbb{P}(F_N > t).$$

Comme le terme de droit est arbitrairement petit, on a $\mathbb{P}(F_N = +\infty) = 0$.

1.2 Modèle uniforme

On note \mathcal{S}_N l'ensemble des configurations saturées sur \mathcal{I}_N :

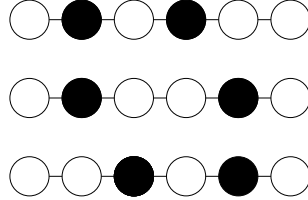
$$(c_0, \dots, c_{N+1}) \in \{0, 1\}^{N+2} \in \mathcal{S}_N \Leftrightarrow \begin{cases} \text{Bords vides :} & c_0 = c_{N+1} = 0, \\ \text{Contrainte de sphères dures :} & \forall 0 \leq i \leq N, c_i \times c_{i+1} = 0, \\ \text{Saturation :} & \forall 0 \leq i \leq N-1, c_i + c_{i+1} + c_{i+2} \geq 1. \end{cases}$$

On note $C^{(N)}$ une configuration uniforme dans \mathcal{S}_N . Comme l'était M_∞ précédemment, $C^{(N)}$ est une variable aléatoire dans $\{0, 1\}^{N+2}$. On écrit $C^{(N)} = (C^{(N)}(0), C^{(N)}(1), \dots, C^{(N)}(N+1))$.

Remarque : Le modèle uniforme est donc complètement statique, il n'y a plus de notion de temps.

On note $Z_N = C^{(N)}(1) + \dots + C^{(N)}(N)$ le nombre de sphères dans la configuration $C^{(N)}$. L'objectif est d'étudier numériquement le comportement asymptotique de $\mathbb{E}[Z_N]$.

On pose $s_0 = s_1 = 1, s_2 = 2$ et pour $N \geq 2$ on pose $s_N = \text{card}(\mathcal{S}_N)$, par exemple $s_4 = 3$:



(Au passage on voit que pour $N = 4$ la variable Z_4 est constante et égale à 2.)

T5. Démontrer que pour tout $N \geq 3$,

$$s_N = s_{N-2} + s_{N-3}.$$

Solution. Une configuration saturée \mathcal{S}_N se termine soit par une sphère, soit par une position vide précédée d'une sphère.

$$\mathcal{S}_N \simeq \mathcal{S}_{N-2} \cup \mathcal{S}_{N-3}.$$

S5. En déduire une fonction python qui calcule s_N . Donner la valeur de s_{100} .

Solution. Je trouve $s_{100} = 1559831901918$.

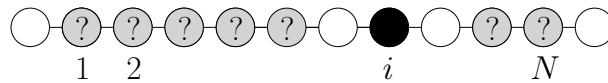
T6. On fixe $N \geq 3$. Pour tout $i \leq N$ la variable $C^{(N)}(i) \in \{0, 1\}$ désigne l'absence/présence d'une sphère en position i dans une configuration uniforme de taille N .

- Montrer que pour $i = 1$ ou $i = N$,

$$\mathbb{P}(C^{(N)}(i) = 1) = \frac{s_{N-2}}{s_N}.$$

- Calculer $\mathbb{P}(C^{(N)}(i) = 1)$ pour tout $1 < i < N$.

Indication : Voici une représentation schématique de l'événement $\{C^{(N)}(i) = 1\}$:



Solution. On traite le deuxième cas. Si $C(i) = 1$ alors le site i est entouré de deux positions vides. Ceci définit alors deux configurations (à gauche et à droite) dans \mathcal{S}_{i-2} et \mathcal{S}_{N-i-1} . Formellement il y a une bijection

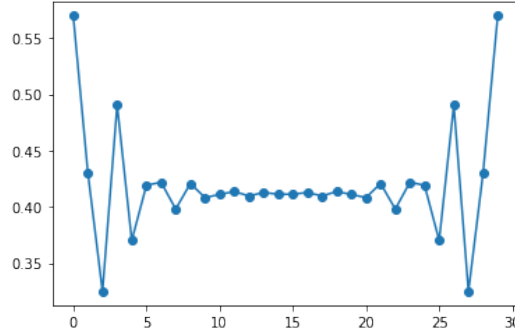
$$\{\text{Configurations telles que } C(i) = 1\} \simeq \mathcal{S}_{i-2} \times \mathcal{S}_{N-i-1}.$$

Finalement

$$\mathbb{P}(C^{(N)}(i) = 1) = \begin{cases} \frac{s_{N-2}}{s_N} & \text{si } i = 1 \text{ ou } i = N, \\ \frac{s_{i-2} \times s_{N-i-1}}{s_N} & \text{sinon.} \end{cases}$$

S6. Pour $N = 30$ tracer la fonction $i \mapsto \mathbb{P}(C^{(N)}(i) = 1)$. Quelle est la position dans $\{1, \dots, N\}$ qui a le plus de chance d'être vide dans $C^{(N)}$?

Solution.



T7. (Bonus, Hors-barème) En combinant les question T5 et T6, calculer de façon exacte la constante ρ telle que $\mathbb{E}[Z_N] \sim N\rho$.

Solution. À partir de la formule pour récurrence de s_N on trouve que

$$s_N \sim \frac{r^{n+6}}{2r+3},$$

où r est la solution réelle de $r^3 = r + 1$. On déduit de la question T6 que

$$\mathbb{E}[Z_N] \sim N \frac{r^3}{2r+3} \sim N \times 0.41149558866 \dots$$

1.2.1 Simulation de la loi uniforme

Il n'est pas évident du tout *a priori* de simuler la mesure uniforme sur \mathcal{S}_N . La méthode du rejet n'est pas envisageable : pour $N = 100$ par exemple un élément uniforme de $\{0, 1\}^{N+2}$ a seulement une probabilité $\simeq 10^{-18}$ d'être une configuration de sphères dures.

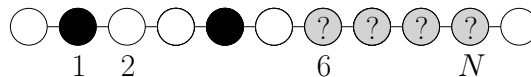
Une solution consiste à simuler successivement $C^{(N)}(1)$ puis $C^{(N)}(2), C^{(N)}(3), \dots$, jusqu'à $C^{(N)}(N)$. On a déjà déterminé la loi de $C^{(N)}(1)$ à la question T6, on peut déterminer la loi de chaque $C^{(N)}(i)$ conditionnellement aux $i - 1$ valeurs précédentes en utilisant la méthode de la question T6. Pour simplifier on ne va faire que le cas $i = 3$.

T8. Soit $N \geq 5$. En vous inspirant de la question T6, déterminez la loi jointe de $(C^{(N)}(1), C^{(N)}(2), C^{(N)}(3))$.

Solution. Les 3 seuls cas possibles sont:

$$010, 100, 101.$$

Le premier cas arrive avec proba $\mathbb{P}(C^{(N)}(1) = 0) = 1 - \frac{s_{N-2}}{s_N}$. Calculons la proba du second cas, les configurations correspondantes sont :



Et donc finalement puisqu'on somme à 1 :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(C^{(N)}(1), C^{(N)}(2), C^{(N)}(3)) &= (0, 1, 0) = 1 - \frac{s_{N-2}}{s_N}, \\ \mathbb{P}(C^{(N)}(1), C^{(N)}(2), C^{(N)}(3)) &= (1, 0, 0) = \frac{s_{N-5}}{s_N}, \\ \mathbb{P}(C^{(N)}(1), C^{(N)}(2), C^{(N)}(3)) &= (1, 0, 1) = \frac{s_{N-2}}{s_N} - \frac{s_{N-5}}{s_N} = \frac{s_{N-3}}{s_N}.\end{aligned}$$

S7. Pour $N = 30$ simuler 10000 fois des triplets $(C^{(N)}(1), C^{(N)}(2), C^{(N)}(3))$ et afficher un graphique qui permet de comparer au résultat théorique de la question S6.

Solution.

