Suites et Séries – TP$_{14}$

12-13 décembre 2021

Dénombrement et physique statistique

1. Pour chaque boule, on lui attribue une boîte (1 ou 2) : c'est un tirage de $\{1,2\}$ avec ordre (car les boules sont numérotées) et avec remise, on considère donc l'ensemble des N-listes de $\{1,2\}$. Il y en a 2^N.

   Pour K boîtes, on considère l'ensemble des N-listes de $\{1,\dots,K\}$. Il y en a K^N.
2. Pour une répartition de 9 joueurs en 3 équipes numérotées de 3 joueurs :
   - on choisit 3 joueurs parmi les 9 et on les place dans dans la première équipe ;
   - on choisit 3 joueurs parmi les 6 restants et on les place dans la deuxième équipe ;
   - on place les 3 joueurs restants dans la dernière équipe.

   Le nombre de choix possibles est :
$$\binom{9}{3}\binom{6}{3} = \frac{9!}{(3!)^3} = 1680$$
   Dans le cas général, on choisit n_1 joueurs parmi N joueurs dans la première équipe, puis n_2 joueurs parmi les $N-n_1$ restants dans la deuxième équipe, etc. et ainsi de suite. Le nombre de choix possibles est :
$$\prod_{i=1}^{K}\binom{N-n_1-\cdots-n_{i-1}}{n_i} = \frac{N!}{n_1!\,n_2!\,\cdots\,n_K!}$$
3. Il y a trois cas à distinguer.
   - Pour $N=1$, l'ensemble des micro-états possibles est $\{(G),(D)\}$, il y a donc deux macro-états possibles : $E_0=\{(D)\}$ (avec $\Omega_0=1$) et $E_1=\{(G)\}$ (avec $\Omega_1=1$).
   - Pour $N=2$, l'ensemble des micro-états possibles est
$$\{(GG),(GD),(DG),(DD)\}$$
     Il y a donc 3 macro-états possibles : $E_0=\{(DD)\}$ (avec $\Omega_0=1$), $E_1=\{(GD),(DG)\}$ (avec $\Omega_1=2$) et $E_2=\{(GG)\}$ (avec $\Omega_2=1$).
   - Pour $N=3$, l'ensemble des micro-états possibles est
$$\{(GGG),(GGD),(GDG),(GDD),(DGG),(DGD),(DDG),(DDD)\}$$
     Il y a donc 4 macro-états possibles : $E_0=\{(DDD)\}$ (avec $\Omega_0=1$), $E_1=\{(GDD),(DGD),(DDG)\}$ (avec $\Omega_1=3$), $E_2=\{(GGD),(GDG),(DGG)\}$ (avec $\Omega_2=1$) et $E_3=\{(GGG)\}$ (avec $\Omega_3=1$).
4. Soit $N\in\mathbb{N}^*$. Il y a 2^N micro-états (d'après la question 1) et $N+1$ macro-états car un macro-état est défini par le nombre $k\in\{0,\dots,N\}$ de particules dans la boîte de gauche. Pour un macro-état E_k donné, choisir un micro-état correspondant revient à choisir k particules parmi N pour les mettre dans la boite de gauche donc
$$\Omega_k = \mathrm{Card}(E_k) = \binom{N}{k}$$

5. (a) L'univers Σ est l'ensemble des micro-états possibles muni de probabilité uniforme $\mathbb{P}$. On a donc, pour tout $k \in \{0, \dots N\}$,

$$\mathbb{P}(E_k) = \frac{\text{Card}(E_k)}{\text{Card}(\Sigma)} = \frac{\Omega_k}{2^N} = \frac{1}{2^N}\binom{N}{k}$$

car $\text{Card}(\Sigma) = 2^N$ d'après la question 1.

On trouve une loi binomiale de paramètre $p = \frac{1}{2}$. Si on note X le nombre de particules à gauche, on a

$$\mathbb{P}(X = k) = \binom{N}{k}\left(\frac{1}{2}\right)^k\left(\frac{1}{2}\right)^{N-k} = \frac{1}{2^N}\binom{N}{k}$$

(b) On utilise la méthode du cours.

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import binomial

N = 100
X = range(N + 1)   # entiers de 0 à N
Y = [binomial(100,k)/2**N for k in X]
plt.plot(X, Y, '.')
```

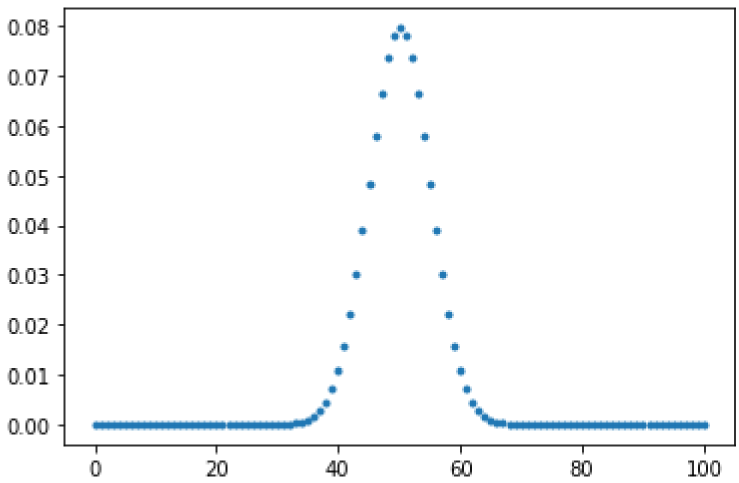

FIGURE 1 – Densité de probabilité des macro-états

On constate que parmis tous les macro-états, celui pour lequel les particules sont équitablement réparties eontre des deux boites est le plus probable.

(c) Soit $N \in \mathbb{N}^*$ pair, on peut donc écrire $N = 2L$ avec $L = N/2 \in \mathbb{N}^*$.

On rappelle la formule de Stirling *: pour $n \in \mathbb{N}^*$, on a*

$$n! \underset{n\to+\infty}{\sim} \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$$

On a :

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(E_{N/2}) = \mathbb{P}(E_L) &= \frac{1}{2^{2L}} \binom{2L}{L} \\
&= \frac{(2L)!}{(L!)^2\, 4^L} \\
&\underset{L \to +\infty}{\sim} \frac{(2L)^{2L} \sqrt{4\pi L}\, e^{2L}}{L^{2L}\, 4^L\, 2\pi L\, e^{2L}} \\
&\underset{L \to +\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi L}}
\end{aligned}$$

6. On va représenter l'évolution du système sous la forme sous la forme d'un graphe où on trace N_j, le nombre de particules dans la boite de gauche, en fonction du nombre de pas de temps j qui se sont passés (on parle de *marche aléatoire*).
À chaque pas de temps, on choisit une particule au hasard qui change de boîte. La probabilité qu'une particule de la boite gauche change de boite est donc $\frac{N_j}{N}$, tandis que la probabilité qu'une particule de la boite droite change de boite est $1 - \frac{N_j}{N} = \frac{N-N_j}{N}$.

```python
T = 3000
N = 1000
X = range(T+1)
position = N    # au départ, toutes les N particules à gauche
liste = [position]
for _ in range(T):
    x = np.random.choice([-1, 1], p=[position/N, (N-position)/N])
    position += x
    liste.append(position)

plt.plot(X, liste)
```

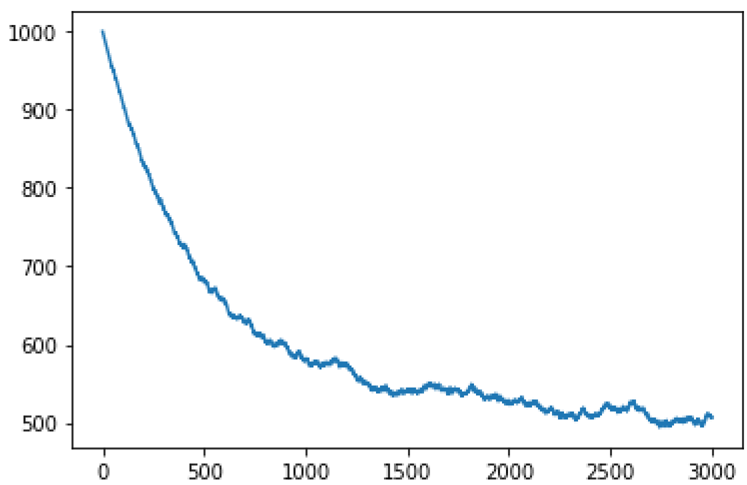

Figure 2 – Évolution du système.

Au cours de cette marche aléatoire, on fait passer le système par plusieurs micro-état successifs. On constate que le macro-état semble converger vers le macro-état où les particules se répartissent équitablement entre les deux boites. En effet, plus on attend, plus on est proche du cas où toutes les particules on été tirées au sort au moins une fois. Le cas où elles ont toutes été tirées au sort au moins une fois et placées avec proba $1/2$ dans une des boites revient (presque ?) à tirer au sort un macro-état avec la densité de probabilité établie en question 5.b. Il ne faut donc pas être surpris de trouver que « $E_k \to E_{N/2}$ » lorsque on itère suffisamment de fois l'algorithme.

La situation où toutes les particules ont été tirées au sort au moins une fois correspond à l'*hypothèse ergodique* (hypothèse au fondement de la physique statistique et qui suppose que tous les micro-états accessibles au système dans un macroétat donné sont équiprobables)

7. Les systèmes Σ_1 et Σ_2 sont indépendants (ils ne communiquent pas entre eux, une particule ne peut pas passer de Σ_1 à Σ_2). Tout macro-état de $\Sigma_{\{1+2\}}$ peut-être vu comme un produit cartésien de macro-états de Σ_1 et Σ_2 et est donc de taille $\Omega_{\{1+2\}} = \Omega_{\{1\}} \times \Omega_{\{2\}}$

   L'entropie totale est donc :

$$S(\Sigma_{\{1+2\}}) = k_B \log(\Omega_{\{1\}} \times \Omega_{\{2\}}) = k_B \log(\Omega_{\{1\}}) + k_B \log(\Omega_{\{2\}}) = S(\Sigma_{\{1\}}) + S(\Sigma_{\{2\}})$$

8. On reprend la démarche de la question 6.

```python
from sympy import log

def entropie(k,N):
    return log(binomial(N,k))

T = 3000
N = 1000
X = range(T+1)
position = N
S = [entropie(position,N)] # au départ, N particules à gauche
for _ in range(T):
    x = np.random.choice([-1,1], p=[position/N, (N-position)/N])
    position += x
    S.append(entropie(position,N))

plt.plot(X, S)
```

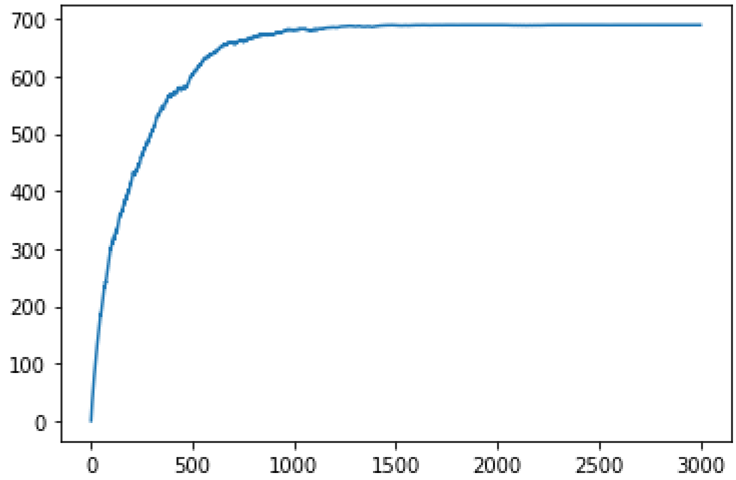

FIGURE 3 – Évolution de l'entropie statistique

On note S_k l'entropie statistique du macro-état E_k. S_k augmente et semble converger vers $S_{N/2}$. On découvre ici la cause profonde (statistique) du second principe de la thermodynamique (l'entropie d'un système isolé augmente au cours d'une transformation et l'équilibre est atteint lorsque S est maximale) : l'état du système évolue statistiquement vers un des micro-états du macroétat le plus probable (avec Ω_k le plus grand). C'est d'autant plus vrai que le système est de taille importante.

9. Pour des temps longs, le système tend vers le macro-état pour lequel les particules se répartissent équitablement entre les deux boites. $\Omega_{\text{équilibre}} = \Omega_{N/2}$ (on suppose ici que N est pair). On a montré en question 5(c) que

$$\frac{\Omega_L}{2^N} \underset{L\to+\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi L}}$$

donc

$$\Omega_L \underset{L\to+\infty}{\sim} \frac{2^N}{\sqrt{\pi L}}$$

d'où

$$S_{\text{équilibre}} \underset{L\to+\infty}{\sim} \log\left(\frac{2^N}{\sqrt{\pi L}}\right) = k_B \log\left(2^N\right) - k_B \log\left(\sqrt{\pi L}\right) \underset{L\to+\infty}{\sim} k_B N \log(2) = nR\log(2)$$

car $k_B\,N = \frac{R}{\mathcal{N}_A}\,N = R\,n$.
Dans la détente de Joule et Gay-Lussac, on a une transformation isoénergétique, donc de température finale identique à la température initiale $V_f = 2V_0$. On trouve alors que $\Delta_{GP} S = n\,R\log(2)$. Le modèle donne un résultat identique.

Bonus 1 TO DO

Bonus 2 TO DO

10. C'est une application directe de la question 2 : comme le seul macro-état possible est $\{1, 1, 3, 3\}$, (c'est-à-dire deux particules au niveau d'énergie 1 et 2 au niveau 3), il y a $\frac{4!}{(2!)^2} = 6$ micro-états possibles.

11. Il y a 4 macro-états possibles. On trouve respectivement $\frac{8!}{4!\,3!\,1!}$, $\frac{8!}{8!}$, $\frac{8!}{5!\,3!}$ et $\frac{8!}{7!\,1!}$ possibilités pour chaque macro-état, toujours en utilisant la question 2.

```python
from sympy import factorial
factorial(8)/(factorial(4)*factorial(3)) + factorial(8)/(factorial(8))\
 +factorial(8)/(factorial(5)*factorial(3)) + factorial(8)/factorial(7)
```

Résultat : 345

Il y a donc 345 micro-états possibles.

12. Écrivons le code et vérifions notre résultat avec les deux questions précédentes.

```python
def taille_repartition(x):
    resultat = 1
    p = 0
    for k in x:
        p = p + x[k]
        resultat = resultat*binomial(p, x[k])
    return resultat
```

```python
# vérification avec la question 10
taille_repartition({1:2, 3:2})
```

Résultat : 6

```python
# vérification avec la question 11
taille_repartition({1:7, 5:1}) + taille_repartition({1:4, 2:3, 4:1})\
    + taille_repartition({2:8}) + taille_repartition({1:5, 3:3})
```

Résultat : 345

13. Pour le macro-état d'énergie $\mathscr{U} = 300\mathscr{E}_1$, on trace en échelle logarithmique $\mathbb{P}(E)$ en fonction E.

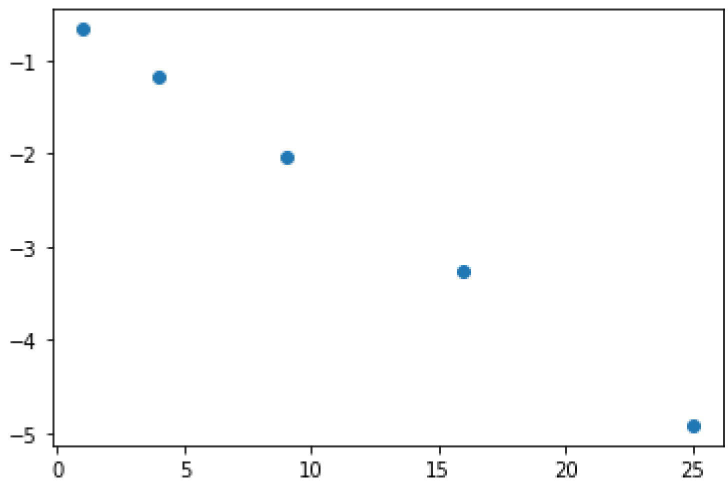

FIGURE 4 – $\log \mathbb{P}(E)$ en fonction de E

Commentaire On voit que $\log \mathbb{P}(E) = -\alpha E$, $\alpha > 0$. Ce résultat est en lien avec un point important en physique statistique : pour un système (ici une particule seule) en contact avec un thermostat (ici l'ensemble des autres particules, d'énergie totale quasi constante donc de température fixée), la probabilité de se trouver dans l'état d'énergie E est donnée par le facteur de Boltzmann $\exp\left(-\dfrac{E}{k_B T}\right)$ où $k_B T$ est lié à l'énergie interne par une relation de la forme $\mathscr{U} = \beta N k_B T$.