Urnes d'Ehrenfest

1 Introduction

Le modèle d'Ehrenfest fut défini en 1907 par Paul Ehrenfest, physicien, et son épouse Tatiana, mathématicienne, pour illustrer certains paradoxes apparaissant dans l'étude théorique du comportement de systèmes physiques comportant un grand nombre de particules.

Pour les physiciens,l'un des objectifs était de lever le « paradoxe » de l'irréversibilité. L'irréversibilité est une évidence à notre échelle : la plupart des phénomènes macroscopiques ont une orientation dans le temps bien définie. Le second principe de la thermodynamique décrit cette irréversibilité : un système isolé évolue vers son maximum d'**entropie** et l'entropie ne diminue jamais ! L'entropie décrit le « désordre » d'un système c'est à dire le quotient de la variation de chaleur par une température.

Cependant les lois de la dynamique **des particules** sont toutes réversibles et aucune des transformations des particules n'est irréversible. Les physiciens voulaient donc montrer comment, à partir de particules aux évolutions réversibles, on pouvait obtenir, en combinant ces évolutions, une situation macroscopique irréversible. Dans le modèle d'Ehrenfest, chaque particule a un comportement totalement réversible et la situation macroscopique est la superposition d'un grand nombre de particules identiques. Il s'agissait donc pour le couple Ehrenfest de prouver qu'il n'y avait pas besoin de modifier les lois de la physique des particules pour décrire l'irréversibilité du monde.

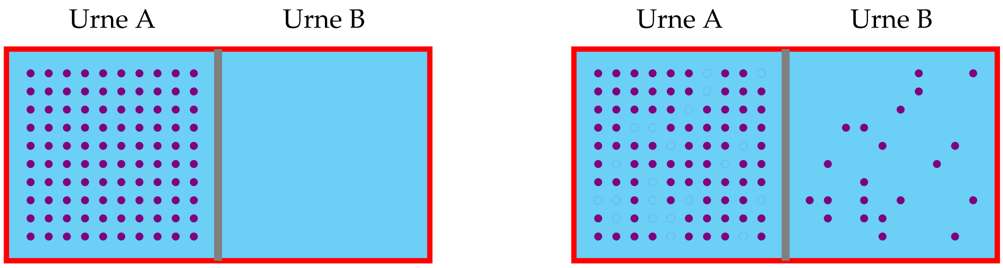
2 L'expérience

On considère d'une part deux urnes A et B, et d'autre part N boules, numérotées de 1 à N, réparties les unes dans l'urne A, les autres dans l'urne B.

Expérience d'Ehrenfest : Expérience consistant à tirer au hasard un numéro I compris entre 1 et N et de transférer la boule numéro I dans l'urne où elle n'était pas.

Le processus aléatoire d'Ehrenfest consiste à discrétiser le temps et de répéter à chaque instant l'expérience d'Ehrenfest. On s'intéresse au nombre de boules présentes dans l'urne A à un instant donné appartenant à $\mathbb{N}$

On suppose qu'au début de l'expérience **l'urne A contient toutes les boules**.



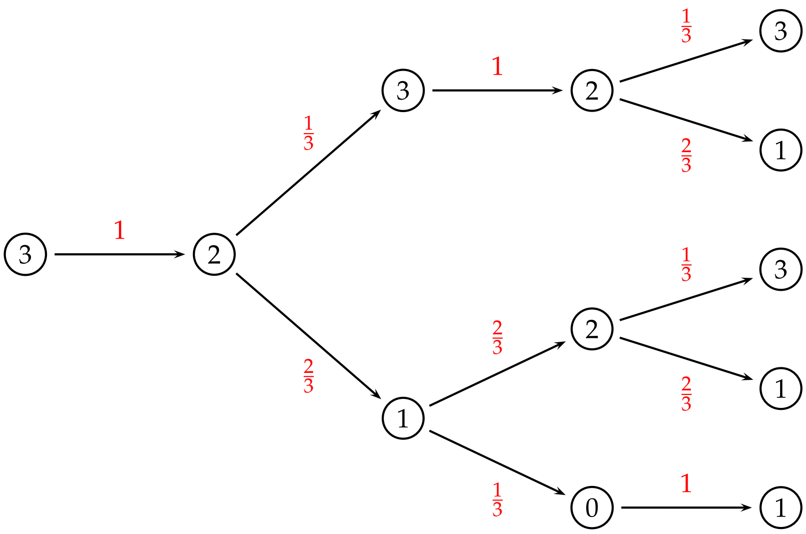
État initial : T = 0 État à l'instant T

3 Cas N = 3

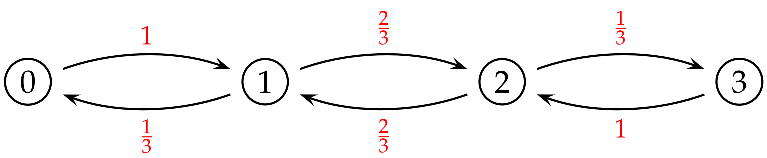
On dispose de deux urnes A et B. L'urne A contient trois boules numérotées 1, 2, 3. L'urne B est vide.
On choisit au hasard un numéro entre 1 et 3, et on change d'urne la boule correspondante. On recommence n fois cette opération.

1) On note 0, 1, 2, 3 les quatre états possibles de l'urne A : 0 boule, 1 boule, 2 boules, 3 boules.

   a) Représenter par un arbre probabiliste l'évolution de l'urne A au cours des quatre premières étapes.



   b) Représenter par un graphe probabiliste l'évolution de l'urne A. Quelle est la matrice de transition ?



On obtient la matrice de transition : $\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

   c) Démontrer que la répartition stable de probabilité correspond à la loi binomiale $\mathscr{B}\left(3, \dfrac{1}{2}\right)$.

Soit $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x & y & z & t \end{pmatrix}$ la matrice ligne qui donne la répartition des 4 états possibles dans l'urne A : 0, 1, 2, 3 boules dans l'urne A. On a alors :

$$\mathbf{X} = \mathbf{XT} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} x & y & z & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y & z & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On obtient le système suivant :

$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{3}y \\ y = x + \dfrac{2}{3}z \\ z = \dfrac{2}{3}y + t \\ t = \dfrac{1}{3}z \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} y = 3x \\ z = 3x \\ t = x \end{cases}$$

Si on pose $x + y + z + t = 1$ on obtient alors $x = \dfrac{1}{8}$. La répartition stable est alors : $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$

La loi binomiale $\mathscr{B}\left(3, \dfrac{1}{2}\right)$ donne la répartition : $P(X = k) = \dbinom{3}{k}\left(\dfrac{1}{2}\right)^3$.
On retrouve alors la même répartition.

Remarque : Si l'on a n boules, on peut montrer alors que la répartition correspond à $\mathscr{B}\left(n; \dfrac{1}{2}\right)$

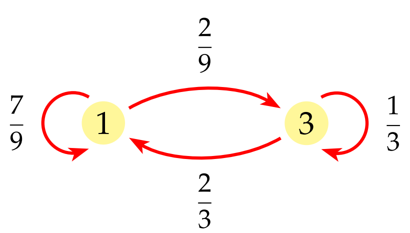
2) On note p_n, la probabilité qu'il y ait trois boules dans l'urne A après n étapes.

a) Démontrer que si n est impair, $p_n = 0$.

Par récurrence : montrons qu'après $n = 2k + 1$ étapes, le nombre de boules dans l'urne A est pair.

- **Initialisation** : $n = 1$ il y a 2 boules dans l'urne A à la première étape. Le nombre de boules est pair
- **Hérédité** : On suppose qu'à l'étape $n = 2k + 1$ le nombre de boules dans l'urne A est pair. A l'étape suivante, le nombre de boules est impair car l'on ajoute ou retranche une boule. A l'étape encore suivante le nombre de boules redevient pair pour la même raison. Donc à l'étape $n = 2k + 3$ le nombre de boules est pair. La proposition est héréditaire.
- Par initialisation et hérédité, le nombre de boules, lorsque n est impair, est pair. On a alors $p_n = 0$

b) Expliquer le graphe probabiliste ci-contre, qui décrit l'évolution du nombre de boules dans A entre l'étape $2k$ et l'étape $2k + 2$ ($k \in \mathbb{N}$).



A l'étape $n = 2k$, le nombre de boules est impair par le même raisonnement que la question précédente. Le nombre de boules est soit 1 soit 3.

On pose $P_3(1)$ la probabilité sachant que l'on a 3 boules à l'étape $2k$ d'avoir 1 boule à l'étape $2k+2$. En s'aidant de l'arbre de la question 1, on a :

$$P_3(3) = 1 \times \frac{1}{3} = \frac{1}{3} \qquad P_1(3) = \frac{2}{3} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{9}$$

$$P_3(1) = 1 \times \frac{2}{3} = \frac{2}{3} \qquad P_1(1) = \frac{2}{3} \times \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \times 1 = \frac{7}{9}$$

c) En déduire que pour tout naturel k : $p_{2k+2} = \frac{1}{3}p_{2k} + \frac{2}{9}(1 - p_{2k})$

Si p_{2k} est la probabilité d'avoir 3 boules dans l'urne A après $2k$ étapes, comme à une étape paire, il ne peut avoir qu'un nombre impair de boules, $(1 - p_{2k})$ est la probabilité d'avoir 1 boule dans l'urne A après $2k$ étapes. D'après le graphe précédent, on a :

$$p_{2k+2} = \frac{1}{3}p_{2k} + \frac{2}{9}(1 - p_{2k}) = \frac{1}{9}p_{2k} + \frac{2}{9}$$

d) On pose $u_k = p_{2k}$ et $v_k = u_k - \frac{1}{4}$. Montrer que la suite (v_k) est une suite géométrique dont on précisera la raison et le premier terme. En déduire l'expression de v_k en fonction de k puis p_{2k} en fonction de k

On exprime v_{k+1} en fonction de v_k

$$v_{k+1} = u_{k+1} - \frac{1}{4} = \frac{1}{9}v_k + \frac{2}{9} - \frac{1}{4} = \frac{1}{9}u_k - \frac{1}{36} = \frac{1}{9}\left(u_k - \frac{1}{4}\right) = \frac{1}{9}v_k$$

La suite (v_k) est une suite géométrique de raison $\frac{1}{9}$ et de premier terme $v_0 = u_0 - \frac{1}{4} = 1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4}$.

On a alors : $v_k = \frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^k$ d'où $p_{2k} = u_k = \frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^k + \frac{1}{4}$

e) À l'aide de l'arbre de la question 1), vérifier cette formule pour $k = 0, k = 1, k = 2$.

- $k = 0$, $p_0 = u_0 = 1$ et $\frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^0 + \frac{1}{4} = 1$
- $k = 1$, $p_2 = u_1 = 1 \times \frac{1}{3} = \frac{1}{3}$ et $\frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^1 + \frac{1}{4} = \frac{1}{12} + \frac{1}{4} = \frac{1}{3}$
- $k = 2$, $p_4 = u_2 = \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 \times \frac{1}{3} = \frac{1}{9} + \frac{4}{27} = \frac{7}{27}$ et $\frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^2 + \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{27} + \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \times \frac{28}{27} = \frac{7}{27}$

3) On appelle D la variable aléatoire qui indique le nombre d'étapes jusqu'au premier retour à l'état initial (trois boules dans A).

a) Démontrer que, si n est impair, alors $P(D = n) = 0$.

Comme à une étape impair, il y a un nombre pair de boules dans l'urne A, il ne peut y avoir 3 boules, donc $P(D = 2k + 1) = 0$

b) À l'aide de l'arbre de la question 1), déterminer $P(D = 2)$ et $P(D = 4)$.

$$P(D = 2) = 1 \times \frac{1}{3} = \frac{1}{3} \qquad \text{et} \qquad P(D = 4) = 1 \times \frac{2}{3} \times \frac{2}{3} \times \frac{1}{3} = \frac{4}{27}$$

c) Quelle est la probabilité de revenir au moins une fois à l'état initial en moins de cinq étapes ?

$$P(D < 5) = P(D = 2) + P(D = 4) = \frac{1}{3} + \frac{4}{27} = \frac{13}{27} \simeq 0,48$$

Une fois sur deux, on revient à l'état initial en moins de cinq étapes !

4 Programmation

4) On voudrait programmer le temps d'attente nécessaire pour observer le premier retour à l'état initial (3 boules dans A). On pose alors :

$$d_k = P(D = 2k), \quad k \in \mathbb{N}^* \qquad \text{avec} \qquad d_1 = P(D = 2) = \frac{1}{3}$$

On remarque que, si à l'étape $2k$ l'urne A contient 3 boules, l'urne A a pu revenir pour la première fois à son état initial à l'une des étapes suivantes : $2k$, $2k - 2$, $2k - 4$, …, 4, 2. On dispose alors d'une relation de récurrence :

$$u_k = d_1 u_{k-1} + d_2 u_{k-2} + \cdots + d_{k-1} u_1 + d_k$$

A l'aide d'une programmation, calculer d_i pour $i = 2, 3, 4, 5$. Conjecturer une formule explicite exprimant d_k en fonction de k pour $k \geqslant 2$.

$$d_k = u_k - d_1 u_{k-1} - d_2 u_{k-2} - \cdots - d_{k-1} u_1 \quad \text{avec} \quad u_k = \frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^k + \frac{1}{4}$$

On rentre d_1 dans le premier nombre de la liste L_1.

On fait ensuite une boucle B_1 pour trouver les termes d_2, d_3, …, d_K que l'on rentre dans la liste L_1

A l'intérieur de cette boucle B_1, on fait une boucle B_2 pour calculer le nombre $A_I = d_1 u_{I-1} + d_2 u_{I-2} + \cdots + d_{I-1} u_1$. On retranche ensuite le nombre A_I au nombre u_I pour trouver d_I.

On affiche ensuite les termes de la liste L_1, qui donne d_1, d_2, …, d_K.

Variables : K, A, I, J entiers L_1 liste
Entrées et initialisation
- Lire K
- Effacer liste L_1
- $\frac{1}{3} \to L_1(1)$

Traitement
- **pour** I de 2 à K **faire**
  - $0 \to A$
  - **pour** J de 1 à $I-1$ **faire**
    - $A + L_1(J)\left[\frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^{I-J} + \frac{1}{4}\right] \to A$
  - **fin**
  - $\frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^{I} + \frac{1}{4} - A \to L_1(I)$
- **fin**

Sorties : Afficher L_1

On trouve alors le tableau suivant pour $K = 5$

i	1	2	3	4	5
d_k	0,333 3	0,148 1	0,115 2	0,089 6	0,069 7

Avec une calculatrice permettant d'obtenir une écriture rationnelle, on obtient :

i	1	2	3	4	5
d_k	$\dfrac{1}{3}$	$\dfrac{4}{27}$	$\dfrac{28}{243}$	$\dfrac{196}{2\,187}$	$\dfrac{1\,372}{19\,683}$

On peut montrer que : $\forall k > 2,\ \ d_k = \dfrac{4}{27}\left(\dfrac{7}{9}\right)^{k-2}$

5) On admet la formule précédente, on veut maintenant programmer l'espérance mathématique de la variable D. Comme, il y a un nombre infini de valeur pour k, on estime que calculer l'espérance avec les 60 premières valeurs de d_k donne une très bonne approximation de l'espérance. À l'aide d'une programmation, calculer $\mathrm{E}(D)$.

On a : $\mathrm{E}(D) = \displaystyle\sum_{k \geqslant 1} p_{2k} \times 2k = \frac{2}{3} + 2\sum_{k=2}^{60} k \times d_k = \frac{2}{3} + \sum_{k=2}^{60} \frac{8k}{27}\left(\frac{7}{9}\right)^{k-2}$

On obtient :

$$\mathrm{E}(D) \simeq 7,999968741$$

On peut montrer que :

$$\mathrm{E}(D) = 8$$

Variables : K, E entiers
Entrées et initialisation
$\frac{2}{3} \to E$
Traitement
pour K de 2 à 60 **faire**
$E + \dfrac{8K}{27}\left(\dfrac{7}{9}\right)^{K-2} \to E$
fin
Sorties : Afficher E

6) On désire simuler n expériences permettant de connaître le premier retour à l'état initial pour vérifier la valeur $\mathrm{E}(D)$ trouvée à la question précédente. Donner un algorithme permettant de programmer ces n expériences de retour à l'état initial puis donner l'espérance E observée. On fera l'application avec les valeurs 50, 100 et 200.

Avec le programme ci-après, on trouve le tableau suivant :

N	50	100	200	500	1000
E série 1	7,24	8.84	7.55	8.112	8.106
E série 2	7.36	8.52	7.67	7.98	8,112
E série 3	8.38	8.86	8.41	7,452	7,948

On remarquera que si l'urne A possède 3 boules initialement, à l'étape 1, elle n'en possède que 2, d'où l'initialisation de A à 2 pour $I = 1$. Pour connaître l'espérance de la simulation, on détermine la moyenne de la liste L_1.

Variables : N, A, I, X entiers
L_1 liste
Entrées et initialisation
- Lire N
- Effacer liste L_1

Traitement
- **pour** J de 1 à N **faire**
  - $2 \to A$
  - $1 \to I$
  - **tant que** $A \neq 3$ **faire**
    - entAleat$(1, 3) \to X$
    - $I + 1 \to I$
    - **si** $X \leqslant A$ **alors**
      - $A - 1 \to A$
    - **sinon**
      - $A + 1 \to A$
    - **fin**
  - **fin**
  - $I \to L_1(J)$
- **fin**

Sorties : Afficher L_1