–Texte–
Urnes et particules

À la fin du $19^{\text{ième}}$ siècle et au début du suivant, la tempête fait rage autour de la théorie cinétique des gaz proposée par Boltzmann. La thermodynamique de l'époque postule (second principe de la thermodynamique) qu'un système évolue de manière irréversible vers un état d'équilibre. Boltzmann, convaincu de l'existence des atomes, souhaite expliquer l'évolution des grandeurs macrospiques d'un gaz (température, pression,. . .) par la dynamique des particules qui le compose. Le problème vient du fait que cette dynamique est par1nature réversible : les équations de la physique sont inchangées si l'on renverse le temps. Boltzmann est face à un paradoxe : comment une évolution microscopique réversible peut-elle produire une évolution macroscopique irréversible ?

Considérons deux pieces A et B hermétiquement closes et de même volume. On fait le vide dans la pièce B puis on pratique un minuscule trou dans la cloison séparant ces deux pièces et l'on mesure l'évolution de la pression dans chacune des pièces. Il paraît raisonnable de penser que la pression va s'équilibrer.

Les physiciens P. et T. Ehrenfest (mari et femme qui ont travaillé ensemble) ont introduit un modèle simple (qui porte leur nom) qui permet de décrire l'évolution de la pression que l'on observe à partir d'une évolution microscopique réversible.

1 Le modèle microscopique

Considérons deux urnes A et B dans lesquelles sont réparties a boules numérotées de 1 à a. On associe à une configuration, c'est-à-dire à une répartition des a boules un a-uplet $x = (x_1, \dots, x_a)$ où $x_i = 1$ si la particule i est dans l'urne A et $x_i = 0$ sinon. Notons F l'ensemble

$$F = \{x = (x_1, \dots, x_a),\ \text{pour tout } i = 1, \dots, a,\ x_i \in \{0, 1\}\}.$$

On dit que deux configurations x et y de F sont voisines, et on note $x \sim y$, si elles ne diffèrent que d'une coordonnée. On considère $(Y_n)_{n\geqslant 0}$ la chaîne de Markov sur F définie par la dynamique suivante : lorsque la chaîne est en un point x de F, elle choisit au temps suivant en un des voisins de x avec la probabilité uniforme. Par exemple, si a est égal à 3 et que l'on range les éléments de F dans l'ordre suivant :

$$(0,0,0)\ (0,0,1)\ (0,1,0)\ (1,0,0)\ (0,1,1)\ (1,0,1)\ (1,1,0)\ (1,1,1),$$

la matrice de transition Q est donnée par

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 & 1/3 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix}$$

Lemme 1.1. *La chaîne Y est irréductible , récurrente et périodique de période 2. La matrice Q est bistochastique. La mesure invariante de la chaîne est la mesure uniforme sur F. Le temps moyen de retour en $x \in F$ est 2^a.*

Cette chaîne s'interprète géométriquement comme la marche aléatoire aux plus proches voisins sur le cube unité de dimension a.

Définissons la distance d entre deux points x et y de F par le nombre de coordonnées dont ils diffèrent :

$$d(x, y) = \sum_{i=1}^{a} |x_i - y_i|.$$

Le temps moyen pour la chaîne d'aller de x en y ne dépend que de la distance $d(x, y)$. Fixons a et notons $m_d = m_d^a$ le temps d'atteinte moyen de y partant de x lorsque $d(x, y) = d$. La suite $(m_d)_{0 \leqslant d \leqslant a+1}$ vérifie les équations suivantes :

$$m_d = 1 + \frac{d}{a} m_{d-1} + \frac{a-d}{a} m_{d+1} \quad \text{pour } 0 < d \leqslant a,$$

et $m_0 = m_{a+1} = 0$. Ces équations admettent une unique solution, qui s'écrit sous la forme suivante.

Proposition 1.2. *Soit*

$$Q_i^a = \sum_{k=0}^{i} \frac{\binom{a}{k}}{\binom{a-1}{i}} \quad \textit{pour } i = 0,\ 1, \dots, a-1,$$

alors

$$m_d = \sum_{i=1}^{d} Q_{a-i}^a \quad \textit{pour } 0 < d \leqslant a.$$

2 L'urne d'Ehrenfest

Observer l'évolution de la chaîne Y demanderait de pouvoir déterminer la position de chaque particule ce qui est bien sûr impossible. Il est par contre possible de mesurer la pression qui est proportionnelle au nombre de particules présentes dans l'urne A. Pour simplifier certaines expressions dans la suite, on sera amené à se placer parfois dans le cas où a est pair. La lettre b désignera alors toujours dans la suite l'entier $a/2$.

2.1 Définition de la matrice de transition

À la chaîne de Markov Y on associe le processus $(X_n)_n$ à valeurs dans $E = \{0, 1, \dots, a\}$ où X_n est la somme des coordonnées de Y_n.

Proposition 2.1. *Le processus $(X_n)_n$ est une chaîne de Markov sur E de matrice de transition*

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1/a & 0 & (a-1)/a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2/a & 0 & (a-2)/a & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & (a-1)/a & 0 & 1/a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La chaîne est irréductible, récurrente et périodique de période 2. Sa mesure invariante est la loi binomiale $\mathcal{B}(a, 1/2)$.

2.2 Espérance et variance

La pression au temps n dans l'urne A est de l'ordre de $P_n = X_n/a$. On s'interesse ici aux deux premiers moments de cette variable aléatoire.

On a donc démontré le résultat suivant.

Proposition 2.2. *Posons $\alpha = 1 - 2/a$ et $\beta = 1 - 4/a$. Pour $n \in \mathbb{N}$, on a*

$$\mathbb{E}(P_n) = \frac{1}{2} + \left(\mathbb{E}(P_0) - \frac{1}{2}\right)\alpha^n, \tag{1}$$

$$\mathbb{V}(P_n) = \frac{1}{4a} + \left(\mathbb{V}(X_0) - \frac{1}{4a}\right)\beta^n + \left(\mathbb{E}(P_0) - \frac{1}{2}\right)^2 (\beta^n - \alpha^{2n}). \tag{2}$$

Démonstration. On raisonne par conditionnement :

$$\mathbb{E}(X_{n+1}|X_n) = (X_n + 1)(1 - X_n/a) + (X_n - 1)X_n/a = \alpha X_n + 1.$$

On en déduit, en prenant l'espérance, une relation de récurrence pour la suite $(\mathbb{E}P_n)_n$ qui donne immédiatement (1).

De même,

$$\mathbb{E}(X_{n+1}^2|X_n) = (X_n+1)^2(1-X_n/a) + (X_n-1)^2X_n/a = (1-4/a)X_n^2 + 2X_n + 1.$$

Ceci implique

$$\mathbb{V}(P_{n+1}) = \beta\mathbb{V}(X_n) + (4/a^2)\mathbb{E}(P_n)(1-\mathbb{E}(P_n)).$$

Reste à remplacer $\mathbb{E}(P_n)$ par sa valeur pour obtenir le résultat annoncé. □

Remarque 2.3. Le résultat (1) peut s'obtenir également en vérifiant que le vecteur transposé de $(-b\ \ -b+1 \cdots b-1\ b)$ (avec $b = a/2$) est vecteur propre de P associé à la valeur propre $1-2/a$.

Remarque 2.4. Notons τ la fréquence de transitions par secondes. Il y a donc eu τt transitions au temps t. En notant $\nu = -\tau\log(1-1/b)$, la relation (1) établit la loi de refroidissement de Newton (Newton's law of cooling) :

$$\mathbb{E}(X_n) - b = (\mathbb{E}(X_0) - b)e^{-\nu t}.$$

La relation (2) montre que la suite X_n a un comportement quasiment déterministe du même type.

3 Réconciliation des théories ennemies

Il est temps de confronter, ou plutôt d'unifier, les points de vue thermodynamique et cinétique. Pour cela, plusieurs estimations peuvent être proposées, des plus naïves aux plus fines.

3.1 Fluctuations autour de la moyenne sous la mesure invariante

Supposons que le temps auquel on observe la chaîne soit assez grand. Au problème de périodicité près, la loi de X « ressemble » à la loi binomiale $\mathcal{B}(a, 1/2)$. On peut donc en déduire, via le théorème limite central ou des inégalités de concentration de la mesure pour la loi $\mathcal{B}(a, 1/2)$ autour de sa moyenne, des contrôles de la quantité

$$\mathbb{P}(|X_n - b| \geqslant r).$$

Pour fixer les idées, on pourra choisir $a = 10^6$. Le théorème limite central montre que l'on est pratiquement sûr de trouver environ la moitié des particules dans l'urne A. Même si pour les physiciens, $a = 10^6$ est un petit nombre, la probabilité de trouver plus de 505000 particules dans une urne (c'est-à-dire une fluctuation d'au moins 1%) est inférieure à 10^{-23}. Pour $m = 10^8$, une fluctuation d'un pour mille est aussi négligeable.

3.2 Temps de retour

On souhaite raffiner ce résultat en obtenant des estimations en fonction du point de départ de la chaîne, par exemple 0 et b. On définit le temps T_{ii} de premier retour en i de la manière suivante :

$$T_{ii} = \inf\{n \geqslant 1,\ X_n = i | X_0 = i\}.$$

Proposition 3.1. *Si* $b = 10000$ *alors*

$$\mathbb{E}(T_{00}) = 2^{20000} \quad et \quad \mathbb{E}(T_{bb}) \sim 100\sqrt{\pi}.$$

Cette proposition assure qu'il faudra attendre un temps immense avant qu'une pièce, initialement vide, ne le redevienne !!!

3.3 Estimation du temps de regonflage de la roue

On souhaite enfin être plus précis et obtenir des estimations des temps d'atteinte de 0 et b partant de 0 ou b. Soit m_{ij} le temps moyen d'atteinte de j par X partant de i. Partant de $i+1$, la chaîne doit passer par i pour aller en 0, donc

$$m_{i+1,0} = m_{i+1,i} + m_{i,0} \quad \text{pour } 0 \leqslant i < a. \tag{3}$$

Par symétrie,

$$m_{i,i+1} = m_{a-i,a-i-1} = m_{a-i,0} - m_{a-i-1,0} \quad \text{pour } 0 \leqslant 0 \leqslant i < a.$$

Il suffit donc de connaître les réels $(m_{i0})_i$ pour déterminer les réels $(m_{ij})_{ij}$. Remarquons à présent que $X_n = 0$ si et seulement si $Y_n = (0, \ldots, 0)$. Donc le temps moyen que met X à se rendre de i à 0 est le temps moyen que met Y d'aller de n'importe quel élément de F situé à une distance i de $(0, \ldots, 0)$ à $(0, \ldots, 0)$, autrement dit m_i^a. La proposition 1.2 assure alors que

$$m_{i,i+1} = m_{a-i,0} - m_{a-i-1,0} = \sum_{k=1}^{a-i} Q_{a-k}^a - \sum_{k=1}^{a-i-1} Q_{a-k}^a = Q_i^a \quad \text{pour } 0 \leqslant 0 \leqslant i < a-1.$$

Corollaire 3.2. *On a*

$$m_{ij} = \begin{cases} 2^a / \binom{a}{i} & si\ i = j, \\ \sum_{k=1}^{j-1} Q_k^a & si\ i < j, \\ \sum_{k=a-i}^{a-j-1} Q_k^a & si\ i > j. \end{cases}$$

On suppose à présent que a est pair et on note $b = a/2$.

Proposition 3.3. *Pour tout a,*

$$a(2\log 2 - 1/2) - 2 \leqslant m_{0,b} \leqslant a(1/4 + (1/2)\log a), \tag{4}$$

et

$$2^a\left(1 + \frac{1}{a-1}\right) \leqslant m_{0,a} \leqslant 2^a\left(1 + \frac{2}{a-1}\right). \tag{5}$$

Démonstration. Montrons l'estimation (5). Pour tout i, $m_{i,i+1} + m_{i+1,i} = \dfrac{2^a}{\binom{a-1}{i}}$. Donc

$$m_{0,b} + m_{b,0} = 2^a \sum_{i=0}^{b-1} \frac{1}{\binom{a-1}{i}}.$$

De plus, puisque $m_{b,0} = m_{b,a}$, on a $m_{0,a} = m_{0,b} + m_{b,a} = 2^a \sum_{i=0}^{b-1} \frac{1}{\binom{a-1}{i}}$. Remarquons à présent, en séparant les deux premiers termes de la somme des autres, que

$$1 + \frac{1}{a-1} \leqslant \sum_{i=0}^{b-1} \frac{1}{\binom{a-1}{i}} \leqslant 1 + \frac{1}{a-1} + \frac{b-1}{\binom{a-1}{2}}.$$

□

La proposition 3.3 assure que le temps mis par le système pour passer d'un état de total déséquilibre à celui d'équilibre parfait est totalement négligeable devant le temps mis pour l'évolution inverse. Pour un nombre de particules égal à 100, $m_{0,50}$ est majoré par 256 tandis que $m_{50,0}$ est de l'ordre de 10^{30} soit quelques mille milliards de milliards de milliards...

4 Suggestions

1. Justifier le lien entre l'évolution de la pression abordé dans l'introduction et le modèle de l'urne d'Ehrenfest.
2. Commenter et illustrer la proposition 1.2. On pourra mettre en évidence par la simulation la vitesse de croissance de $a \mapsto m_a^a$ et le fait qu'à a fixé, $d \mapsto m_d^a$ croît mais lentement.
3. Démontrer la proposition 2.1.
4. Démontrer la proposition 2.2 et expliquer le sens de la remarque 2.3.
5. Expliquer le sens de la section 3.1.
6. Démontrer la proposition 3.1 et réconcilier les théories cinétique et thermodynamique.
7. Illustrer par la simulation les différents comportements du modèle qui ont été mis en évidence dans le texte.