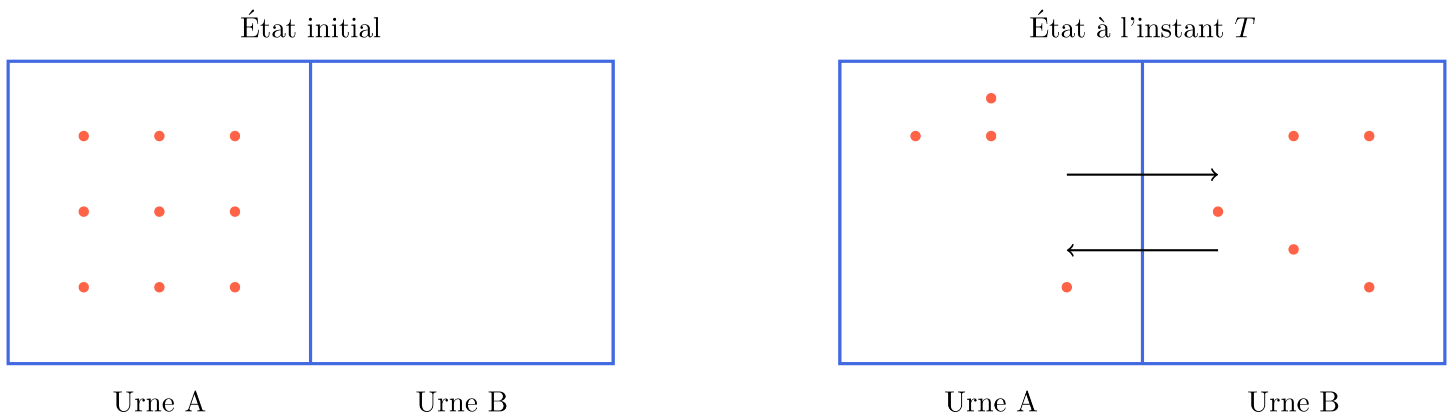
Modèle de diffusion d'Ehrenfest

Principe

Le modèle d'urnes d'Ehrenfest a été proposé en 1907 par un couple de physiciens autrichiens, Tatiana et Paul pour simuler la diffusion d'un gaz à travers une membrane poreuse.
Le principe est le suivant : on considère deux urnes A et B. On prends N boules se trouvant toutes initialement dans l'urne A. A intervalle régulier, on choisit une boule au hasard parmi les N boules et on la change d'urne.



On a envie de penser qu'au bout d'un certain temps, un état d'équilibre s'établit avec environ la moitié des boules dans chacune des deux urnes. On s'attend également à ce que la situation soit irréversible : on ne s'attend pas à ce que chacune des boules reviennent dans l'urne A. Ce n'est pourtant pas le cas et c'est exactement cela qui intriguait les physiciens de l'époque.

Si on simule cet expérience pour $N = 500$ et un nombre de transfert E assez grand ($E = 900$). On observera que le nombre de boules dans l'urne A décroit assez vite pour se stabiliser autour de $\frac{N}{2}$. En particulier, on n'observe pas un retour vers l'état initial.

En revanche, si on simule cette expérience pour $N = 2$ et $E = 50$, on observe un retour à l'état initial toutes les 3 étapes.

Exercice n°1 : étude du cas $N = 2$

On place initialement deux boules dans l'urne A. Les deux urnes peuvent alors se trouver dans trois états possibles :

- R_1 : « aucune boule dans l'urne A »
- R_2 : « une boule dans l'urne A »
- $R3$: « deux boules dans l'urne A »

Pour tout entier naturel n, on note X_n la variable aléatoire donnant le nombre de boules dans l'urne A à la n-ième étape.

On note enfin U_n la matrice ligne des états à l'étape n.

1. Que vaut U_0 ?
2. Représenter cette situation par un graphe probabiliste.
3. Donner la matrice de transition M associée à ce graphe.
4. Exprimer U_{n+1} en fonction de M et de U_0.
5. Montrer que pour tout entier naturel p on a $M^{2p+1} = M$.
6. En déduire, selon la parité de n, les valeurs de U_n.
7. Déterminer l'espérance $E(X_n)$ selon les valeurs de n puis conclure quant à la situation de l'exercice.

Exercice n°2 : étude du cas $N = 3$

On place cette fois-ci trois boules initialement dans l'urne A. Les boules sont numérotées 1, 2 et 3.
On choisit ainsi un numéro au hasard et on le change d'urne. On note :

- 0 : « L'urne A contient 0 boules »
- 1 : « L'urne A contient 1 boules »
- 2 : « L'urne A contient 2 boules »
- 3 : « L'urne A contient 3 boules »

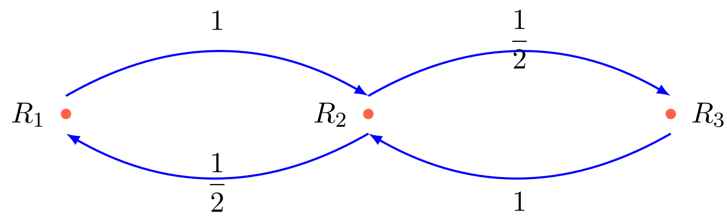
1. Représenter la situation par un graphe probabiliste.
2. Déterminer la matrice T de transition associée à ce graphe.
3. Montrer que la répartition stable de probabilité correspond à une loi binomiale $\mathcal{B}(n\,;\,p)$.
4. On note p_n la probabilité qu'il y ait trois boules dans l'urne A après n étapes.
   Montrer que si n est impair alors $p_n = 0$.
5. Déterminer le graphe probabiliste qui décrit l'évolution du nombre de boules dans l'urne A entre l'étape $2k$ et l'étape $2k + 2$ où $k \in \mathbb{N}$.
6. En déduire que pour tout entier naturel k : $p_{2k+2} = \dfrac{1}{3}p_k + \dfrac{2}{9}(1 - p_{2k})$.
7. On pose $u_k = p_{2k}$ et $v_k = u_k - \dfrac{1}{4}$.
   Montrer que la suite (v_k) est une suite géométrique dont on donnera le premier terme et sa raison.
   En déduire une expression de v_k en fonction de k puis de p_{2k} en fonction de k.
8. On appelle D la variable aléatoire qui indique le nombre d'étapes jusqu'au premier retour à l'état initial.
   Montrer que si n est impair alors $P(D = n) = 0$.
9. Déterminer $P(D = 2)$ et $P(D = 4)$.
10. Quelle est la probabilité de revenir au moins une fois à l'état initial en moins de cinq étapes ?

> Correction des exercices

Exercice n°1

1. Puisque toutes les boules sont initialement dans l'urne A, on a $U_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

2. Il s'agit d'une chaîne de Markov à trois états R_1, R_2 et R_3 :



3. On obtient donc $M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$.

4. $U_{n+1} = U_0 \times M^n$.

5. Montrons ce résultat par récurrence.

   Initialisation

   Pour $p = 0$, $M^{2p+1} = M^1 = M$. La propriété est donc vraie pour $p = 0$.

   Hérédité

   Supposons que pour un entier naturel p on ait $M^{2p+1} = M$.
   $M^{2(p+1)+1} = M^{2p+3} = M^{2p+1} \times M^2 = M \times M^2 = M^3$.
   Or, à la calculatrice, on trouve $M^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. La propriété est donc héréditaire.

   Conclusion

   La propriété est vraie pour $p = 0$ et est héréditaire à partir de ce rang. Elle est donc vraie pour tout entier naturel p.

6. Si n est impair, $U_n = U_0 \times M^n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$.

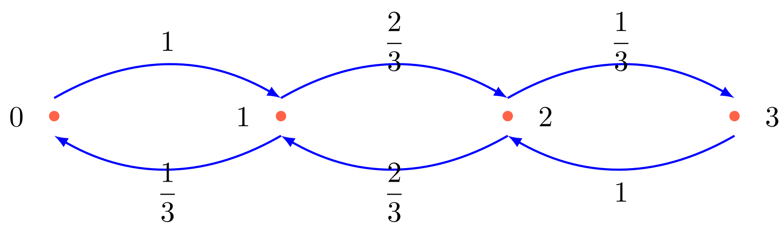
   Si n est pair, on montre par récurrence que $M^n = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Ainsi, si n est pair, on a $U_n = U_0 \times M^n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

7. Si n est impair, $E(X_n) = 1 \times 1 = 1$.
   Si n est pair, $E(X_n) = \frac{1}{2} \times 2 = 1$.
   Pour $N = 2$, il n'y a pas de stabilisation autour de $\frac{N}{2}$ pour l'espérance. À chaque étape de rang impair, on a à coup sûr une boule dans l'urne A. Pour les étapes de rang pair, on a une chance sur deux de n'avoir aucune boule dans l'urne A et une chance sur deux d'en avoir deux. On a donc affaire à un cycle.

Exercice n°2

1. On obtient la chaîne de Markov suivante à quatre états :



2. La matrice de transition associée à ce graphe est $T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$.

3. On note $X = \begin{pmatrix} x & y & z & t \end{pmatrix}$ la matrice donnant la répartition des quatre états probabilistes dans l'urne A (soit 0 boule, 1 boule, 2 boules ou 3 boules).

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

   On obtient le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} x & = & \frac{1}{3}y \\ y & = & x + \frac{2}{3}y \\ z & = & \frac{2}{3}y + t \\ t & = & \frac{1}{3}z \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} y & = & 3x \\ z & = & 3x \\ t & = & x \end{array} \right.$$

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

Cette répartition est la même qu'une loi binomiale $\mathcal{B}\left(3\,;\,\dfrac{1}{2}\right)$: $P(X=k)=\dbinom{3}{k}\left(\dfrac{1}{2}\right)^3$.

4. Montrons ce résultat par récurrence.

   Initialisation :

   Pour $n=1$, il y a 2 boules dans l'urne A lors de la première étape. Le nombre de boule est bien pair, donc $p_1=0$.

   Hérédité :

   Supposons que pour un entier naturel n impair supérieur ou égal à 1 de la forme $n=2k+1$, $k\in\mathbb{N}$, $p_n=0$.
   On suppose donc que le nombre de boules à l'étape $n=2k+1$ est pair. A l'étape suivante, le nombre de boule est impair car, soit on enlève une boule soit on en ajoute une.
   Pour la même raison, à l'étape suivante, donc $2k+3$, le nombre de boules dans l'urne A sera pair. Donc ne peut être égal à 3 et donc $p_{n+1}=0$. La proposition est héréditaire.

   Conclusion :

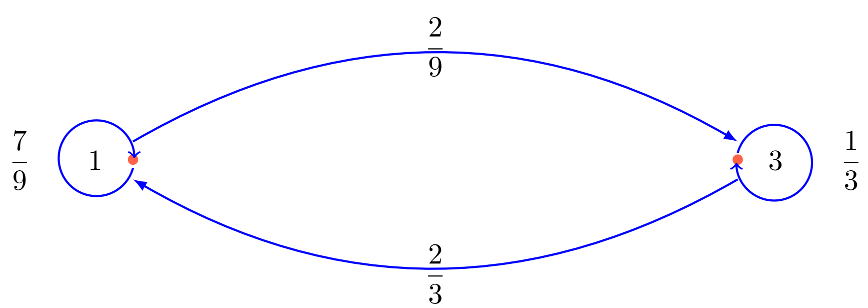
   La proposition est vraie pour $n=1$ et héréditaire à partir de ce rang : elle est donc vraie pour tout entier naturel n impair.

5. A l'étape $n=2k$, le nombre de boules dans l'urne A est impair donc soit 1 soit 3.
   La probabilité d'avoir 3 boules à l'étape $2k+2$ sachant que l'on en a 3 à l'étape $2k$ est de $1\times\dfrac{1}{3}=\dfrac{1}{3}$.

   La probabilité d'avoir 3 boules à l'étape $2k+2$ sachant que l'on en a 1 à l'étape $2k$ est de $\dfrac{2}{3}\times\dfrac{1}{3}=\dfrac{2}{9}$.

   La probabilité d'avoir 1 boule à l'étape $2k+2$ sachant que l'on en a 3 à l'étape $2k$ est de $1\times\dfrac{2}{3}=\dfrac{2}{3}$.

   La probabilité d'avoir 1 boule à l'étape $2k+2$ sachant que l'on en a 1 à l'étape $2k$ est de $\dfrac{2}{3}\times\dfrac{2}{3}+\dfrac{1}{3}\times 1=\dfrac{7}{9}$.



6. Si p_{2k} est la probabilité d'avoir 3 boules dans l'urne A après $2k$ étapes, il ne peut y avoir qu'un nombre impair de boules dans l'urne A d'après les questions précédentes.
   Ainsi, $1-p_{2k}$ est la probabilité d'avoir 1 boule dans l'urne A après $2k$ étapes. Et d'après le graphe probabiliste précédent :

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

7. Exprimons 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 donc 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 $v_k = \frac{3}{4} \times \left(\frac{1}{9}\right)^k$ d'où $p_{2k} = \frac{3}{4}\left(\frac{1}{9}\right)^k + \frac{1}{4}$.

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

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

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

    On revient donc l'état initial une fois sur deux en moins de cinq étapes.

Remarque

Le nombre de dispositions possibles des N boules entre les deux urnes est de 2^N.
Ainsi, pour des valeurs de N très grandes, comme un nombre de particules d'un gaz dans une membrane poreuse, 2^N est un nombre gigantesque.
Le retour à l'état initial est de $\frac{1}{2^N}$. Ce temps de retour est donc un temps qui n'est pas accessible à l'humain. Tout se passe donc comme si le phénomène était irréversible alors qu'intrinsèquement, il est parfaitement réversible.