Le modèle de diffusion d'Ehrenfest

Une idée d'activité

1 Préambule

Au 19ème siècle on postulait qu'un système thermodynamique évoluait vers un état stable de manière irréversible. Boltzmann relève alors un paradoxe puisque les équations physiques sont réversibles. Les époux Ehrenfest (physiciens) ont proposé de considérer deux enceintes A et B de même volume. Le vide est fait dans l'enceinte B puis on fait un trou dans la paroi séparant les deux enceintes.
Voir document
Pour étudier l'évolution de la pression ils ont proposé le modèle simple suivant :

- on dispose de deux urnes A et B ainsi que de N boules
- à intervalle régulier une boule et une seule choisie au hasard parmi les N change d'urne. On effectue ainsi n tirages
- à l'instant initial toutes les boules sont dans l'urne A

Intuitivement quand n est « grand » les contenus des urnes devraient se stabiliser à $\frac{N}{2}$. On peut se poser la question de savoir si c'est toujours le cas, si cet état est stable mais aussi celle de la réversibilité : à savoir peut-on retourner à l'état initial ?
Le nombre de boules N étant fixé on désigne par X_n la variable aléatoire donnant le nombre de boules dans l'urne A à l'issue des n tirages. La loi de probabilité de X_n étant représentée par le vecteur $\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix}$ où $\forall i \in [\![0, N]\!]$, $p_i = P(X_n = i)$.

2 Simulation

La simulation peut se faire sur Excel, Xcas, Scilab, Python etc ...

2.1 évolution du nombre de boules dans A lors de n tirages

Il est intéressant de faire varier N mais aussi n. Cela ne pose pas trop de probléme sur Scilab (voir fichier « ehrenfest1.sce ». Sur Excel ce n'est pas aisé et il faut réfléchir un peu plus.

2.1.1 Réalisation sur excel

Dans le fichier « Ehrenfest_1.xlsx » on utilise les probabilités de transition d'un état à un autre : supposons qu'au tirage k il y ait N_k boules dans A, pour obtenir N_{k+1} on tire aléatoirement un nombre de $[\,0\,;\,1\,]$ si ce nombre est inférieur à $\frac{N_k}{N}$ le nombre de boules dans A diminue de 1 sinon il augmente de 1.
Pour tracer correctement le graphique représentant l'évolution du nombre de boules dans A il faut définir une plage de données dont la taille varie avec le nombre n de tirages (ce nombre est nommé nt dans le fichier excel). Pour cela on commence par nommer la cellule A4 (ici nommée « ie »), on sélectionne

ensuite une cellule vide, on clique à droite et en choisissant « définir un nom » on définit la plage M en tapant dans la zone « fait référence à » la formule =DECALER(ie ;0 ;0 ;nt ;2). On vient ainsi de définir une matrice à nt lignes et deux colonnes.[1]

Pour représenter le graphique en nuage de points il faut extraire la première et la deuxième colonne de M. Pour cela on nomme les deux colonnes « col_1 » et « col_2 » à l'aide de la fonction INDEX. (On pourrait directement définir deux matrices à nt lignes et une colonne en utilisant la fonction « DECALER » comme précédemment)

Il ne reste plus qu'à tracer le graphique : pour cela sélectionner une plage quelconque, insérer un graphique en nuage de points et en ouvrant la boite « sélectionner des données » faire « modifier » et taper =Ehrenfest_1.xlsx !col_1 en abscisses et =Ehrenfest_1.xlsx !col_2 en ordonnées.

2.1.2 Que tirer de cette première simulation ?

On peut constater que lorsque le nombre de boules est faible (moins de 10) la fluctuation est importante avec des retours à l'état initial même avec un nombre de tirages important. Par contre pour N assez grand le nombre de retours est inexistant et on perçoit une stabilisation autour de $\frac{N}{2}$

2.2 étude expérimentale de X_n

L'idée est d'étudier sur 200 échantillons le nombre de boules dans A à l'issue de n tirages avec N variant entre 0 et 200 et n variant entre 0 et 2000.[2]

2.2.1 Réalisation sur Excel : fichier « Ehrenfest_2.xlsx »

On recopie 200 fois vers la droite la colonne B du fichier précédent (Feuille 1) : on nomme « ir » la celluleB4 et la matrice Mr de 200 colonnes et $nt+1$ lignes avec la fonction DECALER. Les valeurs prises par X_n (nombre de boules dans A à l'issue de nt tirages) se trouvent dans la ligne $nt+1$ de cette matrice. éLes résultats par échantillon sont récapitulés en feuille 2 aux lignes 3 et 4 à l'aide de la fonction INDEX. En colonne A,B et C lignes 6 et suivantes on trouve les effectifs déterminés avec la fonction FREQUENCE et les fréquences. On définit alors deux matrices colonnes vx et vy de $N+1$ lignes donnant les valeurs de X_n et les fréquences correspondantes[3]. Le graphique est réalisé en nuage de point avec barres d'erreurs en utilisant ces deux plages comme au paragraphe 2.1.1.

2.2.2 Que conclure de cette deuxiéme simulation ?

Elle confirme ce qui avait été observé avec la première et on peut constater que suivant les parités de N et n, certaines valeurs ne sont jamais atteintes, ce qui fournit une première occasion de faire raisonner les élèves.

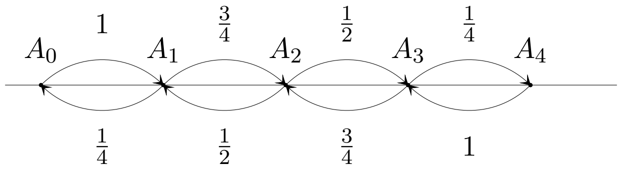
3 Un peu de théorie dans le cas où il y a quatre boules

On suppose donc par la suite que $N = 4$ et que l'on effectue n tirages.

1. Pour la syntaxe des fonctions DECALER et INDEX voir en annexe
2. Cette limitation à 200 et 2000 est due à la relative lenteur d'Excel. Avec Scilab et Xcas on peut aller un peu plus loin. En Scilab voir fichier « ehrenfest2.sce »
3. Voir le gestionnaire de noms

3.1 Un premier travail sur calcul formel

On peut demander aux élèves de représenter la situation par un graphe probabiliste à 5 sommets $A_0,\ A_1,\ A_2,\ A_3,\ A_4$ dans lequel A_i représente la situation « il y a i boules dans A ».



et demander la matrice de transition [4] qui est :

$$M = \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \dfrac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{3}{4} & 0 & \dfrac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dfrac{1}{4} & 0 \end{pmatrix}$$

Dans un premier temps on peut demander de définir la suite de vecteurs colonnes $(E_n)_{n\in\mathbb{N}}$ définie par récurrence par $E_0 = (0,0,0,0,1)$ (état initial) et la relation : si $n \geqslant 1$, $E_n = M.E_{n-1}$.

Par exemple avec WxMaxima la suite est définie en saisissant : E_n :=if n=0 then $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ else $M.E_{n-1}$

On obtient ainsi :
$E_2 = \left(0, 0, \dfrac{3}{4}, 0, \dfrac{1}{4}\right)$, $E_3 = \left(0, \dfrac{3}{8}, 0, \dfrac{5}{8}, 0\right)$, $E_4 = \left(\dfrac{3}{32}, 0, \dfrac{3}{4}, 0, \dfrac{5}{32}\right)$

$E_{35} = \left(0, \dfrac{17179869183}{34359738368}, 0, \dfrac{17179869185}{34359738368}, 0\right) \approx (0, 0.499, 0, 0.500, 0.0)$

$E_{50} = \left(\dfrac{281474976710655}{2251799813685248}, 0, \dfrac{3}{4}, 0, \dfrac{281474976710657}{2251799813685248}\right)$
$\approx (0.125, 0.0, 0.75, 0.0, 0.125)$
Ces résultats permettent de vérifier ceux obtenus par simulation.
Le calcul de M^n n'est pas toujours aisé avec les logiciel de calcul formel (du moins pour des éléves). On peut la donner mais son aspect est plutôt rébarbatif.

3.2 Un deuxième travail

3.2.1 Sans calcul formel

Sans donner la matrice M^n on peut poser les questions suivantes :

4. Dans cette matrice $m_{i,j}$ est la probabilité de l'arc reliant E_{j-1} à E_{i-1}

1. Montrer que si n est un entier naturel pair non nul alors $E_n = \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{2^{n+1}}, 0, \frac{3}{4}, 0, \frac{1}{8} + \frac{1}{2^{n+1}}\right)$ et que si n est impair alors $E_n = \left(0, \frac{1}{2} - \frac{1}{2^n}, 0, \frac{1}{2} + \frac{1}{2^n}, 0\right)$
2. Déterminer l'espérance mathématique de X_n et sa variance ainsi que leurs limites quand n tend vers $+\infty$
3. Quel est l'état stable ?

La question 1 peut se faire par récurrence. La 2 est un calcul simple : $E(X_n) = 2 + \frac{1}{2^{n-1}}$ et $V(X_n) = 1 - \frac{1}{2^{2n-2}}$
La question 3 nécessite la résolution du système : $M.(a, b, c, d, e) = (a, b, c, d, e)$

On obtient $(S)\left\{\begin{array}{lclcl} 4a & & & = & b \\ 2a & + & c & = & 2b \\ 3b & + & 3d & = & 4c \\ 2e & + & c & = & 2d \\ 4e & & & = & d \end{array}\right.$

L'ensemble des solutions est $\{(a, 4a, 6a, 4a, a) \ : a \in \mathbb{R}\}$. La condition $a + b + c + d + e = 1$ donne la solution $(a, b, c, d, e) = \left(\frac{1}{16}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{16}\right)$

On peut alors faire remarquer qu'il s'agit de la loi $\mathscr{B}\left(4, \frac{1}{2}\right)$ [5]

3.2.2 Avec calcul formel

En calculant M^n puis $M^n.E_0$ on obtient : $E_n = \begin{pmatrix} -2^{-n-2}(-1)^n + \frac{(-1)^n}{16} - 2^{-n-2} + \frac{1}{16} \\ 2^{-n-1}(-1)^n - \frac{(-1)^n}{4} - 2^{-n-1} + \frac{1}{4} \\ \frac{3(-1)^n}{8} + \frac{3}{8} \\ -2^{-n-1}(-1)^n - \frac{(-1)^n}{4} + 2^{-n-1} + \frac{1}{4} \\ 2^{-n-2}(-1)^n + \frac{(-1)^n}{16} + 2^{-n-2} + \frac{1}{16} \end{pmatrix}$

ou plus simplement
$E_n = \left(\frac{1+(-1)^n}{16} - \frac{1+(-1)^n}{2^{n+2}}, \frac{1-(-1)^n}{4} - \frac{1-(-1)^n}{2^{n+1}}, \frac{3(1+(-1)^n)}{8}, \frac{1-(-1)^n}{4} + \frac{1-(-1)^n}{2^{n+1}}, \frac{1+(-1)^n}{16} + \frac{1+(-1)^n}{2^{n+2}}\right)$
L'espérance de X_n se calcule alors en faisant le produit : $\begin{pmatrix} 0, & 1, & 2, & 3, & 4 \end{pmatrix}.E_n$
Ce qui donne $E(X_n) = \frac{2^{n+1} + 2}{2^n}$
Pour la variance : $V(X_n) = E(X_n^2) - E^2(X_n) = \frac{2^{2n} - 4}{2^{2n}}$
La résolution du système conduisant à l'état stable peut parfaitement se faire en calcul formel.

3.3 Prolongement possible

3.3.1 Avec un autre état initial

Prendre par exemple $\left(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5}\right)$. C'est à dire qu'avant de démarrer le processus on choisit au hasard (uniformément) le nombre initial de boules dans A
Dans ce cas on obtient $X_n = \begin{pmatrix} \frac{(-1)^n + 5}{80} & -\frac{(-1)^n - 5}{20} & \frac{3(-1)^n + 15}{40} & -\frac{(-1)^n - 5}{20} & \frac{(-1)^n + 5}{80} \end{pmatrix}$
Donc si n est pair $X_n = \begin{pmatrix} \frac{3}{40} & \frac{1}{5} & \frac{9}{20} & \frac{1}{5} & \frac{3}{40} \end{pmatrix}$ et si n est impair $X_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{20} & \frac{3}{10} & \frac{3}{10} & \frac{3}{10} & \frac{1}{20} \end{pmatrix}$

5. Ce résultat est général pour N quelconque, l'état stable est $\mathscr{B}\left(N, \frac{1}{2}\right)$

Le calcul de l'espérance $E(X_n) = (0,1,2,3,4).X_n$ donne 2 et celui de la variance donne 1. On peut remarquer que ces deux valeurs ne dépendent pas de n

3.3.2 Avec un état initial quelconque

Soit (a,b,c,d,e) un état initial quelconque (avec $a+b+c+d+e=1$)

On calcule l'espérance de X_n par $(0,1,2,3,4).M^n.\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$

Après simplification on obtient $\dfrac{(2\,e+2\,d+2\,c+2\,b+2\,a)\;2^n+2\,e+d-b-2\,a}{2^n}$

c'est à dire $2+\dfrac{2e+d-b-2a}{2^n}$.

On a donc $\lim\limits_{n\to+\infty} E(X_n)=2$

On obtient aussi $E(X_n^2) = \frac{(5\,e+5\,d+5\,c+5\,b+5\,a)\,2^n+8\,e+4\,d-4\,b-8\,a}{2^n} = \frac{8\,e+4\,d-4\,b-8\,a}{2^n}+5$

Ce qui permet d'affirmer que $\lim\limits_{n\to+\infty} V(X_n)=1$

Les fonctions DECALER et INDEX d'Excel

Fonction DECALER

La syntaxe est DECALER(ref ;lignes ;colonnes ;hauteur ;largeur)

« ref » est une plage de cellules adjacentes (ou une cellule)

« lignes et colonnes » représentent les nombres de lignes et de colonnes de décalage par rapport à la référence

« hauteur et largeur » sont les nombres de lignes et de colonnes de la plage

Exemples

- Si ref = A1 alors =DECALER(A1 ;2 ;3 ;1 ;2) donne la plage D3 :E3
- Si ref = F4 alors =DECALER(F4 ;-2 ;-1 ;2 ;1) donne la plage E2 :E3

Fonction INDEX

La forme qui nous intéresse est la forme matricielle dont la syntaxe est :

INDEX(matrice ; né de ligne ;né de colonne)

Si la plage A2 :C27 contient en première colonne les 26 premiers entiers naturels, en deuxiéme colonne leurs carrés et en troisième colonne leurs cubes alors =INDEX(A2 :C27 ;16 ;2) renvoie 256

Pour extraire une colonne particulière d'une matrice il suffit d'écrire =INDEX(matrice ; ;né de colonne).

Dans notre exemple =INDEX(A2 :C27 ; ;3) renvoie les 26 premiers cubes.

Pour extraire une ligne la façon de procéder est analogue : =INDEX(matrice ;né de ligne ;)