

# SIMULATION DE L'URNE D'EHRENFEST

## Son apport à l'appropriation des concepts d'équilibre statistique, d'irréversibilité, d'entropie, de flèche du temps.

Alain Marie-Jeanne, Frédéric Beau, Michel Janvier

### I) Introduction

Dans le cadre du projet SFODEM, au sein du groupe Informatique de l'IREM de Montpellier, nous avons été amenés à réaliser un grand nombre de simulations autour des thèmes de la stabilisation des fréquences, la loi des grands nombres et de la fluctuation d'échantillonnage (programme des classes de seconde 2000). Après avoir exploré les expériences classiques de lancers de dés ou de pièces, il nous a semblé intéressant de rechercher dans la physique des exemples de simulations mettant en œuvre les mêmes thèmes.

L'objectif pédagogique était de fournir aux élèves d'autres exemples plus originaux afin qu'ils développent leur sens de l'observation en statistique :

- repérer une expérience aléatoire
- prévoir la fluctuation d'échantillonnage
- Observer la stabilisation des fréquences pour les grands nombres.
- Conjecturer une loi de probabilité ....

Ces simulations, à cheval sur les maths et la physique, nous ont aussi permis de proposer à nos élèves de première et de terminale des sujets de TPE avec pour objectif de « production » la réalisation d'une simulation informatique.

Nous avons choisi, pour illustrer notre démarche, une simulation simple : l'urne d'Ehrenfest. Cette simulation, facile à réaliser (Tableur Excel + quelques lignes de programmation dans le langage VBA), peut conduire à des discussions très enrichissantes en physique théorique. De plus le modèle de l'urne d'Ehrenfest se prête facilement à la modélisation mathématique par des chaînes de Markov.

### II) Le modèle d'Ehrenfest

#### a) description du modèle

C'est un modèle de diffusion d'un gaz à travers une paroi proposé par les physiciens Ehrenfest (Mr et Mme) au début du siècle dernier : Une boîte séparée en 2 compartiments A et B contient au total  $N$  particules. A chaque top d'une horloge, une particule et une seule, choisie au hasard parmi les  $N$ , change de compartiment. A l'instant initial toutes les particules sont en A.

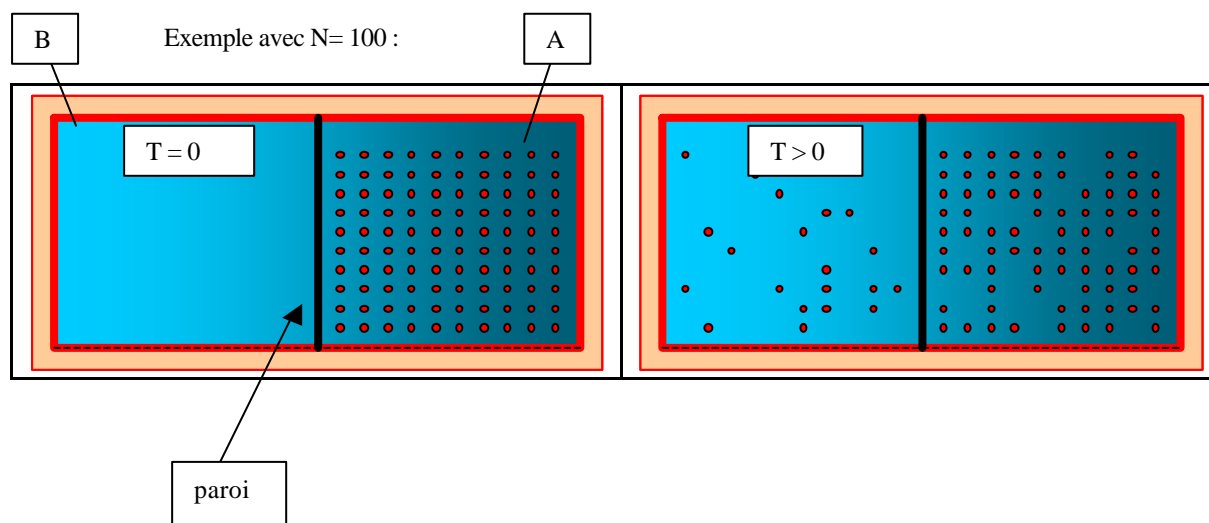


Figure 1 : Urne d'Ehrenfest, avec 100 particules à  $T = 0$ , et  $T > 0$

Dans ce modèle il est important de remarquer plusieurs points :

- la probabilité pour une particule donnée de passer de A à B, ou de B à A est la même, égale à  $1/N$ .
- Cette probabilité ne dépend pas du temps.
- Le comportement d'une particule est indépendant de celui des autres particules.

## b) Objectif du modèle:

Le modèle précédent ne permet évidemment pas d'obtenir des résultats quantitatifs sur la diffusion à travers une paroi. Pour les physiciens Ehrenfest l'un des objectifs était de lever le «paradoxe» de l'irréversibilité. Nous allons expliquer ce paradoxe.

L'irréversibilité est une évidence à notre échelle : la plupart des phénomènes macroscopiques ont une orientation dans le temps bien définie. Les assiettes se cassent mais malheureusement on n'a jamais vu des morceaux d'assiettes se ressouder spontanément pour reformer une assiette entière. Quasiment tous les phénomènes physiques, chimiques ou biologiques sont à sens unique.

Le second principe de la thermodynamique décrit cette irréversibilité : un système isolé évolue vers son maximum d'entropie et l'entropie ne diminue jamais (on doit ce principe à Clausius). Il y a donc une orientation dans le temps pour décrire l'évolution des systèmes isolés.

En thermodynamique classique l'entropie se définit comme le quotient d'une variation de chaleur par une température, c'est à dire par la mesure de 2 grandeurs macroscopiques. L'entropie est donc une grandeur caractérisant une situation macroscopique et le second principe de la thermodynamique décrit bien l'irréversibilité constatée à notre échelle. Cependant ce principe ne permet pas de comprendre l'origine de l'irréversibilité constatée. En effet, les lois de la dynamique des particules sont toutes réversibles et aucune des transformations des particules n'est irréversible (à part peut-être la désintégration des mésons K neutres découvert en 1964).

Les physiciens Ehrenfest 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 (le physicien Prigogine a pris une autre option en incluant au niveau des particules de l'irréversibilité).

Cette notion d'irréversibilité et celle d'augmentation de l'entropie pour un système isolé conduisent aux problèmes plus généraux de l'évolution de l'univers (qui prit dans son ensemble est un système isolé) et du sens de l'écoulement du temps vers le maximum de désordre (i.e. la flèche du temps).

## III) La simulation informatique

La simulation peut se réaliser avec le tableur Excel et le langage de programmation associé VBA (visual basic).

Le graphique (nuage de points) et le choix aléatoire de la particule qui va se déplacer ( par la fonction Ent (Alea( )\*100+1) peuvent se faire directement sous Excel sans avoir recours à la programmation. Par contre, pour que la même opération se répète un grand nombre de fois, il est plus pratique de recourir à la programmation (utilisation d'une boucle : For i = 1 to 500 .....Next i ).

La simulation permet de «voir» directement, sans aucun recours aux mathématiques, le comportement de l'urne. Sans l'ordinateur il n'aurait pas été possible pour des élèves de lycée de prévoir et d'analyser le comportement de l'urne (des simulations de ce type ont été réalisées, sans ordinateur, directement avec les élèves : chaque élève représente une particule dans un état A initial, le professeur tire le nom d'un élève au hasard et le fait se déplacer.....mais ces expériences restent limitées).

Il est important que les élèves comprennent le fonctionnement de la simulation et qu'ils soient convaincus que le programme décrit le plus fidèlement possible le modèle d'Ehrenfest. Par exemple il peut être utile de définir la pseudo-fonction Aléa( ). Nous proposons, dans le paragraphe VII, une activité élève

pour réaliser la simulation pas à pas. L'objectif de cette activité est de lever une partie du mystère de la programmation informatique.

#### IV) Analyse des résultats

Les résultats de la simulation peuvent sembler évidents, cependant ils sont riches en enseignement et conduisent à une réflexion sur la notion de temps intéressante.

##### a) L'irréversibilité :

Il semble impossible, en regardant la simulation pour  $N = 100$ , de revenir à l'état initial (toutes les particules dans le compartiment A). Le système s'équilibre apparemment autour de la position 50/50. Cet état d'équilibre paraît encore plus stable pour un nombre de particules plus grand ( $N = 1000$ ).

Nous constatons donc que l'évolution de l'urne d'Ehrenfest est irréversible puisque le système s'équilibre dans un état différent de l'état initial. On peut remarquer toutefois que, lorsque le nombre de particules est très faible ( $N=2, 3, \dots$ ) le comportement de l'urne est totalement réversible. Il faut donc l'accumulation d'un grand nombre de particules réversibles pour créer de l'irréversibilité.

La simulation «tempsretour.xls » permet de constater le comportement réversible de l'urne pour  $N$  petit.

##### b) Entropie et flèche du temps

L'urne se stabilise spontanément dans un état plus « désordonné » que l'état initial. Pour mesurer ce désordre, les physiciens statisticiens ( Boltzmann entre autres) ont défini l'entropie statistique : c'est le logarithme du nombre de façons permettant d'obtenir une situation donnée. (le logarithme n'a pas de sens statistique. Il permet uniquement à l'entropie d'avoir un comportement additif, comme l'énergie par exemple).

L'état correspondant au maximum d'entropie est donc l'état le plus probable. C'est vers cet état qu'un système isolé évoluera.

*Par exemple pour l'urne d'Ehrenfest :*

- l'état initial ne peut être obtenu que d'une façon : l'entropie statistique = 0
- Pour obtenir l'état  $x / N-x$ , il faut choisir  $x$  particules parmi  $N$  donc : l'entropie est  $\ln(C_N^x)$  à une constante additive près.

L'entropie de l'urne d'Ehrenfest pour  $N = 100$  particules est maximale dans l'état 50 / 50. C'est bien l'état d'équilibre constaté par la simulation.

Il est remarquable de constater que l'entropie statistique coïncide, à une transformation affine près, avec l'entropie thermodynamique.

##### c) le temps de retour

Un système tel que l'urne d'Ehrenfest possède  $n$  états ( $n$  étant le nombre total de particules dans le système composé des deux volumes), chaque état correspondant au nombre  $k$  de particules dans le volume A. Chacun de ces états peut être obtenu de  $C_n^k$  façons. Il y a donc  $2^n$  (somme des  $C_n^k$ ) situations possibles pour l'urne, chaque situation ne conduisant pas forcément à un état différent. Pour un nombre  $n$  de particules très grand (ce qui correspond à la réalité), on conçoit aisément, vu le grand nombre de situations possibles, que le retour à l'état initial sera extrêmement rare puisqu'une seule situation conduit à cet état. Quoiqu'il en soit, on démontre dans l'étude des chaînes de Markov que le retour à l'état initial est quasi-certain pour un tel système (application du critère de Foster à la matrice de transition de l'urne d'Ehrenfest, Pierre BREMAUD (1988) ). Nous avons étudié (et simulé informatiquement) le temps de retour pour l'urne d'Ehrenfest. L'espérance du temps de retour à l'état initial pour l'urne d'Ehrenfest est  $2^N$  où  $N$  est le nombre de particules. Pour le nombre de particules

traitées dans une situation macroscopique le temps de retour est donc quasiment infini à notre échelle (et même par rapport à l'âge de l'univers). L'irréversibilité apparente de la physique statistique est donc en grande partie due à la différence entre l'échelle de temps de l'observateur et celle du temps de retour.

#### d) conclusion sur l'irréversibilité

L'irréversibilité de l'urne d'Ehrenfest n'est donc qu'une illusion. D'une part elle dépend du nombre de particules mises en jeu, et d'autre part elle disparaît si le temps d'observation est illimité. Cependant, pour les situations macroscopiques usuelles (grands nombres de particules, temps d'observation limité), l'urne présente un comportement irréversible.

La plupart des activités proposées permettent d'évaluer le temps de retour pour se convaincre de l'irréversibilité du phénomène.

### V) Modélisations mathématiques

Les chaînes de Markov offrent un cadre naturel pour modéliser mathématiquement l'urne d'Ehrenfest.

Les chaînes de Markov permettent l'étude de *processus stochastiques*, c'est à dire de suites de variables aléatoires :  $(X_n)_n$ . L'indice  $n$  correspond au temps discrétisé. Pour l'urne d'Ehrenfest  $X_n$  prend ses valeurs dans  $\{E_0, E_1, \dots, E_N\}$  où  $E_i$  représente l'état de l'urne avec  $i$  particules dans le volume  $A$  (et  $N - i$  en  $B$ ).

Il est important de remarquer, que pour l'urne d'Ehrenfest, la v.a.  $X_i$  ne dépend que du passé immédiat, c'est à dire de  $X_{i-1}$ . Un tel processus est un processus de *Markov*.

De plus, la probabilité de passage de l'état  $E_i$  à l'état  $E_j$  en une seule étape est indépendante de l'instant  $n$  où il se produit : l'urne d'Ehrenfest est un processus *homogène*.

Les deux remarques précédentes montrent que le processus stochastique de l'urne d'Ehrenfest est entièrement décrit par la donnée de la **matrice de transition**  $\mathbf{P} = (p_{i,j})$  où  $p_{i,j}$  est la probabilité de passer de l'état  $E_i$  à l'état  $E_j$  en une seule étape. Ci-dessous un exemple de matrice de transition avec  $N = 2$  particules :

### Exemple: N = 2

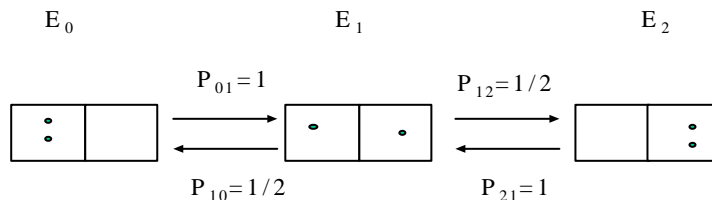


Figure 2 : Graphe de la diffusion d'Ehrenfest pour 2 particules

Pour schématiser le processus, on a utilisé un graphe dont les sommets sont les états. Il y a une flèche, étiquetée  $p_{i,j}$ , entre le sommet correspondant à l'état  $E_i$  et le sommet correspondant à l'état  $E_j$  si et seulement si la probabilité de transition de l'état  $E_i$  à l'état  $E_j$  est strictement positive.

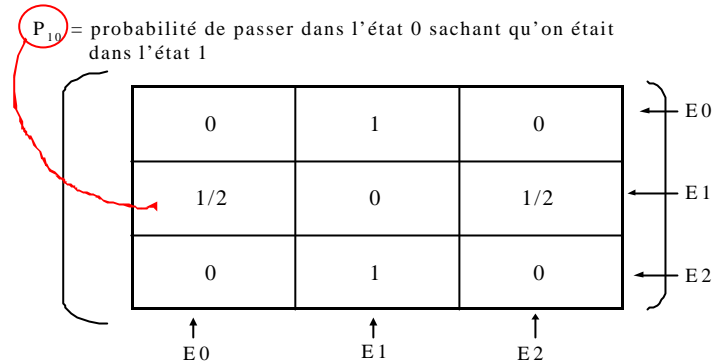


Figure 3 : Matrice de transition pour 2 particules

Dans la modélisation des chaînes de Markov, la loi de probabilité de la variable aléatoire  $X_n$  est donnée par le vecteur ligne  $\mathbf{M}_n$  ou  $i$ -ème le terme  $\mathbf{M}_n(i)$  représente la probabilité d'être dans l'état  $E_i$  en  $n$  étapes. D'après le théorème de la probabilité totale, on a la relation suivante :  $\mathbf{M}_{n+1} = \mathbf{M}_n \mathbf{P}$ , d'où, en itérant,  $\mathbf{M}_n = \mathbf{M}_0 \mathbf{P}^n$ . Voici un exemple avec  $N = 2$  :

## Exemple pour N = 2

- 3 états distincts  $E_0, E_1, E_2$ .
- Si à  $n=0$  on se trouve dans  $E_0$ :  $\mathbf{M}_0 = (1; 0; 0)$
- La loi de l'état suivant est  $\mathbf{M}_1$ :

$$(1; 0; 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = (0; 1; 0) = \mathbf{M}_1$$

De même  $\mathbf{M}_2 = (1/2; 0; 1/2)$

Dans le cas où il y a  $N$  particules, on a  $N + 1$  états,  $E_0, \dots, E_N$  et les coefficients  $p_{i,j}$  de la matrice de transition sont donnés par :

$$p_{k,k-1} = \frac{k}{N} \quad (1 \leq k \leq N) \quad p_{k,k+1} = 1 - \frac{k}{N} \quad (0 \leq k \leq N-1) \quad p_{k,l} = 0 \quad \text{pour } |k-l| \neq 1$$

comme cela résulte du graphe de transition :

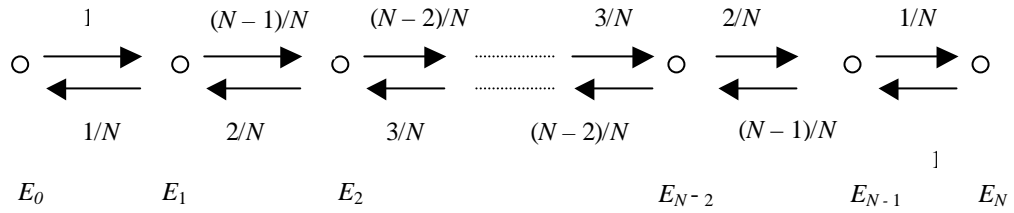


Figure 4 : Graphe de transition pour la diffusion d'Ehrenfest avec  $N$  particules

Le processus admet une loi de probabilité stationnaire  $u = (u_0, u_1, \dots, u_n)$ , c'est à dire une loi qui vérifie  $u = u \mathbf{P}$ . On la détermine en résolvant le système :

$$u_i = \sum_{j=0}^N p_{ij} u_j \quad (0 \leq i \leq N)$$

On montre que  $u$  est la loi binomiale de paramètres  $N$  et  $1/2$

C'est cette modélisation qui permet le calcul du temps de retour. On montre, en effet, que le temps de retour moyen de l'état  $E_i$  à l'état  $E_i$  est égal à  $1/u_i$ , de sorte que le temps moyen de retour à l'état initial  $E_0$  est  $2^n$  (Dominique Foata, Aimé Fuchs, 2002)

On démontre aussi que

$$m_n = E(X_n) = \frac{a}{2} + \left(1 - \frac{2}{n}\right)^n \frac{a}{2}$$

de sorte que  $m_n$  converge vers  $a/2$  de façon exponentielle, ce qui prouve qu'avec le temps, il y a, à peu près autant de particules, dans le compartiment  $A$  que dans le compartiment  $B$ .

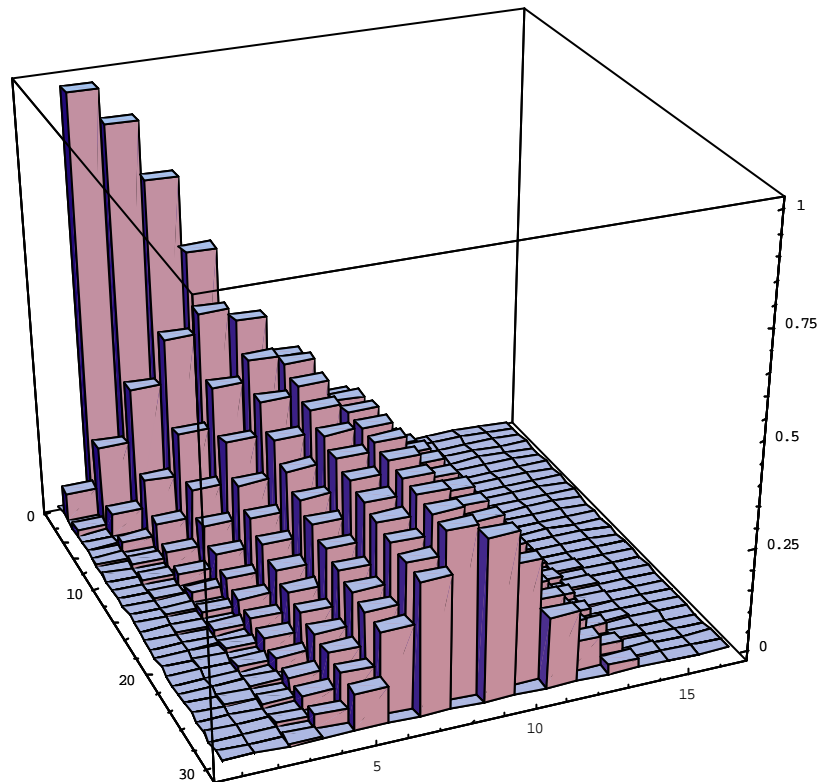


Figure 5 : Diagrammes en bâtons des distributions de probabilités des variables  $X_i$ , pour  $0 \leq i \leq 30$  et  $N = 20$  particules

La figure 5, obtenue à l'aide de Mathematica, représente les histogrammes des distributions de probabilité des variables aléatoires  $X_i$ , pour  $0 \leq i \leq 30$  et  $N = 20$  particules. On y voit très nettement l'existence de deux classes cycliques dans les états, la classe  $\{E_0, E_2, \dots\}$  des états avec un nombre pair de particules dans le compartiment A et la classe  $\{E_1, E_3, \dots\}$  des états avec un nombre impair de particules dans le compartiment A. On y voit également la tendance vers une situation où le nombre des particules tend à s'équilibrer entre les deux compartiments.

## VI) Autres simulations

Nous présentons d'autres simulations basées sur le même principe et inspirées de la physique statistique :

- diffusion de la chaleur sur une plaque
- Décroissance exponentielle de la radioactivité
- Etude du volume critique dans une bombe

## VII) Utilisation avec les élèves

Nous proposons trois exemples d'activité autour du thème de l'urne d'Erhenfest.

### Préliminaires

- Ces 2 activités doivent se faire après une présentation de la simulation de l'urne d'Ehrenfest (vidéo-projecteur) suivie d'une discussion sur le temps de retour.
- Les élèves doivent maîtriser la notion de fluctuation d'échantillonnage (programme de seconde), le calcul d'une moyenne cumulée (niveau seconde) et avoir une « intuition » de la loi des grands nombres (stabilisation des fréquences en classe de seconde).

### Niveau

La première partie de l'activité 1 est accessible dès la classe de seconde, la seconde partie est réservée à une classe de terminale S. Il en est de même des activités 2 et 3.

### Matériel

Un ordinateur par élève muni du logiciel Excel (version 97 ou plus) et du programme « tempsderetour.xls ». Le professeur dispose d'un ordinateur et d'un vidéo projecteur. Il utilise ce système pour lancer l'activité en expliquant notamment le fonctionnement de la simulation. Un questionnaire sur une feuille doit être en outre distribué aux élèves. C'est ce questionnaire que le professeur peut récupérer en fin de séance afin d'évaluer le travail des élèves.

### Durée de la séance

Une heure pour la partie 1 et Une autre heure pour la partie 2

Nous détaillerons le contenu de ces activités lors de l'atelier lié à cette communication.

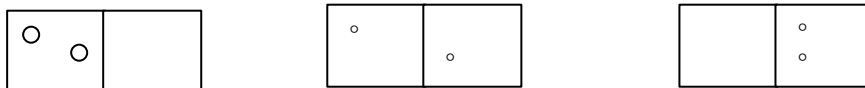
## Activité 1

L'objectif de cette activité est de conjecturer à l'aide d'une simulation, le temps de retour « moyen » pour un nombre fixé  $N$  de particules dans l'urne d'Ehrenfest (mathématiquement il s'agit de l'espérance du temps de retour). Dans une première phase, on utilise la simulation de l'urne d'Ehrenfest avec deux particules seulement dans le compartiment A au départ. On simule l'expérience jusqu'au retour à l'état initial, et on note le temps de retour à cet état. L'activité fait prendre conscience de la fluctuation de ce temps de retour et sa stabilisation lorsque l'on augmente le nombre de simulations. Dans une deuxième phase on fixe à 50 000 le nombre de simulations et l'on fait varier le nombre de particules placées au départ dans le compartiment A. On note pour chaque valeur de  $N$ , le temps moyen  $T_N$  de retour à l'état initial. On obtient un nuage de points  $(N, T_N)$ , pour  $1 \leq N \leq 15$  à partir duquel on peut conjecturer, par un ajustement exponentiel, la variation du temps de retour  $T_N$ , en fonction de  $N$ .

## Activité 2

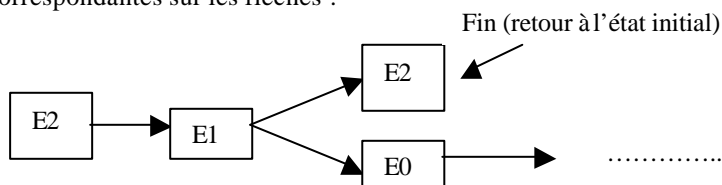
L'objectif de cette activité est de démontrer la formule trouvée lors de l'activité 1 pour le cas  $N=2$ .

On note  $E_0, E_1$  et  $E_2$  les 3 états de l'urne d'Ehrenfest pour le cas  $N=2$  :



L'état initial est  $E_2$  à  $t=0$  (la variable  $t$  représente le temps ou le nombre d'étapes). On arrête le système dès que l'on revient à  $E_2$  et on note  $T$  ce temps de retour.

On fait compléter l'arbre ci-dessous jusqu'à la sixième étape en mettant les probabilités correspondantes sur les flèches .



On fait calculer la probabilité de revenir à l'état initial en 2 étapes, en 3 étapes, en 4, 5 et 6 étapes, en  $2n$  étapes et en  $2n+1$  étapes. On considère  $2n$  étapes de l'expérience précédente et on note  $T_n$  la variable aléatoire qui associe le nombre d'étapes pour revenir à l'état initial ou 0 si on ne revient pas à l'état initial en  $2n$  étapes. On note  $E(T_n)$  l'espérance de  $T_n$  . On fait démontrer que

$$E(T_n) = \left(1 + \frac{2}{2^1} + \frac{3}{2^2} + \dots + \frac{n}{2^{n-1}}\right)$$

puis calculer la limite de  $E(N)$  quand  $N$  tend vers l'infini. Que représente cette limite?

### ACTIVITE 3

#### Réalisation de la simulation

Pour simuler l'urne d'Ehrenfest nous allons utiliser le tableur Excel et le langage associé VBA (« visual basic »). Ce langage simple permet de compléter le tableur en autorisant les boucles ( For i =1 to 100 .....instruction.....Next i), les autoréférences... La simulation nécessite seulement la gestion de deux boucles imbriquées et est tout à fait accessible aux programmeurs débutants. Toute la partie graphique est gérée directement par Excel et ne nécessite pas de programmation.

### ACTIVITE 4

Cette activité, réservée aux professeurs, ou à des étudiants en mathématiques, a pour objet de faire retrouver les résultats sur le temps de retour en utilisant la modélisation du processus par des chaînes de Markov.

Pour  $N = 3$  on déterminera les différents états de l'urne, et on tracera le graphe associé puis on écrira la matrice de transition  $\mathbf{P}$ . On écrira la matrice de transition dans le cas général et on déterminera la loi de probabilité stationnaire  $u = (u_0, \dots, u_N)$  en résolvant l'équation  $u = u \mathbf{P}$ . On calculera chacun des coefficients  $u_i$  par un raisonnement par récurrence. On déduira l'espérance du temps de retour à l'état initial et l'espérance  $E(X_n)$  de la variable aléatoire  $X_n$ , qui donne l'état du processus à l'instant  $n$ .

#### VIII – Conclusion

Cette simulation de l'urne d'Ehrenfest, facile à mettre en œuvre, est utilisable à différents niveaux scolaires et peut servir d'initiation à la démarche scientifique. Elle permet une réflexion sur les concepts d'équilibre statistique, d'irréversibilité, d'entropie, et de flèche du temps. Elle incite à des activités pluridisciplinaires. Seule la modélisation, peut expliquer les phénomènes observés et démontrer les résultats que l'on a pu conjecturer par la simulation.

## BIBLIOGRAPHIE

Frédéric BEAU, Michel JANVIERr, Alain MARIE-JEANNE *Simulation d'expériences aléatoires et traitement statistique des données*, in Suivi de formation à distance pour les enseignants de Mathématiques, I.R.E.M. de Montpellier, Université Montpellier II (2002)

BOREL E., *La mécanique statistique et l'irréversibilité*, in Œuvres, Tome 3 ; p. 1697, éd. C.N.R.S., Paris, 1972

BREMAUD, *Modélisation markovienne*, Département des mathématiques appliquées, Ecole Supérieure des Techniques Avancées (1988)

BRICMONT J., *Science of Chaos or Chaos in Science*, Physique théorique, UCL, Louvain-la-Neuve (1999)

BOUQUET A., *L'univers à sens unique*, Laboratoire de Physique Corpusculaire et Cosmologie, Collège de France (1990)

EHRENFEST-AFANASSJEW T., *On the use of the notion of „Probability“ in Physics*, American Journal of Physics (26 : 388) (1958)

EHRENFEST P., EHRENFEST T., *The conceptual foundations of the statistical approach in mechanics*, translated by M. J. MORA VESIK, Cornell University Press, Ithaca, 1959

Dominique FOATA, Aimé FUCHS *Processus stochastiques*, Dunod, Paris (2002)

GUIN D., JOAB M. & TROUCHE L., *Rapport de la phase expérimentale du SFODEM*, CDRom, IREM, Université Montpellier II. (2002)

MACKAY M.C., *The dynamic origin of increasing entropy*, Review of Modern Physics 61 (1989) 981

MONOD J., *Le hasard et la nécessité*, Le Seuil, Paris, 1970

PRIGOGINE I., *Why irreversibility ? The formulation of classical and quantum mechanics for non integrable systems*, International Journal of Quantum Chemistry, **53**, 105-118 (1995)

PRIGOGINE I., *La fin des certitudes, Temps, chaos et les lois de la nature*, Odile Jacob, Paris, 1996

REICHENBACH H., *The direction of time*, Springer (Berlin, 1989)

ZEH H.D., *The physical basis of the direction of time*, Springer (Berlin, 1989)