MAT^2
MATerials MATemàtics
Volum 2024, treball no. 5, 16 pp. ISSN: 1887-1097
Publicació electrònica de divulgació del Departament de Matemàtiques
de la Universitat Autònoma de Barcelona
www.mat.uab.cat/web/matmat

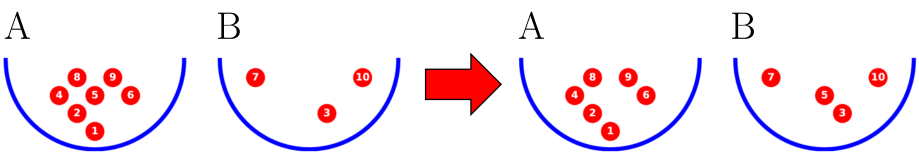
L'urna d'Ehrenfest

Maria Jolis

1 Introducció

Tatiana i Paul Ehrenfest

Aquest treball presenta un model molt senzill ideat el 1907 per Paul i Tatiana Ehrenfest per a l'intercanvi de calor entre dos cossos isolats que estan a temperatures diferents, vegi's la referència [EE]. La idea és la següent: tenim un total de N boles (que podem suposar numerades de 1 fins a N) distribuïdes en dues urnes (A i B). S'escull a l'atzar un enter entre 1 i N, de manera equiprobable, i es canvia la bola corresponent de l'urna en la que està a l'altra urna. I aquest procés es va repetint indefinidament. Cada urna representa un cos i el nombre de boles en cadascuna simbolitza la seva temperatura.



Il·lustració de com funciona el model. Aquí tenim un total de 10 boles i d'un instant a l'altre s'ha canviat d'urna la bola número 5. Clicant sobre l'esquema obtindreu una simulació del procés amb aquesta situació inicial.

Paul i Tatiana Ehrenfest veien l'intercanvi de calor no com a un procés ordenat, com a la termodinàmica clàssica, sinó com un procés aleatori, com a la teoria cinètica de la matèria. Aquest model es va utilitzar en la discussió d'una paradoxa famosa al principi del segle XX sorgida de l'intent de Boltzmann d'explicar la termodinàmica en base a la teoria cinètica. A la termodinàmica clàssica el procés d'intercanvi de calor entre dos cossos aïllats és irreversible degut a que l'entropia sempre és creixent. Per altra banda si es tracten els cossos com a un sistema dinàmic regit per una equació diferencial, tal que el seu flux associat conserva la mesura, podem aplicar el Teorema de recurrència de Poincaré. Aquest teorema assegura que gairebé tots els estats del sistema (en el sentit que el complementari d'aquest conjunt d'estats té mesura de Lebesgue zero) serien quasi recurrents, és a dir, amb el grau d'aproximació tan acurat com vulguem es tornen a produir. Així, per una banda qualsevol estat és irreversible però per l'altra segur que es torna a produir! Aquest teorema de recurrència va ser enunciat per Henry Poincaré el 1890 (vegi's [P]) i va ser provat per Constantin Carathéodory el 1919 usant teoria de la mesura (referència [C]).

Aquí estudiarem el model d'Ehrenfest com a una cadena de Markov i utilitzarem els resultats d'aquesta teoria per donar una explicació a l'aparent contradicció entre irreversibilitat i recurrència. Aquesta explicació també la podem trobar a l'article de Mark Kac (referència [K]), on es fan uns càlculs directes força enginyosos. Per a un punt de vista històric de l'aportació dels Ehrenfest a la mecànica estadística, podeu consultar l'article [GC] de les referències.

2 Cadenes de Markov

2.1 Resultats bàsics

A. A. Markov

Les cadenes de Markov[1] modelen certs sistemes que evolucionen aleatòriament al llarg del temps (que mesurem en unitats discretes). Aquests sistemes poden estar en un estat pertanyent a un conjunt finit o numerable i gaudeixen d'una propietat de falta de memòria en el sentit que si coneixem el seu estat en un moment determinat, l'evolució futura no depèn de com s'hi ha arribat en els instants anteriors.

Anomenarem I al conjunt, finit o numerable, dels possibles estats del sistema. Així, de manera més precisa, una cadena de Markov serà una successió de variables aleatòries $\{X_n,\, n \geq 0\}$ amb valors a I, definides en un cert espai de probabilitat $(\Omega, \mathcal{F}, \mathrm{P})$, que compleixen l'anomenada *propietat de Markov*:

Per a tot $n \geq 0$ i qualssevol $i_0, \dots, i_{n-1}, i, j \in I$,

$$P(X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = P(X_{n+1} = j | X_n = i), \tag{1}$$

sempre que les probablitats condicionades anteriors estiguin ben definides, és a dir, $P(X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) > 0$.

Quan parlem de l'evolució d'una cadena de Markov, usarem sovint un llenguatge descriptiu. Per exemple, si $X_0 = i$ direm que la cadena *surt* de

[1] Andrei Andreievitx Markov (1856–1922), en un article de 1906, va introduir les anomenades avui en dia Cadenes de Markov.

l'estat i, i si $X_n = i$ direm que a l'instant n la cadena *visita* l'estat i.

Les cadenes de Markov que apareixen habitualment a la pràctica són les que s'anomenen *homogènies en el temps* i són aquelles en què la probabilitat que apareix a la dreta de (1) no depèn de n, és a dir

$$\mathrm{P}(X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = \mathrm{P}(X_1 = j | X_0 = i). \quad (2)$$

A partir d'ara, una cadena de Markov serà sempre homogènia en el temps i no farem esment d'aquesta característica.

Veurem alguns dels resultats més importants sobre les cadenes de Markov que s'usen en l'estudi de l'urna d'Ehrenfest. Només trobareu les proves que no siguin gaire llargues i que no necessitin desenvolupar la teoria més extensament. Per il·lustrar alguns dels conceptes que apareixeran considerarem un model molt senzill de l'evolució de les mutacions d'un virus que podem veure a l'exemple següent.

Exemple 2.1. Suposem que un virus pot existir en N variants genètiques (que s'anomenen *soques*). A cada nova generació, el virus o bé es manté igual amb probabilitat $\alpha \in (0,1)$ o bé muta a una altra soca, que s'escull a l'atzar. Podem numerar de 1 a N les diferents soques i, així, el nostre espai d'estats serà $I = \{1, 2, \dots, N\}$. Llavors si diem X_n a la soca del virus a l'instant $n \geq 0$, tenim que

$$\begin{aligned} \mathrm{P}(X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots X_0 = i_0) &= \mathrm{P}(X_{n+1} = j | X_n = i) \\ &= \begin{cases} \alpha & \text{si } i = j \\ \frac{1-\alpha}{N-1} & \text{si } i \neq j. \end{cases} \end{aligned}$$

Una primera propietat de les cadenes de Markov és la següent:
Si $\{X_n,\, n \geq 0\}$ és una cadena de Markov, aleshores també es compleix que

$$P(X_{n+k} = j | \, (X_0, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i) = P(X_k = j | X_0 = i), \quad (3)$$

per a qualssevol $n, k \geq 1$, qualssevol $i, j \in I$ i tot $A \subset I^n$.

La prova d'aquest resultat requereix força feina però només usa propietats elementals de les probabilitats condicionades i la propietat de Markov.

En estudiar les cadenes de Markov els dos objectes més importants són la distribució inicial del sistema i la matriu de probabilitats de transició.

La distribució inicial: No és més que la distribució de la variable aleatòria X_0. La denotarem per π^0 i és un vector indexat pels elements de l'espai d'estats. Ho escriurem $\pi^0 = (\pi^0_i)_{i \in I}$, on $\pi^0_i = P(X_0 = i)$. Habitualment podem identificar I amb un subconjunt finit o numerable de $\mathbb{N} \cup \{0\}$ i considerarem π^0 com a un vector fila. Està clar que s'ha de complir que, per a tot $i \in I$, $\pi^0_i \geq 0$ i que $\sum_{i \in I} \pi^0_i = 1$.

La matriu de probabilitats de transició: (o simplement matriu de transició) és la matriu (possiblement infinita) indexada pels elements de $I \times I$ que denotarem per

$$\mathbf{P} = \Big(p_{ij} \Big)_{i,j \in I},$$

on

$$p_{ij} = \mathrm{P}(X_1 = j | X_0 = i).$$

Aquestes p_{ij} han de complir que, per a qualssevol $i, j \in I$, $p_{ij} \geq 0$ i que, per a tot $i \in I$,

$$\sum_{j \in I} p_{ij} = \sum_{j \in I} \mathrm{P}(X_1 = j | X_0 = i) = 1.$$

Així la matriu de transició té totes les entrades no negatives i les seves files sument totes 1. Una matriu d'aquestes característiques és anomenada *matriu estocàstica*.

Exemple 2.2. Per al nostre model de l'evolució del virus de l'exemple bàsic tindrem que la matriu $N \times N$ de probabilitats de transició és:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta & \cdots & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & \cdots & \beta & \beta \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \beta & \beta & \beta & \cdots & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \beta & \cdots & \beta & \alpha \end{pmatrix},$$

on $\beta = \frac{1-\alpha}{N-1}$. I s'observa que, efectivament, totes les files sumen 1.

A partir de la distribució inicial i de la matriu de transició es pot trobar molt fàcilment la distribució de qualsevol vector aleatori de la forma $(X_0, X_1, \ldots, X_n)$:

$$\begin{aligned} &\mathrm{P}(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \ldots, X_n = i_n) \\ &\quad = \mathrm{P}(X_0 = i_0) \times \mathrm{P}(X_1 = i_1 | X_0 = i_0) \times \mathrm{P}(X_2 = i_2 | X_0 = i_0, X_1 = i_1) \\ &\qquad \times \cdots \times \mathrm{P}(X_n = i_n | X_0 = i_0, \ldots, X_{n-1} = i_{n-1}) \\ &\quad = \mathrm{P}(X_0 = i_0) \times \mathrm{P}(X_1 = i_1 | X_0 = i_0) \times \mathrm{P}(X_1 = i_2 | X_0 = i_1) \\ &\qquad \times \cdots \times \mathrm{P}(X_1 = i_n | X_0 = i_{n-1}) \\ &\quad = \pi^0_{i_0} \, p_{i_0 i_1} \, p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n}. \end{aligned}$$

En el desenvolupament anterior hem aplicat la fórmula de la probabilitat composta i la propietat de Markov (2).

Un dels objectes interessants en l'estudi de les cadenes de Markov és la distribució de l'estat del sistema després de n passos. Es defineix

$$p^{(n)}_{ij} = \mathrm{P}(X_n = j | X_0 = i)$$

i considerarem la matriu formada per aquestes probabilitats:

$$\mathbf{P}^{(n)} = \left(p_{ij}^{(n)} \right)_{i,j \in I}.$$

És clar que $\mathbf{P}^{(n)}$ és una matriu estocàstica. Un fet fonamental és que aquesta matriu s'obté fent potències de la matriu de transició. Primer de tot, tenim que, per a qualssevol $n\,, m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$

$$p_{ij}^{(n+m)} = \sum_{k \in I} p_{ik}^{(n)}\, p_{kj}^{(m)}. \tag{4}$$

Quan n o m són 0 tenim $p_{ij}^{(0)} = \mathrm{P}(X_0 = j | X_0 = i) = \delta_{ij}$ (on δ_{ij} val 1 si $i = j$ i 0 en cas contrari).

Les relacions donades per (4) s'anomenen *equacions de Chapman-Kolmogorov*. La seva prova (fem el cas $n \geq 1$ i $m \geq 1$, ja que si alguna d'elles és 0, la fórmula és clarament certa) s'obté del desenvolupament següent:

$$\begin{aligned}
p_{ij}^{(n+m)} &= \mathrm{P}(X_{n+m} = j | X_0 = i) = \sum_{k \in I} P(X_{n+m} = j, X_n = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in I} \mathrm{P}(X_{n+m} = j | X_n = k, X_0 = i) \mathrm{P}(X_n = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in I} P(X_m = j | X_0 = k) P(X_n = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in I} p_{kj}^{(m)} p_{ik}^{(n)}.
\end{aligned}$$

Aquí, a la penúltima igualtat hem utilitzat (3), usant el fet que

$$\begin{aligned}
&\mathrm{P}(X_{n+m} = j | X_n = k, X_0 = i) \\
&\qquad\qquad = \mathrm{P}(X_{n+m} = j | X_n = k, (X_0, \ldots, X_{n-1}) \in \{i\} \times I^{n-1}).
\end{aligned}$$

De les equacions de Chapman-Kolmogorov obtenim que la matriu $\mathbf{P}^{(n+m)}$ és igual al producte de $\mathbf{P}^{(n)}$ i $\mathbf{P}^{(m)}$ i, degut a que $\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{P}$, tenim usant inducció que

$$\mathbf{P}^{(n)} = \mathbf{P}^n.$$

Aquests fets ens permeten usar el càlcul matricial (sobretot en el cas I finit) per a l'estudi del comportament de les cadenes de Markov.

Un altre resultat important és com es calcula la distribució de les variables aleatòries X_n, sense condicionar a un estat inicial. Denotarem per $\pi^n = (\pi_i^n)_{i \in I}$ (vector fila) la distribució de probabilitat de X_n, és a dir,

$$\pi_i^n = \mathrm{P}(X_n = i).$$

Llavors

$$\pi_i^n = \sum_{k \in I} \mathrm{P}(X_0 = k)\, \mathrm{P}(X_n = i | X_0 = k),$$

relació que es pot escriure matricialment com

$$\pi^n = \pi^0\, \mathbf{P}^{(n)} = \pi^0\, \mathbf{P}^n. \tag{5}$$

Cosa que ens diu que coneixent la distribució inicial i la matriu de transició també podem obtenir la distribució de qualsevol de les variables aleatòries que formen la cadena.

Ara passarem a veure algunes de les propietats i resultats més importants sobre les cadenes de Markov que necessitem per a l'estudi de la cadena d'Ehrenfest. Una bona referència és el llibre de Norris, vegi's [N].

Definició 2.3. Es diu que "és possible anar de l'estat i a l'estat j", i s'escriu com " $i \to j$ ", si existeix un $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ tal que $p_{ij}^{(n)} > 0$. Si es pot anar de i a j i de j a i, es diu que " i i j es comuniquen" i s'escriu " $i \leftrightarrow j$".

Exemple 2.4. A la cadena de l'evolució del virus tots els estats comuniquen ja que $p_{ij}^{(1)} = p_{ij} > 0$ per a qualssevol $i, j \in \{1, \ldots, N\}$.

Es pot veure bastant fàcilment que la relació de comunicació és una relació d'equivalència a l'espai d'estats I. En efecte, la relació és clarament simètrica, també és reflexiva, ja que $p_{ii}^{(0)} = 1$ i, per tant, $i \leftrightarrow i$. Per a la transitivitat, si $p_{ij}^{(n)} > 0$ i $p_{jk}^{(m)} > 0$, per les equacions de Chapman-Kolmogorov

$$p_{ik}^{(n+m)} = \sum_{l \in I} p_{il}^{(n)} p_{lk}^{(m)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{jk}^{(m)} > 0.$$

Per tant, si $i \to j$ i $j \to k$, tenim $i \to k$.

Quan hi ha una única classe d'equivalència, és a dir, tots els estats es comuniquen, és diu que la cadena és *irreductible*. Molts dels resultats sobre comportament a llarg termini de les cadenes de Markov són per a cadenes irreductibles.

2.2 Distribució estacionària

Un altre concepte important és el de *distribució estacionària*.

Definició 2.5. Direm que una distribució de probabilitat $\pi = (\pi_i)_{i \in I}$ és una distribució estacionària per a una cadena de Markov amb matriu de transició $\mathbf{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$, si es compleix que per a tot $i \in I$

$$\pi_i = \sum_{k \in I} \pi_k\, p_{ki},$$

o, matricialment,

$$\pi = \pi \mathbf{P}.$$

El nom de distribució estacionària està motivat pel fet que si es pren com a distribució inicial una distribució estacionària, aleshores la distribució de totes les variables de la cadena és aquesta mateixa distribució. En efecte, si $\pi^0 = \pi$ amb π estacionària, usant (5) i la condició d'estacionarietat, tenim

$$\pi^n = \pi^0\,\mathbf{P}^n = \pi\,\mathbf{P}^n = \pi\,\mathbf{P}\,\mathbf{P}^{n-1} = \pi\,\mathbf{P}^{n-1} = \cdots = \pi\mathbf{P} = \pi.$$

2.3 Recurrència i Teorema ergòdic

Per a estudiar el comportament a llarg termini d'una cadena de Markov cal introduir el concepte de recurrència. Es diu que un estat i és recurrent quan, sortint d'ell, el tornem a visitar alguna vegada amb probabilitat 1. Necessitem unes notacions per expressar de manera més precisa aquest concepte. Donat un estat $i \in I$ es defineix una variable *aleatòria* (que pot prendre el valor $+\infty$), τ_i, de la manera següent . Per a un element ω del nostre espai mostral Ω,

$$\tau_i(\omega) = \inf\{n \geq 1 : X_n(\omega) = i\},$$

és a dir, $\tau_i(\omega)$ és el primer instant (sense tenir en compte l'inicial), en què visitem i. El conjunt que defineix $\tau_i(\omega)$ podria ser buit (en el cas en què $X_n(\omega)$ no fos mai igual a i) i en aquest cas, per definició, $\tau_i(\omega) = +\infty$.

Definició 2.6. Donada una cadena de Markov $\{X_n, n \geq 0\}$ amb espai d'estats I i donat un $i \in I$, direm que i és **recurrent** si

$$\mathrm{P}(\tau_i < +\infty | X_0 = i) = 1.$$

Fixem-nos que aquesta condició expressa que, amb probabilitat 1, per a algun $n \in \mathbb{N}$ (que és aleatori), $X_n = i$.
Si la probabilitat anterior és estrictament menor que 1, direm que l'estat i és **transitori**.

Les cadenes de Markov gaudeixen d'una propietat de regeneració (anomenada *propietat forta de Markov*), que no formalitzarem aquí, però que en aquest context implica que un cop la cadena ha arribat a un estat i, des del punt de vista probabilístic, és com si la cadena tornés a començar en aquest estat. Aquest fet permet demostrar que un estat és recurrent si i només si, sortint d'ell, el tornem a visitar no només alguna sinó infinites vegades, amb probabilitat 1, (d'aquí el nom de recurrent). En canvi, per a un estat transitori, el nombre de visites al llarg del temps és finit amb probabilitat 1, és a dir, arriba un moment en què la cadena ja no torna a visitar més aquest estat. Usant també la propietat forta de Markov es pot demostrar que els temps entre les successives visites a un estat i recurrent, condicionant a que sortim d'ell, són variables aleatòries independents amb la mateixa distribució que τ_i.

Una altra propietat molt important és que la recurrència o la transitorietat és una propietat de classe. Es a dir, si dos estats i i j es comuniquen, són ambdós recurrents o transitoris.

Suposem que i és un estat recurrent, aleshores definim

$$\mu_i = \mathrm{E}(\tau_i | X_0 = i) = \sum_{n=1}^{\infty} n \, \mathrm{P}(\tau_i = n | X_0 = i),$$

de forma que μ_i és el temps que esperem tardar entre dues visites a l'estat i. Tot i que, per ser i recurrent, τ_i és una variable aleatòria finita (quasi segurament), podria ser que aquest temps prengués valors molt grans amb probabilitat prou gran, de manera que la sèrie anterior sigui divergent, en aquest cas tindríem $\mu_i = +\infty$.

Ara ja estem en condicions d'enunciar l'anomenat *Teorema ergòdic* que és un ingredient necessari en el que segueix. Si $A \subset \Omega$, denotarem per $\mathbf{1_A}$ (funció indicatriu d'A) la funció definida sobre Ω donada per $\mathbf{1_A}(\omega) = \mathbf{1}$ si $\omega \in A$ i $\mathbf{1_A}(\omega) = \mathbf{0}$ si $\omega \notin A$.

Teorema 2.7 (Teorema ergòdic)**.** *Sigui* $\{X_n,\, n \geq 0\}$ *una cadena de Markov* **irreductible**. *Si j és un estat recurrent, aleshores*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k = j\}} \longrightarrow \frac{1}{\mu_j}, \text{ quan } n \to \infty, \text{ amb probabilitat } 1.$$

La demostració d'aquest fet usa les propietats que hem anat veient i d'altres sobre la recurrència i la Llei Forta dels Grans Nombres de Kolmogorov. Cal dir que la conclusió del Teorema ergòdic és certa tant si μ_j és finita com si no (si $\mu_j = +\infty$, aleshores el límit és 0).

La interpretació del resultat és força intuïtiva. Fixem-nos que

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k = j\}}$$

és la proporció de visites a l'estat j, en n unitats de temps. Llavors, el Teorema ergòdic diu que aquesta proporció per a n gran és (aproximadament) inversament proporcional al temps que esperem que passi entre dues visites consecutives.

El resultat que usarem en el nostre estudi de la cadena d'Ehrenfest és el corol·lari següent del Teorema ergòdic.

Corol·lari 2.8. *Sigui* $\{X_n,\, n \geq 0\}$ *una cadena de Markov* **irreductible**. *Sigui j un estat recurrent i considerem qualsevol estat i (que també serà recurrent). Aleshores*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} \longrightarrow \frac{1}{\mu_j}, \text{ quan } n \to \infty.$$

Demostració: Fixem-nos que

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} = \mathrm{E}\Big(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k=j\}}\Big| X_0 = i\Big).$$

Pel Teorema ergòdic, el que tenim dins de l'esperança convergeix quasi segurament a la constant $\frac{1}{\mu_j}$, i també és cert si condicionem a que $X_0 = i$. El resultat segueix del fet que podem intercanviar el límit amb l'esperança condicionada degut al Teorema de la convergència dominada, ja que

$$0 \le \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{X_k=j\}} \le 1.$$

□

2.4 Cadenes de Markov amb espai d'estats finit

En el cas en què el nostre espai d'estats sigui finit, com és el cas de la cadena d'Ehrenfest, es poden donar resultats addicionals.

Proposició 2.9. *Sigui $\{X_n, n \ge 0\}$ una cadena de Markov irreductible amb espai d'estats I finit. Aleshores tots els estats són recurrents.*

Demostració. Com que la cadena de Markov és irreductible tenim que tots els estats són o bé transitoris o bé recurrents. Si tots fossin transitoris aleshores, amb probabilitat 1, cada estat només es visitaria un nombre finit de vegades. Com que només tenim un nombre finit d'estats, això no pot ser ja que, per a cada $n \in \mathbb{N}$ i per a tot $\omega \in \Omega$, $X_n(\omega)$ és igual a algun dels estats. □

Observació 2.10. Aquest resultat no és cert en general en el cas en què I no és finit. Un exemple important és el passeig aleatori simple sobre $\mathbb{Z}^3$. Podeu trobar un estudi del comportament del passeig aleatori en dimensions 1, 2 i 3, en quant a recurrència (tot i que no es fa servir aquesta terminologia), a l'article de Xavier Bardina de la referència [B]. Aquest treball no usa la teoria de les cadenes de Markov i és totalment autocontingut.

Teorema 2.11. *Sigui $\{X_n, n \ge 0\}$ una cadena de Markov irreductible amb espai d'estats finit. Aleshores la cadena té una única distribució estacionària $\pi = (\pi_j)_{j\in I}$ donada per*

$$\pi_j = \frac{1}{\mu_j}.$$

Demostració. Primer de tot, vegem que

$$\sum_{j\in I} \pi_j = 1. \tag{6}$$

En efecte, fixem un estat $i \in I$ qualsevol. Usant el Corol·lari 2.8, podem escriure

$$\begin{aligned}\sum_{j\in I} \pi_j = \sum_{j\in I} \lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} \right) &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \left(\sum_{j\in I} \sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} \right) \\ &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \left(\sum_{k=1}^{n} \sum_{j\in I} p_{ij}^{(k)} \right),\end{aligned}$$

i, usant que

$$\sum_{j\in I} p_{ij}^{(k)} = 1,$$

obtenim (6). Observem que el primer intercanvi entre límit i suma el podem fer sense problemes ja que I és finit.

Com que per a tot $j \in I$, es compleix que $\pi_j \geq 0$ ja tenim que π és una distribució de probabilitat.

Per comprovar que és una distribució estacionària s'ha de veure que

$$\pi_j = \sum_{i\in I} \pi_i \, p_{ij}. \tag{7}$$

Tenim, usant arguments semblants, que

$$\begin{aligned}\sum_{i\in I} \pi_i \, p_{ij} &= \sum_{i\in I} \lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{ji}^{(k)} \right) p_{ij} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{i\in I} p_{ji}^{(k)} p_{ij} \\ &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{jj}^{(k+1)} = \lim_{n\to\infty} \frac{n+1}{n} \left(\frac{1}{n+1} \sum_{k=1}^{n+1} p_{jj}^{(k)} - \frac{1}{n+1} p_{jj} \right) = \pi_j.\end{aligned}$$

Aquí hem utilitzat també, a la tercera igualtat, les equacions de Chapman-Kolmogorov.

Comprovem que π és l'única distribució estacionària. Suposem que $\bar{\pi}$ és una altra distribució estacionària, llavors es complirà que $\bar{\pi} = \bar{\pi}\mathbf{P}^n$ per a tot $n \in \mathbb{N}$ i, per tant,

$$\bar{\pi} = \lim_{n\to\infty} \bar{\pi}\mathbf{P}^n,$$

i aleshores

$$
\begin{aligned}
\bar{\pi}_j &= \lim_{n\to\infty} \sum_{i\in I} \bar{\pi}_i \, p_{ij}^{(n)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \left(\sum_{i\in I} \bar{\pi}_i p_{ij}^{(k)} \right) \\
&= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i\in I} \bar{\pi}_i \left(\sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} \right) = \sum_{i\in I} \bar{\pi}_i \left(\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)} \right) \\
&= \sum_{i\in I} \bar{\pi}_i \pi_j = \pi_j .
\end{aligned}
$$

A part dels fets usats anteriorment, a la segona igualtat hem fet servir que si una successió té un cert límit, aleshores la successió de les seves mitjanes aritmètiques té el mateix límit, i al final que $\sum_{i\in I} \bar{\pi}_i = 1$. □

Observació 2.12. Es pot demostrar, usant altres resultats sobre les cadenes amb espai d'estats finit que les π_j donades al teorema anterior són totes estrictament positives o, equivalentment, $\mu_j < +\infty$ per a tot $j \in I$.

Exemple 2.13. Calculem ara la distribució estacionària de la cadena del nostre exemple del virus. En vista de que la cadena és irreductible sabem que té una única distribució estacionària. Plantejant les equacions d'estacionarietat

$$
\pi_j = \sum_{i=1}^{N} \pi_i \, p_{ij} = \frac{1-\alpha}{N-1} \sum_{i:i\neq j} \pi_i \, + \alpha \, \pi_j ,
$$

observem que si tots els π_i tenen el mateix valor se satisfan les equacions. Imposant que $\sum \pi_i = 1$ tenim que $\pi = (\frac{1}{N}, \ldots, \frac{1}{N})$ és la distribució estacionària de la cadena. Finalment, usant que $\pi_i = \frac{1}{\mu_i}$, s'obté que el temps que passa en mitjana entre dues vegades seguides en què el nostre virus és de la mateixa soca és igual a N.

3 La cadena d'Ehrenfest

3.1 El model d'Ehrenfest com a cadena de Markov

Recordem el model d'Ehrenfest: tenim dues urnes, amb un total de N boles distribuïdes en les dues urnes A i B. En instants de temps discrets, que indexarem en $\mathbb{N}$, sortegem de manera equiprobable quina de les boles serà canviada de l'urna on és en aquest instant. Per estudiar aquest procés només cal considerar el número de boles que hi ha en cada instant a l'urna A, que sempre serà un número entre 0 i N.

Denotem doncs per X_n, $n \geq 0$, el nombre de boles que hi ha a l'instant n a l'urna A. Considerarem que X_0 és una variable aleatòria qualsevol amb valors a $I = \{0, \ldots N\}$. Per les característiques de l'experiment, el comportament probabilístic del nombre de boles a l'urna A a l'instant $n+1$, si coneixem quantes boles hi havien als instants anteriors només depèn del nombre de boles que hi havia a l'instant n. A més, la probabilitat de tenir un cert número de boles a l'instant $n+1$ sabent el nombre de boles a l'instant n no depèn de n, essent doncs $\{X_n,\, n \geq 0\}$ una cadena de Markov homogènia en el temps amb espai d'estats I. A més, si en l'instant n teníem i boles a l'urna A, a l'instant $n+1$ només podem tenir $i+1$ o $i-1$, a no ser que n'hi haguessin 0, i aleshores forçosament en tindrem una (ja que segur que agafem la bola de l'urna B) i si en tenim N, cas en què forçosament passarem a tenir-ne $N-1$. Les probabilitats de transició seran

$$p_{ij} = \mathrm{P}(X_{n+1} = j | X_n = i) = \begin{cases} \frac{N-i}{N}, & \text{si } j = i+1, \quad i = 0, \dots, N-1 \\ \frac{i}{N}, & \text{si } j = i-1, \quad i = 1, \dots N. \end{cases}$$

Per exemple, si $N = 5$ la matriu de transició serà

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & \cdots & p_{05} \\ p_{10} & p_{11} & \cdots & p_{15} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ p_{50} & p_{51} & \cdots & p_{55} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{5} & 0 & \frac{4}{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{5} & 0 & \frac{3}{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & 0 & \frac{2}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{5} & 0 & \frac{1}{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Com que podem anar de i a $i+1$ amb probabilitat positiva en un pas, per a $i = 0, \dots, N-1$ i també podem anar amb un pas amb probabilitat positiva de i a $i-1$, per a $i = 1, \dots, N$, tenim que tots els estats comuniquen, essent doncs la cadena irreductible. I com que l'espai d'estats és finit, tots els estats seran recurrents.

3.2 Reversibilitat i estacionarietat

El nostre objectiu és ara trobar la distribució estacionària de la cadena d'Ehrenfest. Una manera fàcil d'obtenir-la és usant el concepte de reversibilitat de la definició següent.

Definició 3.1. Direm que una cadena de Markov, amb matriu de transició $\mathbf{P} = (p_{i,j})_{i,j \in I}$, és **reversible respecte la distribució de probabilitat** π si es compleix que per a qualssevol $i,\, j \in I$

$$\pi_i\, p_{ij} = \pi_j\, p_{ji}.$$

Si es pren com a distribució inicial de la cadena una distribució que satisfaci la condició de reversibilitat, aleshores es compleix que

$$\mathrm{P}(X_0 = i,\, X_1 = j) = \mathrm{P}(X_0 = j,\, X_1 = i),$$

ja que

$$\begin{aligned}\mathrm{P}(X_0 = i,\, X_1 = j) &= \mathrm{P}(X_0 = i)\mathrm{P}(X_1 = j | X_0 = i) = \pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji} \\ &= \mathrm{P}(X_0 = j)\mathrm{P}(X_1 = i | X_0 = j) = \mathrm{P}(X_0 = j,\, X_1 = i).\end{aligned}$$

Més en general, es pot provar que, per a tot $n \in \mathbb{N}$,

$$\mathrm{P}(X_0 = i_0,\, X_1 = i_1,\, \ldots, X_n = i_n) = \mathrm{P}(X_0 = i_n,\, X_1 = i_{n-1},\, \ldots, X_n = i_0),$$

i això justifica l'us de l'expressió "cadena reversible".

Es pot veure molt fàcilment que si existeix una distribució de probabilitat π complint la definició de reversibilitat, aleshores, π és una distribució estacionària de la cadena. En efecte,

$$\sum_{i \in I} \pi_i p_{ij} = \sum_{i \in I} \pi_j p_{ji} = \pi_j \sum_{i \in I} p_{ji} = \pi_j$$

i, per tant, la distribució π és estacionària.

Quan la cadena de Markov té espai d'estats finit i és irreductible, sabem que existeix una única distribució estacionària, que, en general, no té perquè satisfer la condició de reversibilitat. Ara bé, si intuïm que la nostra cadena pot tenir una distribució que faci la cadena reversible, podem provar d'obtenir la distribució estacionària resolent les equacions de reversibilitat, ja que aquestes són més senzilles que les d'estacionarietat.

Exemple 3.2. A la cadena del virus es compleix que la cadena és reversible respecte la seva distribució estacionària ja que les equacions de reversibilitat

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji},$$

clarament es satisfan si $\pi_i = \frac{1}{N}$ per a tot $i \in I$, ja que $p_{ij} = p_{ji}$ per a qualssevol $i,\, j \in I$.

En el cas de l'urna d'Ehrenfest, com que les boles poden ser canviades d'urna amb les mateixes regles, sembla possible l'existència d'una distribució que fa la cadena reversible i que, per tant, serà estacionària.

Observació 3.3. També és possible resoldre les equacions que ha de complir la distribució estacionària sense gaire dificultat, però és més senzill seguir aquest camí alternatiu. Per altra banda, comprovar l'existència de la distribució que fa la cadena reversible és interessant per si mateix.

Plantegem doncs les condicions de reversibilitat per a $j = i + 1$:

$$\pi_i\, p_{i,i+1} = \pi_{i+1}\, p_{i+1,i},$$

és a dir

$$\pi_i \frac{N-i}{N} = \pi_{i+1} \frac{i+1}{N},$$

d'on deduïm

$$\pi_{i+1} = \pi_i \, \frac{N-i}{i+1}.$$

Així, podem obtenir les π_i de manera recurrent. Quan $i = 0$, es té $\pi_1 = N\,\pi_0$. D'aquí, es prova, per inducció, que per a tot $i \leq N$

$$\pi_i = \binom{N}{i} \pi_0. \tag{8}$$

En efecte, per a $i = 0$ és clar i per a $i = 1$ ho acabem de veure. Suposem que (8) és cert per a $i = k \leq N - 1$ i provem-ho per a $i = k + 1$:

$$\pi_{k+1} = \pi_k \, \frac{N-k}{k+1} = \binom{N}{k} \pi_0 \, \frac{N-k}{k+1} = \binom{N}{k+1} \pi_0.$$

Per tant es compleix (8). Ara hem d'imposar que π sigui una distribució de probabilitat, és a dir $\sum\limits_{i=0}^{N} \pi_i = 1$:

$$\sum_{i=0}^{N} \binom{N}{i} \pi_0 = 2^N \pi_0 = 1,$$

d'on es dedueix que

$$\pi_i = \binom{N}{i} \frac{1}{2^N}$$

és una distribució estacionària per a la cadena que, a més, fa la cadena reversible. Fixem-nos que es tracta d'una distribució binomial de paràmetres N i $p = 1/2$.

Tot això diu també que si a l'instant inicial posem les N boles a les urnes de manera totalment aleatòria (amb això volem dir que cada bola pot anar amb probabilitat $\frac{1}{2}$ a qualsevol de les dues urnes i de manera independent), és a dir si X_0 té distribució binomial amb paràmetres N i $p = \frac{1}{2}$, tindrem aquesta mateixa distribució per a totes les X_n.

Comentem ara quines conseqüències té l'existència d'aquesta distribució estacionària. Una pregunta que es pot fer fer és què passaria si al principi tinguéssim totes les boles a l'urna A?, és a dir $X_0 = N$. Hem vist que per ser tots els estats recurrents, tornarem a tenir aquesta situació no una sinó infinites vegades. Ara bé, com és que si pensem en la transmissió de calor no observem mai a la pràctica aquesta situació? Recordem que per a la distribució estacionària tenim $\pi_i = \frac{1}{\mu_i}$ on $\mu_i = \mathrm{E}(\tau_i | X_0 = i)$, és a dir l'esperança del temps que passa fins al primer retorn a l'estat i si hem sortit d'aquest estat. Així

$$\mathrm{E}(\tau_N|X_0 = N) = \frac{1}{\pi_N} = \frac{1}{1/2^N} = 2^N$$

Mark Kac (1914–1984)

A l'article de Mark Kac (referència [K]) es fan els següents càlculs concrets: Si $N = 20000$ (que és un nombre molt petit si pensem en molècules de gas) i si els canvis en la composició es produeixen cada segon obtenim que

$$\mathrm{E}(\tau_{20000}|X_0 = 20000) = 2^{20000} \text{ segons},$$

que és de l'ordre de 1.26×10^{6013} anys. Per fer-nos una idea de la magnitud d'aquest valor notem que el consens dels científics actuals és que l'edat de l'univers és d'entre 1.3761×10^{10} i 1.3835×10^{10} anys (!).

Tornant a la motivació del model d'Ehrenfest, d'aquest resultat es desprèn que és compatible que els estats del nostre sistema siguin recurrents amb la irreversibilitat. Si partim de la situació extrema en què totes les boles són a l'urna A, tot i que sabem que amb probabilitat 1 hi tornarem (i infinites vegades) a aquesta situació, el temps que hem d'esperar (en mitjana) és tan gran que fa impossible a la pràctica observar aquesta recurrència.

A l'article de Kac també es considera el cas on la composició inicial consisteix a tenir 10000 boles a cada urna, és a dir, partim d'una situació equilibrada. Llavors tenim que

$$E(\tau_{10000}|X_0 = 10000) = \frac{1}{\binom{20000}{10000}/2^{20000}}.$$

Aplicant l'aproximació de Stirling:

$$n! \sim \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$$

per als factorials de nombres molt grans resultarà

$$E(\tau_{10000}|X_0 = 10000) = \frac{2^{20000}(10000!)^2}{20000!} \simeq 100\sqrt{\pi} \simeq 177.2454 \text{ segons}.$$

Amb la potència de càlcul actual es pot calcular la quantitat anterior amb una gran precisió sense necessitat d'usar l'aproximació de Stirling. Usant programari numèric, el valor que s'obté és molt semblant, 177.2476 segons.

Així, si la composició de les dues urnes a l'inici és equilibrada, la recurrència pot ser observada efectivament a la pràctica.

Referències

[B] X. Bardina. *Caminant a l'atzar tots els camins porten a Roma.* Materials Matemàtics. (2008). No. 3. 29 pàgs.

[C] C. Carathéodory. *Über den Wiederkehrsatz von Poincaré.* Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Mathematisch-physikalische Klasse. (1919). 580–584.

[EE] P. Ehrenfest, T. Ehrenfest. *Über zweibekannte Einwände gegen das Boltzmannsche H-Theorem.* Physikalische Zeitschrift, Vol. 8, (1907). 311–3314. (Es pot trobar una traducció a l'anglès a P. Ehrenfest, T. Ehrenfest. *The conceptual foundations of the Statistical Approach in Mechanics*, Dover Publications, New York (1959)

[GC] R. Guzmán, J. A. Cervera. *La mecánica estadística: sus orígenes y sus paradojas a la luz de los escritos de Paul y Tatiana Ehrenfest.* LLULL (Revista de la Sociedad Española de Historia de las Ciencias y de las Técnicas), Vol. 29, (2006). 331–356.

[K] M. Kac. *Random Walk and the Theory of Brownian Motion.* The American Mathematical Monthly, Vol. 54, No. 7, Part 1, (1947), 369-391.

[N] J. R. Norris. *Markov Chains.* Cambridge Series in Styatistical and Probabilistic Mathematics. Cambridge University Press, New York, 1997.

[P] H. Poincaré. *Sur le probleme des trois corps et les equations de la dynamique.* Acta Mathematica, Vol. 13 (1890), 1–270.

Professora jubilada del
Departament de Matemàtiques de la UAB
Maria.Jolis@uab.cat

Publicat el 3 de juliol de 2024