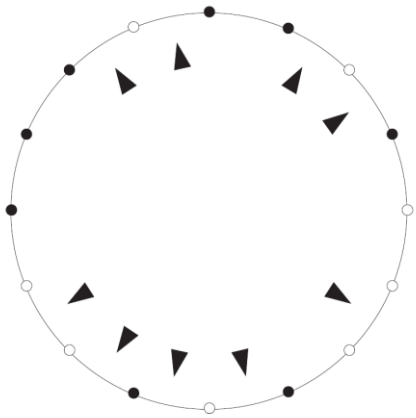
Exercice 1 : *Anneau de Kac*

Introduit par le mathématicien Marc Kac en 1956, l'anneau de Kac constitue un système statistique aux propriétés simples qui présente à la fois un fonctionnement réversible au niveau microscopique et, au niveau macroscopique, lorsque l'évolution est approchée par une hypothèse de chaos moléculaire, par un comportement apparemment irréversible. L'anneau de Kac est donc un bon exemple permettant de comprendre en quel sens il est possible par la physique statistique de répondre aux “paradoxes” de Loschmidt (comment pourrait-on démontrer le théorème H de Boltzmann, qui implique une évolution irréversible, pour un système à dynamique réversible ?) et de Zermelo (comment pourrait-on démontrer le théorème H de Boltzmann pour un système récurrent, c'est-à-dire qui repasse périodiquement par son état initial, ou aussi près que l'on veut de son état initial ?).

1. Description de l'anneau de Kac



L'anneau de Kac, dont une illustration est représentée sur la figure ci-dessus, est un système fini et cyclique, possédant *N* sites et m “marqueurs” ou “changeurs d'état”. Chaque site de l'anneau de Kac peut se trouver dans l'un ou l'autre de deux états, appelés couleurs, représentés sur la figure par un rond noir (associé à la valeur +1) ou un rond blanc (associé à la valeur -1). L'anneau de Kac représenté sur la figure possède 16 sites, dont 8 sont dans l'état blanc et 8 dans l'état noir, mais on s'intéressera principalement dans la suite au cas où le nombre N de sites est très grand. Les marqueurs, représentés par des triangles noirs, sont au nombre de 9 dans l'exemple considéré sur la figure, et sont situés chacun entre deux sites.

L'évolution temporelle d'un anneau de Kac se fait par pas de temps discrets (par opposition à un temps continu). On note *W(t)* le nombre de sites blancs au temps (discret) *t*, et *B(t)* le nombre de sites noirs (*W* pour white et *B* pour black, *N* étant déjà pris pour le nombre total de sites). Après un pas de temps unité, l'anneau tourne d'une fraction *1/N* de tour dans le sens des aiguilles d'une montre. Les marqueurs restent par contre en position fixe (ils ne tournent pas). L'évolution de chaque site se fait de la façon suivante : si un site passe devant un marqueur, son état est inversé (il passe de blanc à noir, ou de noir à blanc), c'est-à-dire que la valeur associée au site change de signe. Si le site ne passe pas au cours du pas de temps devant un marqueur, son état reste inchangé.

2. Équations d'évolution

Notons $w(t)$ le nombre de sites blancs qui vont passer devant un marqueur au coup d'horloge $(t+1)$, et $b(t)$ le nombre correspondant pour les sites noirs. Quelle relation relie les quantités $B(t)$, $B(t + 1)$, $w(t)$ et $b(t)$ ? Quelle est la relation correspondante reliant $W(t)$, $W(t+1)$, $w(t)$ et $b(t)$ ?

3. Récurrence temporelle d'un système à nombre fini d'états

Montrer qu'un système à nombre fini d'états dont l'évolution dynamique est réversible, c'est-à-dire qui repasse par ses états antérieurs si on change $t$ en $-t$ dans la loi d'évolution dynamique, doit nécessairement repasser un nombre infini de fois par tout état qu'il a déjà traversé.

4. Réversibilité temporelle de l'anneau de Kac

L'anneau de Kac a-t-il un comportement réversible dans le temps, c'est-à-dire que si on fait tourner l'anneau dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, repasse-t-il par ses états antérieurs ?

5. Récurrence de l'anneau de Kac

Dans le cas de l'anneau de Kac, montrer que le système est périodique, c'est-à -dire qu'il revient dans son état initial après un nombre fini de coups d'horloge. Donner en fonction du nombre $N$ de sites une borne supérieure à la période. La valeur que vous proposez est-elle la plus petite possible ?

6. Ergodicité de l'anneau de Kac

L'anneau de Kac est-il un système dynamique ergodique, au sens qu'il passe par tous ses états possibles ?

7. Évolution de la « couleur » moyenne de l'anneau de Kac

On s'intéresse à l'évolution de la différence $\Delta(t) = B(t)-W(t)$ au cours du temps. Pour cela, on fait l'hypothèse suivante : l'état des sites de l'anneau de Kac est complètement indépendant de l'état des marqueurs. On suppose donc que sont remplies les conditions suivantes, en notant $\mu = m/N$ la fraction de marqueurs par site :

$$\frac{\text{nombre de sites blancs juste avant un marqueur}}{\text{nombre de sites blancs}} = \frac{m}{N} \equiv \mu$$
$$\frac{\text{nombre de sites noirs juste avant un marqueur}}{\text{nombre de sites noirs}} = \frac{m}{N} \equiv \mu$$

- Étudier l'évolution au cours du temps de la « couleur » moyenne des sites *δ(t) = (B(t)−W(t))/N*, variable comprise entre −1 et 1, et montrer que *δ(t)* tend exponentiellement vers zéro.

Les questions suivantes vont montrer comment concilier cette évolution exponentielle avec le fait que la dynamique de l'anneau de Kac est réversible (c'est le paradoxe de Loschmidt), et avec le fait que le système possède un temps de récurrence fini (c'est le paradoxe de Zermelo), où la couleur de l'état initial est donc nécessairement restaurée ?

8. Moyenne sur les configurations de marqueurs

Nous allons démontrer que si l'on effectue une moyenne sur l'ensemble des configurations des marqueurs, dont on suppose fixé le nombre total *m*, la couleur *δ(t) = (B(t) − W(t))/N* est exponentiellement décroissante en fonction du temps au sens de cette moyenne, à condition que l'on se limite à des temps *t* inférieurs à *N*.
Afin de démontrer cette propriété, on désigne par $\chi_i(t)$ la couleur du site *(i)* au temps *t*, avec pour convention que $\chi_i(t) = -1$ si le site est blanc à cet instant, et $\chi_i(t) = +1$ si le site est noir. On définit également la variable marqueur $m_i$ qui prend elle aussi deux valeurs possibles selon qu'un marqueur se trouve ou non entre les sites (*i*) et (*i* + 1). Dans le premier cas, $m_i = -1$ alors que dans le second $m_i = +1$.
Dans notre ensemble d'anneaux de Kac, nous supposons que tous les anneaux ont en commun le même nombre *N* de sites et que la configuration initiale des sites à l'instant *t* = 0 est toujours la même. Ce qui différencie les anneaux de Kac dans l'ensemble statistique, c'est la disposition de l'ensemble des marqueurs, dont on fixe seulement le nombre total *m*. On pourrait également envisager de définir la probabilité *μ* qu'un marqueur soit situé entre deux sites consécutifs quelconques, mais nous exigeons pour le moment que le nombre total des marqueurs soit fixé.
a) Montrer que la relation qui relie les valeurs de $\chi_{i+1}(t)$ et $\chi_i(t)$ est : $\chi_{i+1}(t+1) = m_i\chi_i(t)$.
b) En déduire que l'on peut exprimer la couleur *δ(t)* en fonction du temps sous la forme :

$$\delta(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\chi_i(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}m_{i-1}\chi_{i-1}(t-1) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\prod_{j=1}^{t}m_{i-j}\chi_{i-t}(0)$$

c) Vérifier au moyen de cette expression qu'est bien vérifiée l'égalité : $\delta(2N) = \delta(0)$.
d) Démontrer que la moyenne sur l'ensemble des configurations des marqueurs peut s'écrire :

$$\langle\delta(t)\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\langle\prod_{j=1}^{t}m_{i-j}\right\rangle\chi_{i-t}(0) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\langle\prod_{k=1}^{t}m_k\right\rangle\chi_{i-t}(0) = \left\langle\prod_{k=1}^{t}m_k\right\rangle\delta(0)$$

e) Démontrer enfin que si *μ* est la probabilité qu'un marqueur se trouve entre deux sites consécutifs, on a la relation *approximative,* si $t$ suffisamment inférieur à $N$ :

$$\left\langle\prod_{k=1}^{t}m_k\right\rangle = \left[(1-\mu)\times(+1)+(\mu)\times(-1)\right]^t = (1-2\mu)^t$$

Discuter les deux cas : seulement *μ* fixé, et le nombre total de marqueurs fixé à $m = \mu\times N$.

Indication : calculer $\left\langle \prod_{k=1}^{t} m_k \right\rangle$ en fonction du nombre $j$ de marqueurs rencontrés sur t intervalles entre deux sites, et exprimer la probabilité de $j$ en fonction de $\mu$ et $t$ en supposant $t$ petit devant *N*.

9. Discussion

La formule ci-dessus ne constitue donc une bonne approximation que si on se situe à une distance raisonnable de $t = N$ par valeurs inférieures. En pratique, pour $t < N/2$, quand *N* est grand, on n'aura certainement aucun problème de corrélation induit par le nombre total de marqueurs.
a) Montrer que si $t > N$ la forme exponentielle n'est plus vérifiée.
b) Si on impose le nombre total de marqueurs en le fixant à $m = \mu \times N$, montrer que dès que $t = N$, la formule précédente sur la décroissance exponentielle de la couleur n'est plus valable.

10. Moyenne sur les configurations de sites

On pourrait supposer que pour une configuration de *m* marqueurs donnée, une moyenne sur les configurations des sites compatibles avec un état macroscopique donné, c'est-à-dire avec une « couleur » moyenne $\delta(t) = \left(B(t) - W(t)\right) / N$ donnée, permettrait de démontrer la décroissance exponentielle de la « couleur » en fonction du temps au sens de cette moyenne, au moins pour des intervalles de temps inférieurs à *N/2*. Montrer à l'aide de quelques contre-exemples que ce n'est pas le cas.