Projet de simulation MAP311 Lucas Gerin : gerin@cmap.polytechnique.fr

Modèle Simplifié de l'Évolution d'un Quasi-cristal

Mots-clés : Modélisation, Combinatoire, Probabilités conditionnelles,...

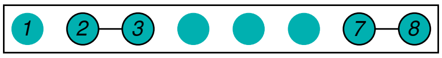
Les quasi-cristaux sont des solides qui ont des propriétés macroscopiques comparables à celles d'un cristal, mais donc la structure microscopique n'est pas périodique. Le but du projet est d'étudier dans des questions théoriques **(T)** et expérimentales **(E)** un modèle simple de formation d'un quasi-cristal en dimension 1.

1 Construction et simulation du modèle

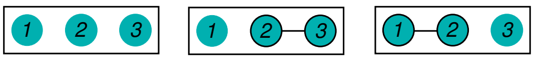
Soit $n \geq 2$, on considère une chaîne de n atomes identiques et immobiles. Dans une *configuration* de quasi-cristal de taille n, deux atomes voisins (mais pas plus) $i, i+1$ peuvent être liés ensemble et forment alors une molécule, on note alors $i \leftrightarrow i+1$.

On note $\mathcal{S}_n$ l'ensemble des configurations de taille n. Pour $\sigma \in \mathcal{S}_n$, on note $M(\sigma)$ le nombre de molécules dans la configuration σ, on a $0 \leq M(\sigma) \leq n/2$. On note $\mathrm{dens}(\sigma)$ la *densité* de la configuration σ la proportion d'atomes liés dans σ, c'est-à-dire $\mathrm{dens}(\sigma) = 2M(\sigma)/n$.

Voici un exemple d'une configuration dans $\mathcal{S}_8$ dans laquelle on a les atomes $2 \leftrightarrow 3$ et $7 \leftrightarrow 8$. On a $M(\sigma) = 2$:



On pose $s_n = \mathrm{card}(\mathcal{S}_n)$, par exemple $s_n = 3$:



1. **(T)** Démontrer que pour tout $n \geq 4$,

$$s_n = s_{n-1} + s_{n-2}.$$

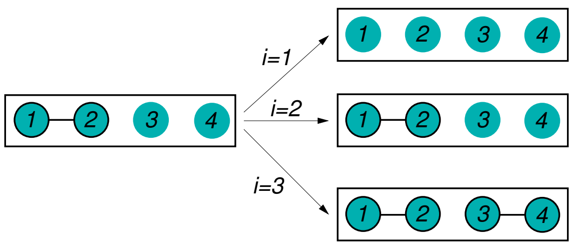
Solution: Une configuration de $\mathcal{S}_n$ se termine soit par une molécule, soit par un atome seul, on a donc une bijection
$$\mathcal{S}_n \simeq \mathcal{S}_{n-1} \cup \mathcal{S}_{n-2}.$$

On en déduit que (s_n) est une suite de Fibonacci et on a la formule (inutile de la redémontrer) $s_n = \frac{1}{\sqrt{5}}\varphi^{n+1} + \mathrm{o}(1)$, avec $\varphi = (1+\sqrt{5})/2$.

On définit maintenant le processus $(\sigma_t)_{t \in \mathbb{N}}$ à valeurs dans $\mathcal{S}_n$ défini de la façon suivante :

- σ_0 est quelconque.
- Pour tout t, connaissant σ_t, on construit σ_{t+1} de la façon suivante :
  - On tire au hasard et indépendamment du passé une paire d'atomes voisins $(i, i+1)$ uniformément parmi les $n-1$ possibilités
$$(1,2), (2,3), \ldots, (n-1, n).$$
  - Si $i \leftrightarrow i+1$ dans σ_t alors on casse le lien ; si i et $i+1$ ne sont liées à personne on crée le lien $i \leftrightarrow i+1$; dans les autres cas on ne fait rien.

Voici un exemple des 3 possibilités pour une certaine configuration de $\mathcal{S}_4$, selon la valeur de i (chacune des possibilités arrive donc avec probabilité $1/3$) :



2. **(E)** En partant de la configuration initiale dans laquelle il n'y a aucun lien, simuler le processus (σ_t) (prendre n de l'ordre de quelques dizaines). Afficher des sorties graphiques de σ à différents instants.

   Pour les sorties graphiques, on peut utiliser la commande `Matplot(X)` qui transforme une matrice `X` de nombres entiers en cases de couleurs différentes.

3. **(T)** Soient s, s' deux éléments quelconques de $\mathcal{S}_n$, déterminer $\mathbb{P}(\sigma_{t+1} = s' \mid \sigma_t = s)$ pour $s = s'$ et $s \neq s'$.

Solution: Commençons par le cas où $s \neq s'$. On peut aller de s à s' dans le cas où s et s' ne diffèrent que d'une molécule, et alors $\mathbb{P}(s \to s') = \mathbb{P}(s' \to s) = 1/(n-1)$ (il faut tirer le bon lien).
Si $s = s'$, alors on doit tomber sur un lien qui n'est ni une molécule ni deux atomes non liés. Notons $N(\sigma)$ le nombre de couples $(i, i+1)$ tels que i et $i+1$ ne sont liés à personne. On a

$$\mathbb{P}\left(\sigma^{t+1} = s \mid \sigma^t = s\right) = 1 - \frac{M(s) + N(s)}{n-1}.$$

4. **(T)** On note μ_n la mesure uniforme sur $\mathcal{S}_n$. Démontrer que la mesure μ_n est *stationnaire* : si σ_0 est tirée suivant μ_n alors σ_1 suit également la loi μ_n.

Solution:

Preuve manuelle.
Soit s' une configuration fixée dans $\mathcal{S}_n$,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(\sigma^1 = s') &= \sum_s \mathbb{P}(\sigma^{t+1} = s', \sigma^t = s) \\
&= \sum_{s \neq s'} \mathbb{P}\left(\sigma^1 = s' \mid \sigma^0 = s\right) \times \mathbb{P}(\sigma^0 = s) + \mathbb{P}\left(\sigma^1 = s' \mid \sigma^0 = s'\right) \times \mathbb{P}(\sigma^0 = s') \quad (1) \\
&= \operatorname{card}\left\{s \neq s', s \to s'\right\} \times \frac{1}{n-1}\mathbb{P}(\sigma^0 = s) + \left(1 - \frac{M(s') + N(s')}{n-1}\right)\mathbb{P}(\sigma^0 = s') \\
&= \operatorname{card}\left\{s \neq s', s \to s'\right\} \times \frac{1}{(n-1)}\frac{1}{s_n} + \left(1 - \frac{M(s') + N(s')}{n-1}\right)\frac{1}{s_n},
\end{aligned}$$

où $\{s \to s'\}$ signifie que l'on peut aller de s à s' en une étape. Il y a justement $M(s')$ configurations qui mènent à s' en ajoutant un lien, et $N(s')$ configurations qui mènent à s' en supprimant un lien.

Finalement tout se simplifie :

$$\mathbb{P}(\sigma^1 = s') = \frac{1}{s_n},$$

donc σ^1 est tirée uniformément.

Preuve alternative : réversibilité.
On a clairement pour tous s, s' (éventuellement égaux)

$$\mathbb{P}\left(\sigma^{t+1} = s' \mid \sigma^t = s\right) = \mathbb{P}\left(\sigma^{t+1} = s \mid \sigma^t = s'\right)$$

de sorte que (1) devient

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\sigma^1 = s') &= \sum_{s \neq s'} \mathbb{P}\left(\sigma^1 = s' \mid \sigma^0 = s\right) \times \mathbb{P}(\sigma^0 = s) \\ &= \frac{1}{s_n} \sum_{s \neq s'} \mathbb{P}\left(\sigma^1 = s \mid \sigma^0 = s'\right) = \frac{1}{s_n} \times 1.\end{aligned}$$

2 Densité du quasi-cristal à l'équilibre

On se place ici dans le régime stationnaire : la configuration initiale σ_0 est tirée suivant la loi uniforme μ_n. L'objectif est d'estimer $\mathbb{E}[M(\sigma_0)]$. Pour $i = 1, 2, \ldots, n-1$, on note

$$Y_i = \begin{cases} 1 & \text{si } i \leftrightarrow i+1 \text{ dans } \sigma_0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On a ainsi $M(\sigma_0) = \sum_{i=1}^{n-1} Y_i$.

5. **(T)** Calculer $\mathbb{P}(Y_i = 1)$ et en déduire que lorsque $n \to +\infty$

$$\mathbb{E}[M(\sigma_0)] \sim \frac{2}{\sqrt{5}(1+\sqrt{5})} n.$$

Solution: Comptons le nombre de configurations telles que $Y_i = 1$. Les atomes entre 1 et i peuvent être liés ou pas librement, les atomes entre $i+2$ et n également. On a donc

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(Y_i = 1) &= \frac{s_{i-1} s_{n-i-1}}{s_n} \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{(\phi^i + \varepsilon_i)(\phi^{n-i} + \varepsilon_{n-i})}{\phi^{n+1} + \varepsilon_{n+1}},\end{aligned}$$

où $\varepsilon_k \to 0$ quand $k \to +\infty$. On en déduit alors que

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[M(\sigma_0)] &= \sum_{i=1}^{n-1} \mathbb{P}(Y_i = 1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(\phi^i + \varepsilon_i)(\phi^{n-i} + \varepsilon_{n-i})}{\phi^{n+1} + \varepsilon_{n+1}} \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{5}\phi^{n+1}} \sum_{i=1}^{n-1} \left(\phi^n + \varepsilon_i \phi^{n-i} + \varepsilon_{n-i}\phi^i + \varepsilon_i \varepsilon_{n-i}\right) \sim \frac{n}{\sqrt{5}\phi}.\end{aligned}$$

3 Convergence vers l'équilibre

Nous revenons dans le cas général où σ_0 est arbitraire. Il est possible de démontrer, mais cela dépasse le cadre du cours de première année, que (σ_t) converge en loi vers la mesure uniforme μ_n. Autrement dit, on a pour toute configuration s dans $\mathcal{S}_n$

$$\mathbb{P}(\sigma_t = s) \overset{t \to +\infty}{\to} \mu_n(s) = \frac{1}{s_n}.$$

6. **(E)** Pour illustrer ce phénomène, reprendre votre simulation du processus (σ_t) à partir de la configuration initiale σ_0 qui n'a aucun lien, et tracer l'évolution de $t \mapsto \mathrm{dens}(\sigma_t)$. (Prendre n de l'ordre de quelques centaines et choisir t pour mettre en valeur la convergence.) Comparer avec le résultat théorique obtenu à la question 5.
7. **(T)-(E)** La démarche de la question précédente permet de constater uniquement la convergence de $\mathbb{E}[M(\sigma_t)]$ vers $\mathbb{E}[M(\sigma')]$, où $\sigma' \sim \mu_n$. Quelle procédure proposeriez-vous pour illustrer la convergence en loi de (σ_t) ? (Il n'est pas demandé de réellement mettre en oeuvre cette stratégie.)

Solution: Il faudrait estimer $\mathbb{P}(\sigma_t = s)$ par quelque chose de la forme suivante :

$$\frac{1}{T}\mathrm{card}\left\{t \leq T; \sigma_t = s\right\}.$$

Toutefois, la convergence de cette variable aléatoire (quand $T \to +\infty$) vers $\frac{1}{s_n}$ risque d'être vraiment très longue.