Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE DIRECT®

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006) 141–146

COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE

http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/

Probabilités

Sur un modèle markovien rudimentaire de diffusion atomique

Jean-Baptiste Gouéré

LaPCS, université Claude-Bernard Lyon I, bâtiment recherche [B], 50, avenue Tony-Garnier, domaine de Gerland, 69366 Lyon cedex 07, France

Reçu le 24 mars 2005 ; accepté le 18 octobre 2005

Disponible sur Internet le 6 décembre 2005

Présenté par Jean-Pierre Kahane

Résumé

Nous introduisons et étudions un système de particules en interaction qui évolue suivant une dynamique markovienne dont le pas élémentaire est le suivant : un point de l'espace ambiant est choisi de manière uniforme, la particule la plus proche s'y déplace. Nous nous intéressons en particulier aux propriétés d'équilibre de ce système. ***Pour citer cet article : J.-B. Gouéré, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

A rudimentary Markovian model of atomic diffusion. We introduce and study an interacting particle system. The evolution is Markovian. The elementary step of the dynamics is the following: one point is randomly chosen in the ambient space, the nearest particle moves to that point. We investigate in particular equilibrium properties of the system. ***To cite this article: J.-B. Gouéré, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).***

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

We introduce and study an interacting particle system. The evolution is Markovian. Roughly speaking, the elementary step of the dynamics is the following: one point is randomly chosen in the ambient space, the nearest particle moves to that point.

We first study the case of a finite number of particles on a circle. Let $d \geqslant 2$ be an integer. Configurations we consider are subsets of $\mathbb{R}/\mathbb{Z}$ with d elements. Let χ_0 be a random initial configuration. Let $(U_n)_{n\geqslant 1}$ be a sequence of i.i.d.r.v. uniformly distributed on $\mathbb{R}/\mathbb{Z}$. For each integer $n \geqslant 1$, the configuration at time n is obtained by moving to U_n the particle closest to U_n at time $n-1$. We prove that this Markov chain has a unique invariant distribution and that, starting from any initial configuration, the convergence toward the invariant distribution is exponential. Let χ be a configuration whose distribution is invariant under the dynamics. Let $M(\chi)$ denote the smallest distance between two particles of χ. We prove the following repulsion property between particles of χ:

$$\log\bigl(P\bigl(M(\chi) \leqslant x\bigr)\bigr) \sim -\frac{(\log(x))^2}{2\log(2)}, \quad x \to 0.$$

We then study the case of an infinite number of particles on the real line. Configurations we consider are locally finite and infinite subsets of $\mathbb{R}$. Let ξ be a Poisson point process on $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$ that admits the canonical Lebesgue

Adresse e-mail : jbgouere@univ-lyon1.fr (J.-B. Gouéré).

1631-073X/$ – see front matter © 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.
doi:10.1016/j.crma.2005.10.027

measure as intensity measure. The interpretation of ξ is the following. If (u,t) belongs to ξ, then, at time t, the particle which is the closest to u moves to u. More formally, let us consider an initial random configuration χ_0. We assume that the law of χ_0 is invariant under translations and that χ_0 is a.s. non empty. Let T be a positive real. The configuration at time T is defined as follows. For every $R>0$, let us write

$$\xi \cap [-R,R]\times[0,T] = \big\{(u_1,t_1),\ldots,(u_N,t_N)\big\}, \quad \text{with } t_1<\cdots<t_N.$$

Start with χ_0. Let i vary successively from 1 to N. At the i-th step, move to u_i the particle closest to u_i. Let us denote by $\xi_T^R\cdot\chi_0$ the random configuration obtained at the end of this process. We show that $\xi_T^R\cdot\chi_0$ converges almost surely as R tends to infinity. The configuration at time T is defined as the limit of $\xi_T^R\cdot\chi_0$. We prove that there exists a unique distribution of point process χ such that:

- the distribution of χ is invariant under translations and under the dynamics;
- the following almost sure convergence holds: $(2R)^{-1}\,\mathrm{card}(\chi\cap[-R,R])\to 1$.

1. Introduction

Les premiers quasicristaux ont été découverts en 1982 par Shechtman et al. [13]. Ce sont des solides dont la structure microscopique est presque-périodique. L'étude de la diffusion des atomes dans ces solides a été l'objet de différents travaux. En dehors des études expérimentales, il s'agit essentiellement d'études numériques (simulations moléculaires [7] ; simulations de Monte Carlo comme par exemple celles de [8] étudiant un mécanisme spécifique aux quasicristaux proposé par [9]). Cherchant un cadre simple pour étudier ce type de phénomènes, nous avons introduit le modèle rudimentaire suivant. Supposons l'existence d'une structure idéale fixée – un ensemble de sites – telle que, à chaque instant, le solide observé s'obtienne en plaçant un atome en certains de ces sites et en laissant les autres sites vacants. Au cours du temps, un atome peut quitter son site, le laissant alors vacant, et se déplacer vers un site vacant, qui devient alors occupé. Ce déplacement d'un atome peut alternativement se voir comme le déplacement d'un site vacant. Faisons l'hypothèse raisonnable que la densité des sites vacants est faible. Oublions la structure idéale sous-jacente et imaginons les atomes uniformément répartis dans l'espace. Modélisons maintenant le déplacement des sites vacants par une dynamique markovienne dont le pas élémentaire est le suivant : un atome est choisi au hasard de manière uniforme, il quitte son site et rejoint le site vacant le plus proche.

Reformulons le pas élémentaire de la dynamique en oubliant les atomes et en appelant particule un site vacant :

1. un point de migration est choisi uniformément dans l'espace ambiant ;
2. la particule qui en est la plus proche y migre.

Pour décrire la deuxième étape nous disons que le point de migration agit sur la configuration. Ce type de dynamique n'a à notre connaissance pas été étudiée. Nous introduisons et étudions un processus évoluant suivant cette dynamique dans le cas d'un nombre fini de particules sur le cercle, puis dans le cas d'un nombre infini de particules sur la droite réelle. Nous nous intéressons en particulier aux propriétés d'équilibre de ce processus.

Le processus avec migration ainsi introduit est notamment proche, par son esprit ou par les difficultés techniques rencontrées – en particulier le fait que le processus sur la droite ne satisfasse pas la propriété de Feller – de deux processus classiques que nous décrivons maintenant brièvement.

Le premier est le processus de Hammersley. Il a été introduit par Aldous et Diaconis [1], suite aux travaux de Hammersley [6], dans l'étude du problème d'Ulam. Ce problème concerne l'étude de la plus longue sous-suite croissante d'une permutation aléatoire. Le processus de Hammersley décrit l'évolution d'un système de particules sur la droite réelle soumis à une dynamique markovienne dont le pas élémentaire consiste, informellement, à choisir un point uniformément sur la droite réelle et à y déplacer la particule immédiatement à sa droite (une telle particule est créée si elle n'existe pas). Ce processus a par la suite été étudié notamment par Seppäläinen [12]. L'étude de notre système de particules fait intervenir des estimés élémentaires relatifs au problème d'Ulam, ce qui la rapproche des travaux sur le processus de Hammersley. Une difficulté et un intérêt spécifique de notre modèle résident dans le caractère non explicite des distributions stationnaires (ce sont des mélanges de processus de Poisson ponctuels dans le cas du processus de Hammersley).

Le second est le processus d'exclusion à longue portée introduit par Spitzer [14] et étudié par Liggett [10]. Dans ce processus, les particules vivent sur un réseau, dont chaque site peut accueillir au plus une particule. Chaque particule attend, indépendamment des autres, un temps exponentiel, puis décide de bouger. Elle effectue alors, infiniment rapidement, une marche aléatoire sur le réseau jusqu'à trouver un site vacant en lequel elle se pose (ou disparait si elle n'en trouve pas). Ce processus ne satisfait pas la propriété de Feller, ce qui entraine des difficultés similaires à celles rencontrées dans notre modèle. Les techniques utilisées pour pallier ces difficultés sont néanmoins très différentes des nôtres. Pour des résultats récents, concernant notamment les mesures invariantes de ce processus, nous renvoyons aux articles de Guiol [4], Andjel et Guiol [2] et à l'article de revue de Guiol [5].

2. Nombre fini de particules sur le cercle

Considérons tout d'abord un nombre fini de particules disposées sur un cercle. La dynamique est discrète dans le temps. Nous nous donnons une configuration initiale aléatoire χ_0 et une suite $(U_i)_{i\geqslant 1}$ de v.a.i.i.d. de loi uniforme sur le cercle. Pour tout entier naturel n, la configuration au temps $n+1$ s'obtient en faisant agir le point de migration U_{n+1} sur la configuration au temps n. Remarquons que le nombre de particules est invariant par cette dynamique. Cela nous permet de fixer ce nombre égal à un certain entier $d \geqslant 2$.

On peut démontrer, par exemple par des techniques de couplage, le résultat suivant :

Proposition 2.1. *La chaine possède une unique distribution invariante. Pour toute configuration initiale, la convergence vers cette loi invariante est exponentielle.*

On obtient aisément dans le cas de deux particules la description suivante de la loi invariante :

Proposition 2.2. *Soit $(U_n)_n$ une suite de v.a.i.i.d de loi uniforme sur $[0,1[$. Posons*

$$X = \sum_{k\geqslant 1} U_k/2^k.$$

Si $d=2$, la distribution invariante est la loi de la configuration aléatoire :

$$\{U_0 \ mod\ 1, U_0 + X \ mod\ 1\}.$$

En dehors de ce cas, nous n'avons pas de description satisfaisante de la loi invariante. Nous démontrons néanmoins l'existence d'une densité, ainsi que la propriété de répulsion suivante entre les particules :

Proposition 2.3. *Notons χ une configuration invariante pour la dynamique. Notons $M(\chi)$ la distance minimale entre deux particules de χ. Alors* :

$$\log\bigl(P\bigl(M(\chi)\leqslant x\bigr)\bigr) \sim -\frac{(\log(x))^2}{2\log(2)}, \quad x \to 0.$$

Nous obtenons également quelques contrôles sur les moments des distances entres particules successives. Ces contrôles nous seront utiles dans l'étude de notre modèle sur la droite.

Lemme 2.4. *Notons χ une configuration invariante pour la dynamique. Choisissons l'un des intervalles entre deux particules successives de χ de manière indépendante et uniforme. Notons X la loi de la longueur de cet intervalle et posons $A = dX$. Alors $E(A) = 1$ et $E(A^2) = (2d+1)(3d)^{-1}E(A^3)$. Par conséquent* :

$$E\bigl(A^2\bigr) \leqslant 3d/(2d+1) \quad et \quad E\bigl(A^3\bigr) \leqslant \bigl(3d/(2d+1)\bigr)^2.$$

3. Nombre infini de particules sur la droite

3.1. Modèle et résultat principal

Considérons maintenant un nombre infini de particules sur la droite réelle. Plus précisément, une configuration est un sous-ensemble infini et localement fini de $\mathbb{R}$. Nous nous intéressons en particulier à des configurations aléatoires invariantes en loi par translations – c'est-à-dire des processus ponctuels stationnaires. Cela nous amène naturellement à définir la dynamique par l'intermédiaire d'un processus de Poisson ponctuel ξ sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$ admettant pour intensité la mesure de Lebesgue canonique. Pour chaque point (u, t) de ce processus, nous interprétons t comme l'instant auquel le point de migration u agit sur la configuration. Donnons nous une configuration initiale aléatoire χ_0. Fixons $T > 0$. Nous définissons la configuration à l'instant T de la manière suivante. Pour tout $R > 0$, ordonnons les points de la restriction de ξ à $[-R, R] \times [0, T]$ suivant leur deuxième coordonnée. Nous obtenons une suite finie notée $(u_1^R, t_1^R), \ldots, (u_{n(R)}^R, t_{n(R)}^R)$. Faisons alors agir successivement les points de migration $u_1^R, \ldots, u_{n(R)}^R$ sur la configuration initiale et notons $\xi_T^R \cdot \chi_0$ la configuration obtenue. Nous démontrons que, dès que par exemple la configuration initiale χ_0 est une configuration aléatoire invariante en loi par translation et presque sûrement non vide, $\xi_T^R \cdot \chi_0$ converge presque sûrement, lorsque R tend vers l'infini, vers une configuration aléatoire que nous notons $\xi_T \cdot \chi_0$ et que nous appelons la configuration à l'instant T.

Notre résultat principal est le suivant :

Théorème 3.1. *Soit $\rho > 0$. Il existe une unique distribution de configuration aléatoire de densité presque sûre ρ qui soit invariante par translation et par la dynamique.*

Dans la suite de cette section, nous décrivons de manière informelle la preuve de l'existence d'une configuration invariante par la dynamique. L'unicité se prouve de manière classique.

3.2. Régularité

Notre preuve de l'existence d'une distribution invariante par la dynamique nécessite des propriétés de régularité de notre processus. Le fait que les particules puissent sauter sur des distances arbitrairement grandes rend l'obtention de cette régularité délicate. Cela entraine par exemple que la connaissance de la configuration initiale dans une boule arbitrairement grande centrée en l'origine ne suffit pas pour obtenir des informations sur la configuration à un instant $T > 0$ dans un compact donné. Ainsi, pour la topologie usuelle, la fonction qui à une configuration initiale donnée associe l'espérance d'une fonctionnelle continue de la configuration à un instant $T > 0$ n'est pas continue.

Nous obtenons néanmoins un résultat de régularité pour l'énoncé duquel nous avons besoin des définitions suivantes. Notons ψ l'application qui à un sous-ensemble localement fini Λ de $\mathbb{R}$ associe le premier point de Λ strictement à droite de l'origine. Une configuration aléatoire est dite intégrable si, pour tout sous-ensemble compact de $\mathbb{R}$, le nombre de particules de la configuration appartenant à ce compact est une variable aléatoire intégrable. Si χ est une configuration aléatoire invariante par translation, intégrable et presque sûrement non vide, alors m_χ désigne l'image de la mesure de Palm [3,11] de χ par l'application ψ. De manière imagée, m_χ est ainsi la loi de la distance typique entre deux particules successives de χ.

Lemme 3.2. *Soit $(\chi_n)_n$ une suite de configurations aléatoires invariantes par translation, presque sûrement non vides et intégrables. Supposons que la suite de mesures $(m_{\chi_n})_n$ est uniformément intégrable et que la suite $(E(\mathrm{card}(\chi_n \cap [0, 1])))_n$ est bornée. Supposons enfin que la suite $(\chi_n)_n$ converge en loi vers une configuration aléatoire χ. Alors la configuration aléatoire χ est invariante par translation et presque sûrement non vide. Par ailleurs, pour tout $T > 0$, $(\xi_T \cdot \chi_n)_n$ converge en loi vers $\xi_T \cdot \chi$.*

Remarque 1. Ce résultat s'étend au cas où χ est un processus ponctuel multiple. C'est dans ce cadre que nous l'utilisons.

Nous donnons dans la suite de ce paragraphe les idées de la preuve de ce résultat. Nous reprenons les notations du Lemme 3.2. Il est facile de vérifier que, pour tout $R > 0$, $\xi_T^R \cdot \chi_n$ converge en loi vers $\xi_T^R \cdot \chi$ (car seul un nombre fini de points du processus de Poisson agissent). De par la définition de $\xi_T \cdot \chi_n$, nous avons :

$$\xi_T^R \cdot \chi_n \quad \text{converge presque sûrement vers } \xi_T \cdot \chi_n \tag{1}$$

lorsque R tend vers l'infini (et un résultat analogue est vrai pour χ). La convergence en loi de $\xi_T \cdot \chi_n$ vers $\xi_T \cdot \chi$ est donc acquise si la convergence (1) est uniforme en n en un certain sens. Pour montrer cela, considérons la fonction $f : R \mapsto \xi_T^R \cdot \chi_n$ pour un entier n donné et pour une réalisation donnée. Cette fonction est constante par morceaux.

Elle ne peut changer de valeur que pour les R tels que ξ possède un point dans $\{-R, R\} \times [0, T]$. Prenons un tel R et notons (u, t) le point de $\xi \cap \{-R, R\} \times [0, T]$. Les configurations $f(R^-)$ et $f(R)$ sont obtenues en suivant les étapes suivantes :

1. On part de la configuration χ_n.
2. On fait agir les points de $\xi \cap [-R, R] \times [0, t[$ (c'est-à-dire que l'on fait agir les points de migration donnés par les premières coordonnées des points de $\xi \cap [-R, R] \times [0, t[$, dans l'ordre donné par leur seconde coordonnée).
3. On fait agir le point de migration u si on veut obtenir $f(R)$, on ne fait rien sinon.
4. On fait agir les points de $\xi \cap [-R, R] \times]t, T]$.

Pour la topologie considérée pour la convergence (1), deux configurations sont proches si elles sont proches sur une grande boule centrée en l'origine. Il s'agit donc de regarder si la différence induite par la troisième étape, qui concerne des particules situées à distance R de l'origine environ, peut, grâce à la dernière étape, se propager jusqu'aux particules appartenant à l'instant T à une boule B fixée. Nous démontrons pour cela deux résultats :

1. Les particules qui diffèrent après la troisième étape sont séparées des particules appartenant à l'instant T à la boule B par un nombre de particules de l'ordre de ρR, où ρ est la densité de χ_n.
2. La différence induite par la troisième étape ne peut se propager jusqu'à des particules distantes de plus de $\sqrt{R}$ particules.

Le premier point est élémentaire. Le deuxième est lié au fait que la longueur de la plus longue sous-suite croissante d'une permutation aléatoire de $\{1, \ldots, n\}$ est de l'ordre de $\sqrt{n}$. Ces deux faits suffisent pour établir la convergence (1). Pour obtenir l'uniformité, il faut garantir une certaine uniformité dans le premier fait (le deuxième ne dépend que du processus de Poisson, ce qui ne soulève pas de questions d'uniformité). Cette uniformité est acquise sous l'hypothèse d'uniforme intégrabilité des mesures $(m_{\chi_n})_n$ (cette hypothèse permet d'obtenir des minorations uniformes en n sur le cardinal de $\chi_n \cap [0, R]$). La convergence en loi de $\xi_T \cdot \chi_n$ vers $\xi_T \cdot \chi$ est donc acquise, ce qui conclut la preuve du lemme.

3.3. Preuve de l'existence

L'existence de la distribution invariante par la dynamique est une conséquence des résultats suivants. Notons χ_d la configuration aléatoire de période d (sur la droite) associée naturellement à la configuration invariante comportant d particules sur le cercle. Nous montrons les résultats suivants :

1. Il existe une suite d_n tendant vers l'infini telle que la suite de configurations aléatoires χ_{d_n} converge en distribution vers une configuration aléatoire que nous notons χ.
2. Pour tout $T > 0$, la suite $\xi_T \cdot \chi_{d_n}$ converge en loi vers $\xi_T \cdot \chi$.
3. La suite de configurations aléatoires χ_d est asymptotiquement invariante pour la dynamique.

Le premier point est immédiat. Les deux suivants nécessitent de contrôler la configuration à un instant T à partir de la configuration initiale. Cela nécessite notamment, comme discuté dans le paragraphe précédant, un contrôle de la taille des écarts entre particules successives des configurations χ_d, contrôle que nous déduisons du Lemme 2.4.

Références

[1] D. Aldous, P. Diaconis, Hammersley's interacting particle process and longest increasing subsequences, Probab. Theory Related Fields 103 (2) (1995) 199–213.

[2] E.D. Andjel and H. Guiol, Long range exclusion processes, generator and invariant measures, Ann. Probab. (2004), in press.

[3] F. Baccelli, P. Brémaud, Elements of Queueing Theory, second ed., Appl. Math., vol. 26, Springer-Verlag, Berlin, 2003.

[4] H. Guiol, Un résultat pour le processus d'exclusion à longue portée, Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist. 33 (4) (1997) 387–405.

[5] H. Guiol, About the long range exclusion process, Markov Process. Related Fields 10 (3) (2004) 457–476.

[6] J.M. Hammersley, A few seedlings of research, in: Proceedings of the Sixth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, vol. I: Theory of Statistics, Univ. California Berkeley, CA, 1970/1971, Univ. California Press, Berkeley, CA, 1972.

[7] S. Hocker, F. Gähler, Aluminium diffusion in decagonal quasicrystals, Phys. Rev. Lett. 93 (2004).
[8] M.V. Jaric, E.S. Sorensen, Self-diffusion in random-tiling quasicrystals, Phys. Rev. Lett. 73 (18) (1994) 2464.
[9] P. A Kalugin, A. Katz, A mechanism for self-diffusion in quasi-crystals, Europhys. Lett. 21 (1993) 921.
[10] T.M. Liggett, Long range exclusion processes, Ann. Probab. 8 (5) (1980) 861–889.
[11] J. Neveu, in: École d'Été de Probabilités de Saint-Flour, VI—1976, in: Lecture Notes in Math., vol. 598, Springer-Verlag, Berlin, 1977, pp. 249–445.
[12] T. Seppäläinen, A microscopic model for the Burgers equation and longest increasing subsequences, Electron. J. Probab. 1 (5) (1996) 51.
[13] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 1951–1953.
[14] F. Spitzer, Interaction of Markov processes, Adv. Math. 5 (1970) 246–290.