Etude de l'hyperuniformité en utilisant la fonction de structure

Diala Hawat* †, Guillaume Gautier*, Rémi Bardenet *, Raphaël Lachièze-Rey †

*Université de Lille, CNRS, Centrale Lille ; UMR 9189 – CRIStAL, F-59000 Lille, France

†Université de Paris, Map5, Paris, France

Un processus ponctuel hyperuniforme est un nuage de points aléatoires réparti très régulièrement. Cette propriété a des applications dans plusieurs domaines, mais la démontrer rigoureuseument est généralement difficile. Il est donc désirable d'avoir un test numérique de l'hyperunifomité. Nous proposons une courte revue des estimateurs de la fonction de structure, une quantité spectrale qui caractérise l'hyperuniformité et nous introduisons le premier test statistique de l'hyperunifomité asymptotiquement valide. Ces outils sont disponibles dans un paquet Python nommé `structute_factor`.

L'hyperuniformité et la fonction de structure

Soit $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$ un processus ponctuel stationnaire d'intensité ρ.

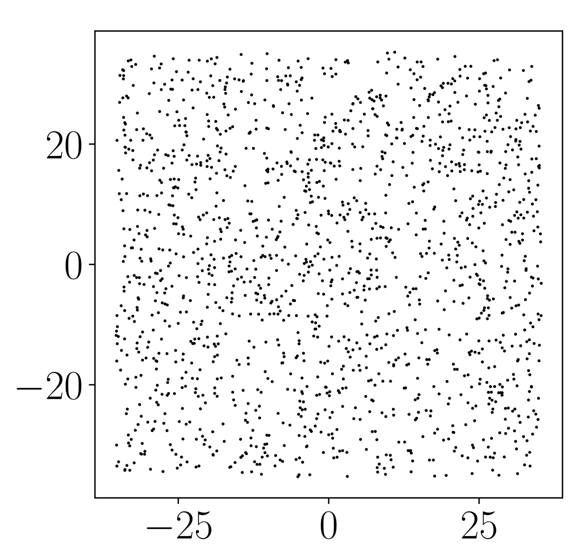
- La fonction de structure S de $\mathcal{X}$ est definie par

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \rho\mathcal{F}(g-1)(\mathbf{k}), \ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^d, \tag{1}$$

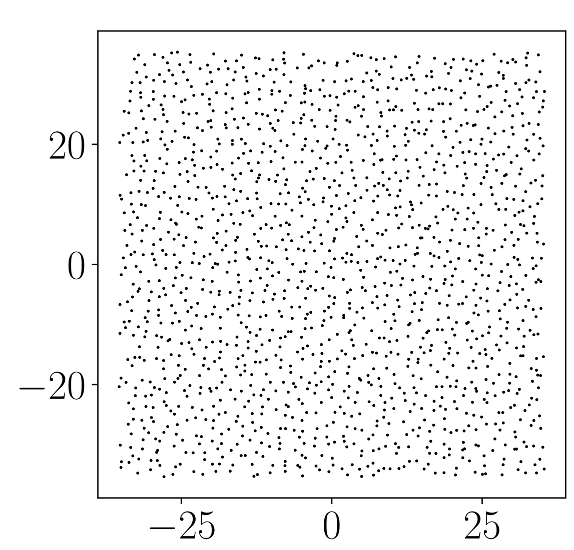
où $\mathcal{F}$ est la transformé de Fourier et g la fonction de corrélation par paire de $\mathcal{X}$.

Hyperuniformité

$$\mathcal{X} \text{ est hyperuniforme} \iff \lim_{R\to\infty} \frac{\mathbb{V}\mathrm{ar}\left[\mathrm{Card}(\mathcal{X} \cap B(0,R))\right]}{|B(0,R)|} = 0 \iff S(0) = 0$$



Processus de Poisson



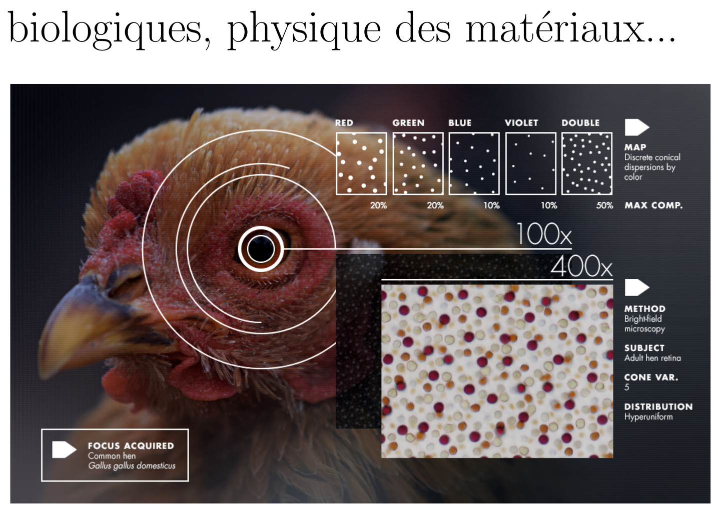
Processus de Ginibre

- **Classes d'hyperuniformité :**
Soit $\mathcal{X}$ un processus hyperuniforme t.q. $|S(\mathbf{k})| \sim c\|\mathbf{k}\|^\alpha$ au voisinage de 0.

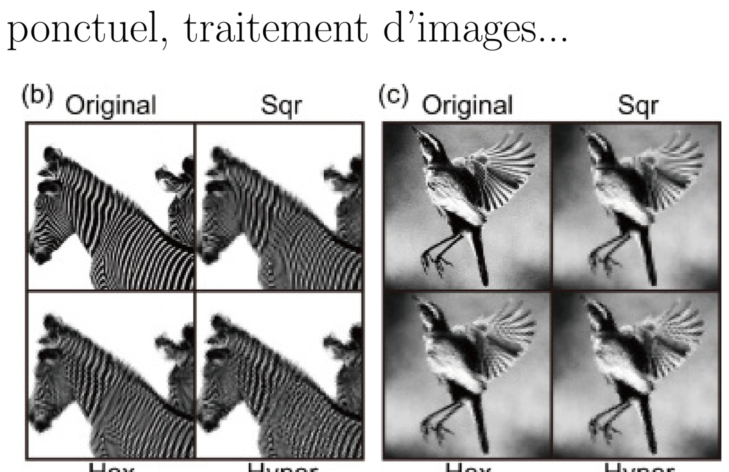
$\alpha > 1$	$\mathbb{V}\mathrm{ar}\left[\mathrm{Card}(\mathcal{X} \cap B(0,R))\right] = O(R^{d-1})$	class I
$\alpha = 1$	$\mathbb{V}\mathrm{ar}\left[\mathrm{Card}(\mathcal{X} \cap B(0,R))\right] = O(R^{d-1}\log(R))$	class II
$\alpha \in]0,1[$	$\mathbb{V}\mathrm{ar}\left[\mathrm{Card}(\mathcal{X} \cap B(0,R))\right] = O(R^{d-\alpha})$	class III

Motivations

- Structures biologiques, physique des matériaux...



- Processus ponctuel, traitement d'images...



Estimation de la fonction de structure S

- **Pour des processus stationnaires** :
Soient $W = [-L/2, L/2]^d$ et $\mathcal{X} \cap W = \{x_1, \ldots, x_N\}$.

Estimateurs pondérés (tapered)

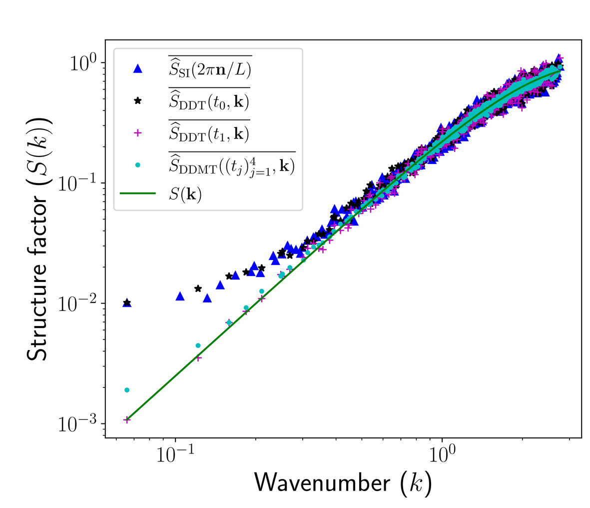
$$S(\mathbf{k}) = \lim_{L\to\infty} \mathbb{E}\Big[\underbrace{\frac{1}{\rho}\Big|\sum_{j=1}^{N} t(x_j, W) e^{-i\langle \mathbf{k}, x_j\rangle}\Big|^2}_{\widehat{S}_{\mathrm{T}}(t,\mathbf{k})}\Big] - \underbrace{\rho\,|\mathcal{F}(t)(\mathbf{k}, W)|^2}_{\epsilon_t(\mathbf{k},L)}.$$

- **Pour des processus stationnaires et isotropes** :
Soient $W = B(0,R)$, $\mathcal{X} \cap W = \{x_1, \ldots, x_N\}$ et $t(x) = \frac{\mathbb{1}_W(x)}{\sqrt{|W|}}$.

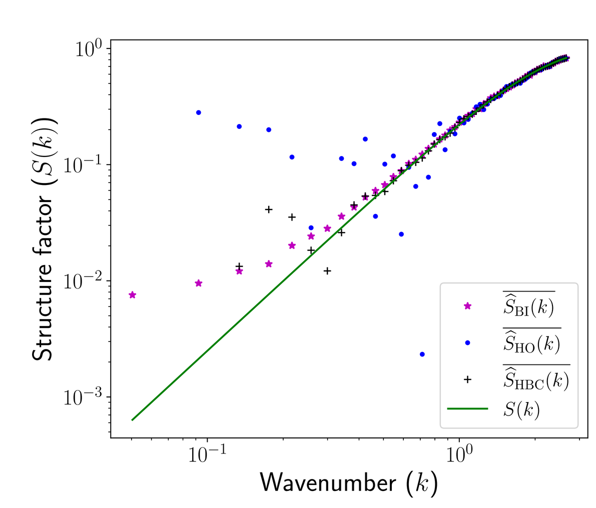
Estimateur isotrope de Bartlett

$$S(k) = \lim_{R\to\infty} \mathbb{E}\Big[\underbrace{1 + \frac{(2\pi)^{\frac{d}{2}}\rho^{-1}}{|W|\omega_{d-1}} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i\neq j}}^{N} \frac{J_{d/2-1}(k\|x_i - x_j\|)}{(k\|x_i - x_j\|)^{d/2-1}}}_{\widehat{S}_{\mathrm{BI}}(k)}\Big] - \underbrace{\rho|\mathcal{F}(t)(k)|^2}_{\epsilon_t(k,R)},$$

où $k = \|\mathbf{k}\|$, J_d est la fonction de Bessel d'ordre d et ω_{d-1} est la surface de la sphere unité de $\mathbb{R}^d$.



Estimateurs non isotropes



Estimateurs isotropes

Problèmes et pratiques courantes

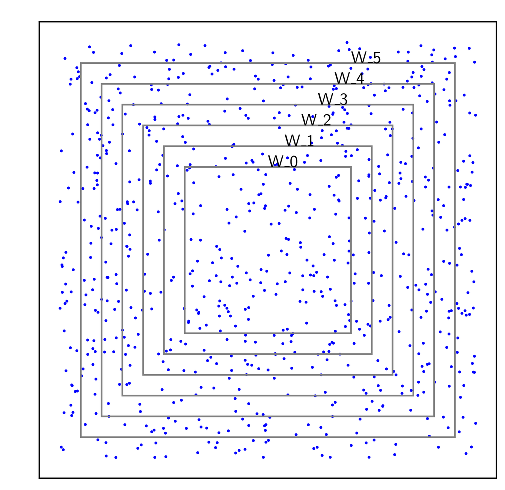
- **Problèmes** :
  1. Le biais des estimateurs est très grand au voisinage de zéro.
  2. La plus petite valeur de $\|\mathbf{k}\|$ t.q. $\widehat{S}(\|\mathbf{k}\|)$ est fiable est inversement proportionnelle au diamètre de W.
- **Pratiques courantes :**
  1. Faire une régression/extrapolation sur $\widehat{S}$ pour éstimer la valeur de $S(0)$.
  2. Etudier l'hyperunifomité effective :

$$\mathcal{X} \text{ est effectivement hyperuniforme} \iff H \triangleq \frac{\widehat{S}(0)}{\widehat{S}(k_{peak})} \leq 10^{-3},$$

où $\widehat{S}(0)$ est la valuer de l'extrapolée linéaire de $\widehat{S}$ en 0 et k_{peak} est t.q. $\widehat{S}(k_{peak})$ est la première valeur de crête dominante de $\widehat{S}$.

Estimateur multi-échelle

- $(W_m)_{m\geq 1}$ une suite croissante de fênetres t.q. $W_\infty = \mathbb{R}^d$.
- $\widehat{S}_m$ un estimateur positif de S formé avec $\mathcal{X} \cap W_m$.
- $\|\mathbf{k}_m^{\min}\|$ le plus petit nombre d'onde associé à W_m et $\widehat{S}_m$ t.q. $\mathbf{k}_m^{\min} \xrightarrow[m\to\infty]{} 0$.



- On définie l'estimateur multi-échelle Z_m par

$$Z_m = \sum_{j=1}^{m\wedge M} \frac{Y_j - Y_{j-1}}{\mathbb{P}(M \geq j)}, \quad m \geq 1,$$

où $Y_m = 1 \wedge \widehat{S}_m(\mathbf{k}_m^{\min})$, M est une variable aléatoire à valeur dans $\mathbb{N}$ t.q. $\mathbb{P}(M \geq j) > 0$ pour tout j, et $Y_0 = 0$.

Hyperuniformité via l'estimateur multi-échelle

Supposons qu'il existe $p \geq 1$ t.q. $M \in L^p$ alors, $Z \in L^p$ et $Z_m \to Z$ dans L^p. De plus,

1. Si $\mathcal{X}$ est hyperuniforme, alors $\mathbb{E}[Z] = 0$.
2. Si $\mathcal{X}$ n'est pas hyperuniforme et $\sup_m \mathbb{E}[\widehat{S}_m^2(\mathbf{k}_m^{\min})] < \infty$, alors, $\mathbb{E}[Z] \neq 0$.

Test statistique de l'hyperuniformité

Hyperuniformité via l'estimateur multi-échelle

1. Choisir M une v.a. de loi Poisson de paramètre $\lambda > 0$ (suffisamment grand).
2. Simuler $(\mathcal{X}_a, M_a)_{a=1}^A$ i.i.d. paires de réalisations de $(\mathcal{X}, M)$.
3. Trouver l'interval de confiance $CI[\mathbb{E}[Z]]$ avec un niveau de confiance ζ

$$CI[\mathbb{E}[Z]] = \left[\bar{Z}_A - z\bar{\sigma}_A A^{-1/2}, \bar{Z}_A + z\bar{\sigma}_A A^{-1/2}\right]$$

où $\mathbb{P}(-z < \mathcal{N}(0,1) < z) = \zeta$.

4. Vérifier si $0 \in CI[\mathbb{E}[Z]]$.

	$\bar{Z}_{50}$	$CI[\mathbb{E}[Z]]$	$\bar{Z}_{50}$	$CI[\mathbb{E}[Z]]$
KLY	0.003	$[-0.003, 0.009]$	0.003	$[-0.0003, 0.007]$
Ginibre	0.015	$[-0.021, 0.051]$	0.007	$[-0.003, 0.011]$
Poisson	0.832	$[0.444, 1.220]$	0.781	$[0.560, 1.001]$
Thomas	0.928	$[0.788, 1.068]$	1	$[0.999, 1]$
$\widehat{S}$	$\widehat{S}_{\mathrm{SI}}$		$\widehat{S}_{\mathrm{BI}}$	

Résultats du test multi-échelle de l'hyperuniformité

Paquet Python `structure_factor`

- Paquet Python.

```
In [1]: !pip install structure-factor
```

- Contenant tous les estimateurs et diagnostiques d'hyperuniformité ci-dessus.
- Open source disponibles sur Github et PyPI.
- Documentation et tutoriels disponibles en ligne.

Github QR-code

Preprint QR-code

Webpage QR-code

Réferences

[1] Diala Hawat, Guillaume Gautier, Rémi Bardenet et Raphaël Lachièze-Rey. "On estimating the structure factor of a point process, with applications to hyperuniformity". In : (2022). arXiv : 2203.08749.

Septembre, 2022