

Cours de Physique Mathématique

pour L3, S1

Jean-Marc Richard

3 décembre 2010

Table des matières

1	Introduction	2
2	Transformée de Laplace	2
3	Transformée de Fourier	10
4	Distributions	21
5	Applications des distributions, fonctions de Green	28
6	Équations de Sturm–Liouville	36
A	Calcul d'intégrales	50

1 Introduction

Le but de cours est double : maintenir un peu d'entraînement dans le maniement des raisonnements et des calculs mathématiques, et par les exemples choisis, fournir quelques outils pour les cours de physique et de chimie.

Ce document n'est proposé que pour permettre aux étudiants de suivre, sans craindre de rater la saisie écrite d'informations cruciales. Il ne saurait, bien-sûr, rivaliser avec un livre de méthodes mathématiques pour la physique, fruit d'un enseignement de plusieurs années, amendé par les remarques des collègues, les questions de étudiants et les conseils d'un éditeur. Nous pouvons recommander [3, 6], entre beaucoup d'autres.

Je remercie particulièrement mes collègues Karim Bennaceur et Xavier Riedinger pour avoir signalé des coquilles et maladroresses dans les versions antérieures de ce document.

2 Transformée de Laplace

2.1 Motivation

Prenons le cas d'une fonction du temps, $f(t)$, définie pour $t \geq 0$, et analysons sa dépendance par rapport à t par sa valeur cumulée entre $t = 0$ et $t \rightarrow \infty$, pondérée avec la fonction $\exp(-pt)$. Le résultat dépendra donc de p . L'exemple ci-dessous part d'une fonction nulle de $t = 0$ à $t = 1$, puis valant 1 jusqu'à la fin. C'est la fonction "pas", dénotée $\Theta(t - 1)$ plus loin. Voir Fig. 1. Les valeurs de p petites donneront de l'importance à la région où $f = 1$, tandis que p grand privilégiera les valeurs $f = 0$. Le résultat (à droite),

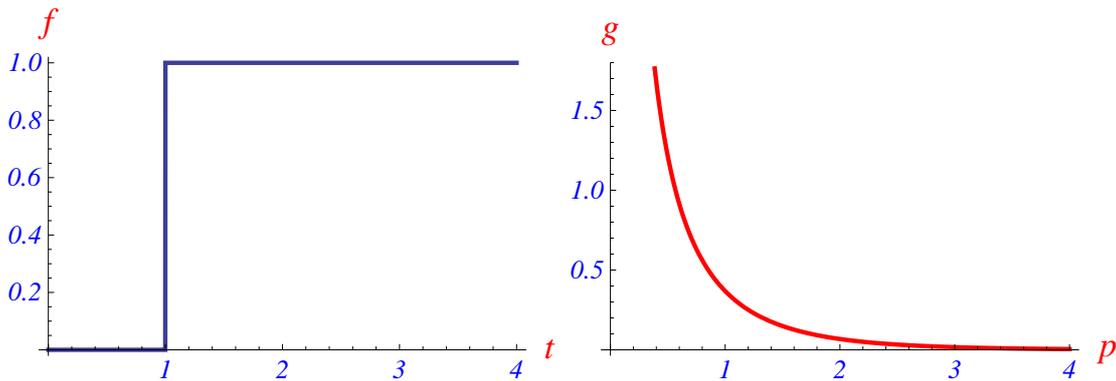


FIGURE 1 – Fonction pas (gauche) et sa transformée de Laplace (droite)

qui correspond exactement à la fonction $\exp(p)/p$. Noter que nous n'avons pas pris une moyenne pondérée par la fonction poids $\exp(-pt)$, ce qui nous aurait amené à introduire un facteur de normalisation p .

L'un des intérêts de la transformation de Laplace (TL) est de remplacer des variations brusques par des variations plus régulières, dont le maniement demande moins de précautions.

2.2 Définition

Soit $f(t)$ une fonction définie pour $t \geq 0$. Sa transformée de Laplace (TL) est

$$g(p) = \int_0^{+\infty} f(t) \exp(-pt) dt, \quad (2.1)$$

ce qui suppose la convergence de l'intégrale aux deux bouts. Mais l'expression obtenue pour p grand et positif, ce qui facilite cette convergence quand $t \rightarrow \infty$, peut souvent être prolongée pour d'autres valeurs de p réelles ou complexes. Pour la borne inférieure, par anticipation d'un chapitre ultérieur, on peut considérer que l'intervalle est en fait $[-\epsilon, +\infty[$, avec $\epsilon > 0$, dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$, pour pouvoir inclure un "pic delta" à $t = 0$.

TABLE 1 – Quelques transformées de Laplace de $\theta(t) f(t)$ en $g(s)$. On note aussi $g = \mathcal{L}(f)$.

$f(t)$ pour $t \geq 0$	$\mathcal{L}(\Theta f)$
1	$\frac{1}{s}$
e^{at}	$\frac{1}{s-a}$
t^n	$\frac{n!}{s^{n+1}}$ ($n = 0, 1, \dots$)
$\sin at$	$\frac{a}{s^2 + a^2}$
$\cos at$	$\frac{s}{s^2 + a^2}$
$\sinh at$	$\frac{a}{s^2 - a^2}$
$\cosh at$	$\frac{s}{s^2 - a^2}$
$\Theta(t-a)$	$\frac{e^{-as}}{s}$
$\delta(t-a)$	e^{-as}
$f'(t)$	$s g(s) - f(0)$
$f''(t)$	$s^2 g(s) - s f(0) - f'(0)$
$\int_0^t f(u) du$	$g(s)/s$

2.3 Exemples

La table 1, non exhaustive, donne quelques TL.

2.4 Quelques propriétés

Linéarité Si g_i est la TL de f_i et si les coefficients a_i sont constants, alors $a_1 g_1 + \dots + a_n g_n + \dots$ est la TL de la même combinaison des f_i

Changement d'échelle $g(p/a)/a$ est la TL de $f(at)$.

Multiplication par $\exp(-\alpha t)$ La TL devient $g(p + \alpha)$.

Multiplication par t^n En dérivant la définition par rapport à p , ce qui est permis si on a une convergence uniforme, on montre que la TL de $(-t)^n f(t)$ est la dérivée $g^{(n)}(p)$.

Transformée des dérivées Ce résultat est essentiel pour l'application aux équations différentielles. En intégrant par parties,

$$\int_0^{+\infty} f'(t) \exp(-pt) dt = p g(p) - f(0) \quad (2.2)$$

et plus généralement

$$\int_0^{+\infty} f^{(n)}(t) \exp(-pt) dt = p^n g(p) - p^{n-1} f(0) - p^{n-2} f'(0) - \dots - f^{(n-1)}(0). \quad (2.3)$$

Transformée d'une primitive Inversement, si $F(t)$ est la primitive de $f(t)$ qui s'annule en $t = 0$, sa TL est $G(p) = g(p)/p$.

Convolution Considérons le produit de convolution (commutatif, linéaire par rapport à chaque argument)

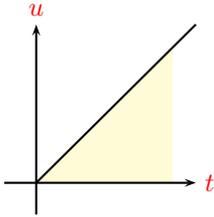


FIGURE 2 – Domaine d'intégration pour la transformée de Laplace d'une convolution

$$f(t) = (f_1 * f_2)(t) = \int_0^t f_1(u) f_2(t-u) du . \quad (2.4)$$

La TL est

$$g(p) = \int_0^{+\infty} \exp(-pt) dt \int_0^t f_1(u) f_2(t-u) du = \int_0^{+\infty} f_1(u) \exp(-pu) du \int_u^{+\infty} f_2(t-u) \exp[-p(t-u)] dt ,$$

où le balayage de la zone a été réorganisé. Un changement de variable $t-u \rightarrow x$ donne le résultat

$$g(p) = g_1(p) g_2(p) . \quad (2.5)$$

Valeurs limites On vérifiera sur quelques exemples et essaiera de justifier de façon plus générale les limites

$$f(0^+) = \lim_{p \rightarrow \infty} p g(p) , \quad (2.6)$$

et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{p \rightarrow 0} p g(p) , \quad (2.7)$$

2.5 Transformée inverse

Pour calculer la transformée de Fourier inverse (TLI), il existe une formule qui consiste à intégrer dans un parcours du plan complexe

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(pt) g(p) dp . \quad (2.8)$$

On pourra la démontrer plus tard en utilisant la relation formelle entre transformées de Laplace et de Fourier. Le résultat est indépendant du réel c qui doit être, dans le plan complexe, à droite de toutes les singularités de $g(p)$.

Le plus simple est de lire à l'envers la table 1 et ses versions plus complètes, en utilisant la linéarité. Pour les calculs courants, avec des exponentielles et des fonctions trigonométriques, comme dans l'exemple ci-dessous, on aura besoin d'un peu de dextérité dans la décomposition en éléments simples des fractions rationnelles.

Par exemple, quelle est la TLI de $g(p) = 1/(p^2 + p + 1)$? Le résultat devrait être réel, mais il peut s'avérer plus simple d'utiliser des complexes. On part de la décomposition

$$g(p) = \frac{1}{p^2 + p + 1} = \frac{1}{i\sqrt{3}} \left[\frac{1}{p-j} - \frac{1}{p-j^2} \right] , \quad (2.9)$$

pour obtenir

$$f(t) = \frac{1}{i\sqrt{3}} [\exp(jt) - \exp(j^2t)] = \frac{2}{\sqrt{3}} \exp(-t/2) \sin(\sqrt{3}t/2) . \quad (2.10)$$

Pour rester dans le domaine réel, une variante consiste à réécrire la fonction comme

$$g(p) = \frac{1}{(p+1/2)^2 + 3/4} \quad (2.11)$$

La TLI de $1/(p^2 + 3/4)$ est $(2/\sqrt{3}) \sin(\sqrt{3}t/2)$. On a vu que la transformation $p \rightarrow p+a$ correspond à un facteur $\exp(-at)$. Avec $a = 1/2$, on retrouve bien le résultat (2.11).

2.6 Application aux oscillateurs linéaires

Pour un oscillateur libre, non amorti, l'équation du mouvement par rapport à la position d'équilibre est

$$\ddot{x}(t) + a^2 x(t) = 0, \quad (2.12)$$

où a^2 est le rapport de la raideur à la masse. Si on cherche la TL $y(p)$ et utilise la linéarité et les résultats sur les dérivées, on obtient

$$y(p) = \frac{px_0 + \dot{x}_0}{p^2 + a^2}, \quad (2.13)$$

et en lisant à l'envers la table 1 on retrouve le résultat classique

$$x(t) = x_0 \cos(at) + (\dot{x}_0/a) \sin(at). \quad (2.14)$$

Pour un oscillateur amorti, l'équation devient ($b > 0$ est la moitié du coefficient de frottement divisé par la masse)

$$\ddot{x}(t) + 2b\dot{x}(t) + a^2 x(t) = 0. \quad (2.15)$$

L'équation caractéristique ne s'impose pas (mais elle a la vie dure dans les manuels de L1 ou équivalent), car il suffit de réécrire

$$u(t) = \exp(bt) x(t), \quad \ddot{u}(t) + (a^2 - b^2)u(t) = 0, \quad (2.16)$$

et de discuter la solution selon le signe de $a^2 - b^2$.

La TL est

$$y(p) = \frac{(p + 2b)x_0 + \dot{x}_0}{p^2 + 2bp + a^2}, \quad (2.17)$$

où l'on retrouve l'équation caractéristique quand il s'agit de décomposer en éléments simples. Mais on peut simplement réécrire

$$y(p) = \frac{(p + b)x_0 + bx_0 + \dot{x}_0}{(p + b)^2 + a^2 - b^2}, \quad (2.18)$$

Supposons l'amortissement fort, soit $b^2 > a^2$. La translation $p \rightarrow p + b$ donne un facteur exponentiel. Pour le reste, il suffit de lire la table à l'envers pour déduire

$$x(t) = \exp(-bt) \left[\dot{x}_0 \cosh(\sqrt{b^2 - a^2}t) + (bx_0 + \dot{x}_0) \sinh(\sqrt{b^2 - a^2}t) / \sqrt{b^2 - a^2} \right]. \quad (2.19)$$

et, bien-sûr, une expression analogue si $a^2 > b^2$.

Considérons enfin la présence d'une excitation sinusoïdale extérieure, soit une équation

$$\ddot{x}(t) + 2b\dot{x}(t) + a^2 x(t) = g \cos(ct). \quad (2.20)$$

La TL est maintenant donnée par

$$(p^2 + 2bp + a^2)y(p) = (p + 2b)x_0 + \dot{x}_0 + \frac{g}{p^2 + c^2}. \quad (2.21)$$

La décomposition en éléments simples fait apparaître des termes en $1/(p^2 + 2bp + a^2)$, qui contiennent x_0 et \dot{x}_0 et sont donc responsables du régime transitoire dépendant des conditions initiales. Il y a aussi dans $y(o)$ des termes en $p/(p^2 + c^2)$ et en $c/(p^2 + c^2)$ dont les coefficients sont indépendants de x_0 et \dot{x}_0 , et décrivent un régime stationnaire indépendant des conditions initiales, avec pour $x(t)$ une combinaison de $\cos(ct)$ et $\sin(ct)$ qui permettent de retrouver les résultats classiques sur l'amplitude et la phase du régime permanent, le phénomène de résonance, etc.

2.7 Courbe tautochrone

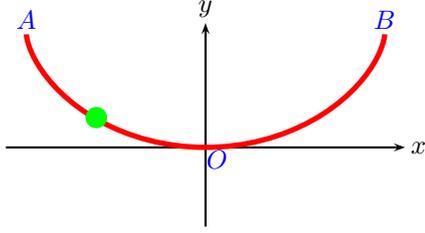


FIGURE 3 – Trajectoire dans un champ de gravitation uniforme

C'est un problème classique, qui a une importance historique. On pourra consulter le problème voisin de la "brachistochrone". Imaginons une bague ponctuelle qui coulisse sans frottement le long d'un fil de fer AOB , ou bien un petit palet qui évolue sans frottement le long de la glissière AOB . Pour une pente douce, la période croît avec l'amplitude. Pour un profil très raide comme $y \propto x^4$, la période paradoxalement *diminue* quand l'amplitude augmente, car le handicap dû à l'augmentation du trajet est plus que compensé par la vitesse acquise pour aborder la partie plane près du point O . La question est de déterminer quel profil donne une période strictement indépendante de l'amplitude, dans un champ de gravitation constant.

Soit s l'abscisse curviligne. le bilan d'énergie est

$$ms^2/2 + mgy = mgy_0 . \quad (2.22)$$

Une solution empirique consiste à remarquer que si $mgy = ks^2/2$, on obtient

$$ms^2 + ks^2 = ks_0^2 . \quad (2.23)$$

formellement identique à la conservation de l'énergie pour un oscillateur linéaire, à part la signification géométrique de la variable s . On obtient une solution $s(t) = s_0 \cos(\omega t + \phi)$, avec une pulsation constante $\omega = \sqrt{k/m}$.

Il reste à résoudre l'équation $s^2 = (2mg/k)y \equiv 4ay$ reliant l'abscisse curviligne à l'ordonnée y . On a $dy/ds = s/(2a)$, et donc

$$\frac{dx}{ds} = \sqrt{1 - \frac{s^2}{4a^2}} , \quad (2.24)$$

soit, si on pose $s = 2a \sin(\alpha)$,

$$\frac{dx}{d\alpha} = 4a \cos^2 \alpha = 2a [1 + \cos(2\alpha)] , \quad (2.25)$$

et finalement

$$x = a [\alpha + \sin(2\alpha)/2] \quad y = a \sin^2 \alpha , \quad (2.26)$$

c'est-à-dire une *cycloïde*.

Maintenant si on doute que $y \propto s^2$ soit la seule solution, on peut repartir de l'équation de départ (2.22) pour calculer le temps pour aller de O à B , soit un quart de la période T , qui dépend *a priori* de l'amplitude verticale y_0 .

$$\frac{T(y_0)}{4} = \int_0^{y_0} \frac{ds}{\sqrt{2g(y_0 - y)}} . \quad (2.27)$$

Posons $ds = f(y) dy$, où la fonction inconnue f caractérise la courbe. La période devient

$$T(y_0) = \int_0^{y_0} \frac{f(y) dy}{\sqrt{2g(y_0 - y)}} . \quad (2.28)$$

En utilisant le théorème sur la TL des convolutions et le fait que la TL de $y^{-1/2}$ est $\sqrt{\pi/p}$, on obtient la TL de $T(y_0)$

$$\tilde{T}(p) = \frac{2\sqrt{2\pi}}{\sqrt{g}} \frac{\tilde{f}(p)}{\sqrt{p}} . \quad (2.29)$$

Donc si $T(y_0)$ est une constante T_0 , de TL T_0/p , la TL $\tilde{f}(p)$ de $f(y)$ doit être

$$\tilde{f}(p) = \frac{T_0\sqrt{g}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{p}} , \quad (2.30)$$

et donc par inversion

$$f(y) = \frac{T_0 \sqrt{g}}{2\pi \sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{y}}, \quad (2.31)$$

et par intégration, $s \propto \sqrt{y}$. On retrouve la cycloïde comme solution unique.

2.8 Équation de la chaleur

La propagation de la chaleur a suscité beaucoup de travaux historiques sur les équations aux dérivées partielles. Elle résulte d'un bilan local d'énergie et de la loi de Newton et Fourier, qui stipule que le flux de chaleur est proportionnel au gradient de la température. Dans le cas unidimensionnel, elle s'écrit

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (2.32)$$

où a est le rapport de la conductibilité thermique à la capacité calorifique par unité de volume, et $u(x, t)$ l'excès de température par rapport à un point de référence. C'est une équation linéaire, ce qui permet de superposer des solutions particulières pour s'adapter à des conditions limites.

Les cas les plus faciles sont :

Passage à travers un mur Pour une pièce chauffée et protégée du froid par un mur homogène d'épaisseur b , on obtient comme régime stationnaire

$$u(x, t) = \begin{cases} u_0 & \text{pour } x \leq 0, \\ u_0(1 - x/b) & \text{pour } 0 < x < b, \\ 0 & \text{pour } x \geq b. \end{cases} \quad (2.33)$$

Variations diurnes La valeur moyenne de la température est $u = 0$ dans le demi-espace $x > 0$. Au niveau du sol, $x = 0$, une variation sinusoïdale est imposée, qui simule l'effet du jour et de la nuit. On cherche comment ces modulations se propagent et s'amortissent dans le sol supposé homogène, et reproduire ainsi la fraîcheur des grottes en été, leur tiédeur en hiver, et le rôle des bonnes caves pour protéger les grands crus. On doit donc résoudre (2.32) avec $u(\infty, t) = 0$ et $u(0, t) = u_0 \cos(\omega t)$.

Le régime transitoire est délicat, mais le régime permanent peut s'obtenir en cherchant une solution complexe (dont la partie réelle est la solution physique)

$$\underline{u}(x, t) = u_0 \exp(i\omega t + kx), \quad (2.34)$$

où k est complexe, pour décrire simultanément le changement d'amplitude par sa partie réelle et la propagation par la partie imaginaire. En reportant, on trouve l'équation $ak^2 = i\omega$. Seule la solution $k = -\sqrt{\omega/a}(1+i)/\sqrt{2}$ donne un amortissement et une propagation causale. Au total,

$$u(x, t) = u_0 \cos(\omega t - x\sqrt{\omega/(2a)}) \exp(-x\sqrt{\omega/(2a)}). \quad (2.35)$$

Le fait le plus marquant par rapport aux ondes mécaniques ou électromagnétiques, outre l'amortissement, est que la vitesse de propagation dépend de la pulsation. Si par exemple, on superpose dans un modèle des variations diurnes et annuelles, avec un maximum commun le 31 juillet à 14 heures au niveau du sol, les deux effets ne sont plus synchronisés en profondeur. Et, bien-sûr, les variations saisonnières sont moins amorties.

Choc thermique La réponse d'une barre infinie à un échelon de température peut se traiter par des considérations dimensionnelles : on cherche une fonction de x/\sqrt{at} et on transforme (2.32) en une équation différentielle pour cette fonction. Pour une barre infinie, en effet, la seule quantité dont on dispose est la constante a de dimension L^2/T , qui peut se comparer à x^2/t . Une autre justification du choix d'une fonction de x/\sqrt{at} est l'allure intuitive des solutions (Fig. 4)

Mais cette méthode ne peut se généraliser à des situations plus difficiles, par exemple une barre finie. Nous allons exposer une méthode basée sur la transformation de Laplace.

Soit $u(0, t) = u_0 \Theta(t)$ la température imposée à une extrémité. Pour la TL par rapport à t , cela correspond à $U(0, p) = u_0/p$. Pour $x > 0$ cette TL satisfait à l'équation différentielle $pU(x, p) = a \partial^2 U(x, p)/\partial x^2$. Comme la température décroît quand $x \rightarrow \infty$, la solution est

$$U(x, p) = \frac{u_0}{p} \exp(-x\sqrt{p/a}), \quad (2.36)$$

et donc par TLI (voir appendice A pour une démonstration possible)

$$u(x, t) = \Theta(t) u_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right). \quad (2.37)$$

On rappelle la définition de la fonction erreur et la fonction complémentaire, très utiles en statistique :

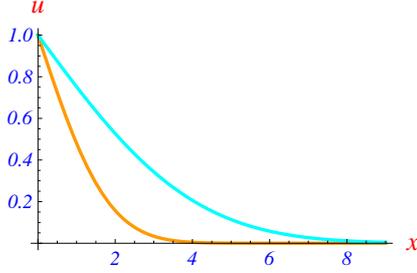


FIGURE 4 – Réponse en température à un choc thermique (ici $u_0 = 1$), en unités où $a = 1$. À deux instants différents, ici $t = 1$ et $t = 5$, les solutions sont déduites par affinité d'axe vertical.

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\zeta^2} d\zeta, \quad \operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-\zeta^2} d\zeta. \quad (2.38)$$

Comme application, on peut étudier la réponse à un créneau $u_0 [\Theta(t) - \Theta(t - t_0)]$ (voir Fig. 5, haut à gauche). La solution est

$$u(x, t) = u_0 \left[\Theta(t) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) - \Theta(t - t_0) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a(t - t_0)}} \right) \right]. \quad (2.39)$$

La figure 5 en haut à droite montre la réponse en fonction de x à des instants successifs. On voit que quand la température s'abaisse en $x = 0$, elle continue de monter en d'autres points. La figure en bas à gauche montre la température en un point proche de $x = 0$ en fonction du temps. Le pic est plus arrondi en profondeur (en bas à droite). On peut se convaincre facilement qu'un pic de pollution dans une canalisation est régi par les mêmes équations, la loi de Fick étant formellement identique à la loi de Fourier.

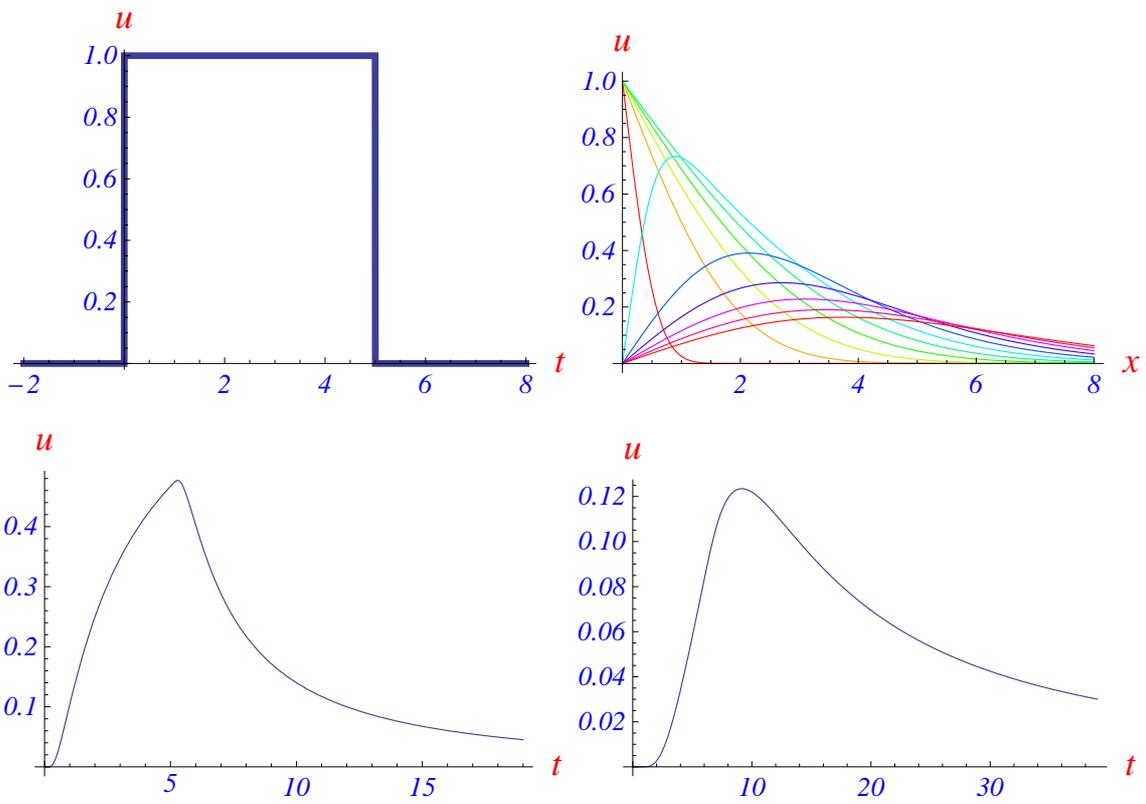


FIGURE 5 – Réponse en température à un échelon (ici $u_0 = 1$ et $t_0 = 5$), en unités où $a = 1$.

3 Transformée de Fourier

3.1 Introduction

La décomposition de Fourier est importante pour le traitement du signal, la résolution des équations différentielles, et en mécanique quantique, pour le passage de la représentation de position à la représentation d'impulsion, pour ne mentionner que quelques unes des très nombreuses applications.

Il faut distinguer plusieurs notions : séries de Fourier et ses nombreuses variantes, transformée de Fourier d'une suite de points et enfin transformée de Fourier d'une fonction. Nous allons d'abord revoir les notions les plus simples.

3.2 Transformée de Fourier discrète

Si $\{x_n\}$ est une suite de N nombres, réels ou complexes, avec $n = 0, \dots, N - 1$, la TFD transforme cette suite en la suite $\{\tilde{x}_k\}$, donnée par

$$\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} x_n \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad k = 0, \dots, N - 1, \quad (3.1)$$

et la transformée inverse est donnée par

$$x_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k \exp\left(\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad n = 0, \dots, N - 1. \quad (3.2)$$

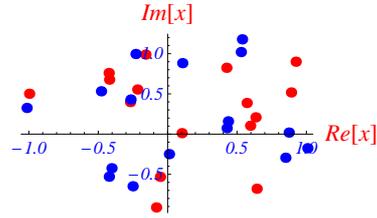


FIGURE 6 – Images (bleu) par transformée discrète de 36 points (rouge) choisis par tirage au sort dans le carré unité du plan complexe

Cette transformation possède beaucoup de propriétés intéressantes qui anticipent celles des séries de Fourier et de la transformée de Fourier. En particulier, grâce à la propriété d'orthogonalité des coefficients

$$\sum_{n=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} kn\right) \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} k'n\right) = N \delta_{kk'}, \quad (3.3)$$

on démontre facilement les identités de Plancherel et Parseval

$$\sum_{n=0}^{N-1} x_n y_n^* = \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k \tilde{y}_k^*, \quad \sum_{n=0}^{N-1} |x_n|^2 = \sum_{k=0}^{N-1} |\tilde{x}_k|^2. \quad (3.4)$$

Un exemple est donné sur la Fig. 6.

Une variante est la transformée de Fourier discrète *centrée*

$$\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^N x_n \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad k = -N, \dots, N, \quad (3.5)$$

dont on devine facilement l'inverse, et qui satisfait les mêmes théorèmes de Parseval et Plancherel,

$$\sum_{n=-N}^N x_n y_n^* = \sum_{k=-N}^N \tilde{x}_k \tilde{y}_k^*, \quad \sum_{n=-N}^N |x_n|^2 = \sum_{k=-N}^N |\tilde{x}_k|^2. \quad (3.6)$$

3.3 Série de Fourier en sinus

Imaginons une fonction impaire périodique, de période T , qui s'annule donc en $t = 0, T/2, T, \dots$. Il est d'usage d'analyser son contenu par une sinusoïde de pulsation fondamentale ω , complétée par des harmoniques de fréquence $n\omega$, où n est entier.

$$f(t) = \sum_n b_n \sin(n\omega t). \quad (3.7)$$

En utilisant la relation d'orthogonalité ($T = 2\pi/\omega$)

$$\int_{-T/2}^{+T/2} \sin(n\omega t) \sin(m\omega t) dt = \delta_{nm} \pi/\omega = \delta_{nm} T/2 . \quad (3.8)$$

on obtient

$$b_n = \frac{\omega}{\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt = \frac{4}{T} \int_0^{+T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt . \quad (3.9)$$

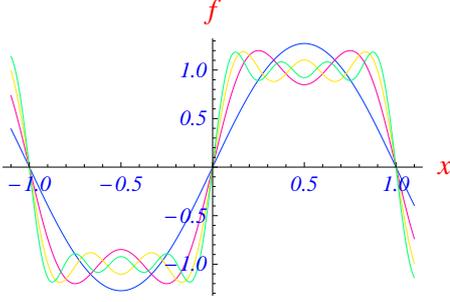


FIGURE 7 – Approximation d'un créneau par séries de Fourier avec un nombre croissant de termes

comme une approximation d'une fonction $f(t)$. Soit $x_i = iT/(2(N+1))$ les abscisses de N points régulièrement espacés entre 0 et $T/2$, en excluant les extrémités. Les valeurs de (3.10) en ces points sont

$$f_i = f^{(N)}(x_i) = \sum_{n=1}^N b_n \sin\left(\frac{ni}{N+1}\right) , \quad (3.11)$$

et la matrice symétrique qui fait passer des b_n aux f_i est, à un facteur près, orthogonale, c'est à dire sa propre inverse. On vérifie en effet que

$$b_n = \frac{2}{N+1} \sum_{i=1}^N f_i \sin\left(\frac{ni}{N+1}\right) , \quad (3.12)$$

Pour une série finie, on a donc $\sum |b_i|^2 = (2/(N+1)) \sum |f_i|^2$. Mais $(\sum |f_i|^2)/N$, si N augmente, converge vers l'intégrale de $|f(x)|^2$ entre 0 et $T/2$, à un facteur $2/T$ près. Donc

$$\int_0^{T/2} |f(x)|^2 dx = \frac{4}{T} \sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2 . \quad (3.13)$$

et pour deux séries différentes, l'une à coefficients b_i décrivant $f(x)$ et l'autre à coefficients c_i pour $g(x)$, on a

$$\int_0^{T/2} g^*(x) f(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n b_n . \quad (3.14)$$

3.4 Autres séries de Fourier

Pour une fonction paire périodique, de pulsation ω , on définit de même

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_n a_n \cos(n\omega t) , \quad (3.15)$$

où le coefficient du premier terme est ajusté de manière à ce que la formule de projection

$$a_n = \frac{\omega}{\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(n\omega t) dt , \quad (3.16)$$

soit valable aussi pour $n = 0$.

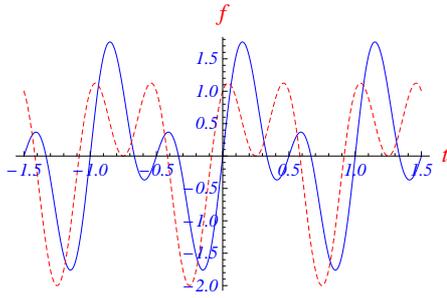


FIGURE 8 – Superposition d’un fondamental et d’une harmonique, en phase ou décalée.

mission des signaux, que la vitesse soit indépendante de la pulsation.

Une variante utile est de décomposer en exponentielles $\exp(in\omega t)$ avec des valeurs positives ou négatives de n , soit,

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n \exp(in\omega t), \quad d_n = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \exp(-in\omega t) dt, \quad (3.18)$$

avec $d_{-n} = d_n^*$ si $f(t)$ est à valeurs réelles pour t réel.

L’égalité de Parseval indique que la moyenne du carré du module de la fonction est donnée par la somme des carrés des coefficients, soit

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} |d_n(f)|^2 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt = \frac{1}{T} \int_0^T |f(t)|^2 dt = \|f\|^2. \quad (3.19)$$

Nous renvoyons aux ouvrages spécialisés pour les questions de rigueur passées sous silence dans ces rappels sur les séries de Fourier. Citons par exemple :

- Montrer que coefficients a_n (ou b_n ou c_n ou d_n) tendent vers 0 quand $n \rightarrow \infty$,
- Quelles sont les conditions d’existence des intégrales de projection donnant les coefficients ?
- Lien entre la convergence de la série de Parseval et l’existence de l’intégrale de $|f(t)|^2$ sur une période,
- etc.

3.5 Exemple d’application des séries de Fourier

Considérons un oscillateur à une dimension avec une force de rappel non linéaire telle que $f(x)/m = -Ax - Bx^3$, avec $A > 0, B > 0$. Noter cependant que des valeurs $B < 0$ permettrait des oscillations dans un domaine limité d’amplitudes. La loi de Newton donne donc

$$\ddot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t)^3 = 0. \quad (3.20)$$

Pour x petit, le dernier terme est négligeable, et on a des oscillations de pulsation \sqrt{A} . On cherche quelle est la modification de pulsation et de loi horaire quand l’amplitude augmente. Nous nous limiterons à la première correction, mais la méthode est généralisable pour obtenir un développement systématique.

Le mouvement est clairement périodique, car la particule est retenue par une force de plus en grande quand elle s’éloigne. Il y a aussi une parfaite symétrie gauche–droite. En choisissant l’origine des temps au passage en $x = 0$, on peut donc chercher la solution sous la forme

$$x(t) = b_1 \sin(\omega t) + b_2 \sin(2\omega t) + b_3 \sin(3\omega t) \dots \quad (3.21)$$

En utilisant l’identité

$$\sin^3(\alpha) = \frac{3 \sin(\alpha) - \sin(3\alpha)}{4}, \quad (3.22)$$

Pour une fonction périodique ni paire ni impaire, on combine les deux développements, soit

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_n [a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)] \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_n c_n \cos(n\omega t + \varphi_n), \end{aligned} \quad (3.17)$$

avec les mêmes formules de projection que précédemment pour les a_n et les b_n .

Un exemple est donné sur la Fig. 8, avec un fondamental et une harmonique de même amplitude, s’annulant simultanément à $t = 0$. On voit aussi l’effet de décaler l’harmonique de $\pi/2$. D’où l’importance, pour la trans-

on voit qu'au premier ordre non nul en B , on obtient une solution avec $b_2 = 0$, ainsi que $b_n = 0$ pour $n > 4$, et,

$$\begin{aligned} -\omega^2 b_1 + A b_1 + (3/4) B b_1^3 + \dots &= 0 \\ -9\omega^2 b_3 + A b_3 - B b_1^3/4 + \dots &= 0, \end{aligned} \quad (3.23)$$

ce qui donne les premières corrections

$$\omega = \sqrt{A} \left(1 + \frac{3 B b_1^2}{4 A} + \dots \right), \quad b_3 = -\frac{B b_1^3}{32 A} + \dots, \quad (3.24)$$

et donc b_1 par la condition $\dot{x}(0) = 1$ imposée initialement.

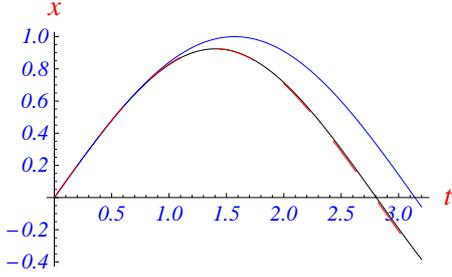


FIGURE 9 – Loi horaire dans la phase montante de l'oscillateur anharmonique $m = 1$, $f(x) = -x - 0.4 x^3$ à l'approximation harmonique (courbe bleue), avec un développement en série de Fourier au premier ordre dans l'anharmonicité (rouge pointillé) et exacte (noire).

La figure 9 montre la loi horaire sur le quart de période de la montée à droite, pour $A = 1$ et $B = 0.4$, avec la solution obtenue ne négligeant B , la solution précédente au premier ordre, et celle obtenue par résolution numérique, toutes évaluées à la même vitesse initiale $\dot{x}(0) = 1$.

On passe de la demi-période $T_0/2 = \pi$ pour $B = 0$ à $T/2 \simeq 2.790$ au premier ordre, très proche du résultat exact donné par l'intégration numérique.

Ce problème admet une solution analytique. On part, bien-sûr, de la conservation de l'énergie, car c'est une équation du premier ordre, *a priori* plus simple que l'équation de Newton du second ordre,

$$\dot{x}^2 + A x^2 + \frac{B}{2} x^4 = 1 = A x_m^2 + \frac{B}{2} x_m^4, \quad (3.25)$$

ce qui permet d'évaluer l'amplitude x_m et le quart de période

$$\frac{T}{4} = \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^2} \sqrt{1+Bx_m^2(1+u^2)/(2A)}}, \quad (3.26)$$

et si la borne supérieure $u = 1$ est remplacée par $u = x/x_m$, la loi horaire sous la forme réciproque $t(x)$. Ces intégrales s'expriment avec des fonctions elliptiques, qui ont d'ailleurs été inventées pour résoudre des problèmes de ce type.

Dans le cas du pendule simple, l'équation du mouvement donnée par le théorème du moment cinétique,

$$\ddot{\vartheta} + (g/\ell) \sin \vartheta = 0, \quad (3.27)$$

est le plus souvent traitée à l'approximation des petites oscillations, $\sin \vartheta \simeq \vartheta$, qui est bonne, car le terme suivant est d'ordre 3, et non 2, à cause de la parité de la fonction sinus.

Pour un calcul exact, on traite en général le pendule par le bilan d'énergie, on arrive facilement à

$$\omega_0 \frac{T}{2} = \int_{-\theta_m}^{+\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{2(\cos \theta - \cos \theta_m)}} = \frac{1}{2} \int_{-\theta_m}^{+\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2(\theta_m/2) - \sin^2(\theta/2)}}, \quad (3.28)$$

En introduisant le changement de variable $\sin(\theta/2) = \sin \phi \sin(\theta_m/2)$, on arrive après quelques manipulations

$$\omega_0 \frac{T}{4} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \sin^2 \phi \sin^2(\theta_m/2)}}, \quad (3.29)$$

qui fait apparaître ce que les mathématiciens appellent une fonction elliptique. L'avantage de cette formulation est que l'intégrale est régulière et se prête à des approximations et des développements en série. La limite des petites oscillations consiste à remplacer le dénominateur par 1, d'où $T = T_0 = 2\pi/\omega_0 =$

$2\pi\sqrt{\ell/g}$. Si on prend aussi le second terme du développement $1/\sqrt{1-u} = 1 + u/2 + \dots$, on trouve la formule assez connue

$$T = T_0 \left[1 + \frac{\theta_m^2}{16} + \dots \right], \quad (3.30)$$

qui donne par exemple une augmentation de période de seulement 1,7% entre $\theta \rightarrow 0$ et $\theta = \pi/6$.

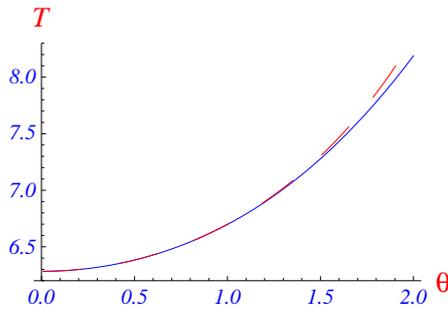
Mais on peut aussi utiliser les séries de Fourier. Pour toute amplitude ϑ_m , l'angle $\vartheta(t)$ est une fonction périodique et on peut chercher

$$\vartheta(t) = b_1 \sin(\omega t) + \dots, \quad (3.31)$$

et en première approximation $\vartheta_m \simeq b_1$. En projetant l'équation du mouvement sur la composante ω on obtient

$$-\vartheta_m \omega^2 + \frac{g}{\ell} \frac{\omega}{\pi} \int_{-\pi/\omega}^{+\pi/\omega} \sin[\vartheta_m \sin(\omega t)] \sin(\omega t) dt = 0. \quad (3.32)$$

FIGURE 10 – Période d'un pendule simple, avec $g/\ell = 1$, en fonction de l'amplitude : rouge pointillé, calcul exact et bleu, utilisation du premier terme de la série de Fourier.



L'intégrale peut se calculer et il suffit de résoudre l'équation en ω , et de déduire T . On voit sur la Fig. 10 que la réponse est très proche du résultat exact, même pour des valeurs grandes (non physiques) de l'amplitude.

3.6 Transformée de Fourier d'une fonction

3.6.1 Précautions

Pour toute f une fonction à valeur réelle ou complexe, définie sur $]-\infty, +\infty[$ dont on étudiera la transformée de Fourier (TF), on supposera que les intégrales de f , $|f|$ et $|f|^2$ sur cet intervalle sont convergentes. Ce ne sont pas les hypothèses minimales pour certaines définitions ou propriétés, mais elles permettront de ne pas revenir sur les critères de convergence chaque fois qu'on écrit une intégrale.

Il existe quelques variantes possibles de la définition : $\exp(\pm ipx)$, ou $\exp(\pm 2i\pi px)$ dans l'intégrale de définition, facteur $1/\sqrt{2\pi}$ inclus ou non, voire même des facteurs \hbar dans les appendices de certains traités de mécanique quantique. Nous adoptons ici un des choix les plus usuels, qui donne la même norme à la fonction et à sa transformée.

3.6.2 Définition et premières propriétés

La TF d'une fonction est définie comme

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-ipx) dx. \quad (3.33)$$

Les propriétés les plus immédiates sont analogues à celles des transformées de Laplace, et donc présentées ci-dessous assez rapidement

- Linéarité. Si $h(x) = a f(x) + b g(x)$, alors $\tilde{h}(p) = a \tilde{f}(p) + b \tilde{g}(p)$.
- Translation. Si $h(x) = f(x - x_0)$, alors $\tilde{h}(p) = \exp(-i x_0 p) \tilde{f}(p)$.
- Modulation. Si $h(x) = \exp(i p_0 x) f(x)$, alors $\tilde{h}(p) = \tilde{f}(p - p_0)$.
- Changement d'échelle. Si $h(x) = f(ax)$, alors $\tilde{h}(p) = \tilde{f}(p/a)/|a|$.
- Conjugaison. Si $h(x) = f(x)^*$, alors $\tilde{h}(p) = \tilde{f}(-p)^*$.
- Parité. Si f est paire, \tilde{f} aussi. Si f est impaire et réelle, \tilde{f} aussi. Si f est impaire et réelle, \tilde{f} est impaire et imaginaire pure.
- Convolution. Si $h(x) = (f * g)(x)$, alors $\tilde{h}(p) = \tilde{f}(p) \tilde{g}(p)$.
- Dérivation de \tilde{f} . On voit que $f'(p)$ est la TF de $(-ix) f(x)$, et plus généralement $\tilde{f}^{(n)}(p)$ celle de $(-ix)^n f(x)$.

- Dérivation de $f(x)$. On pourrait attendre l'établissement de la transformée inverse. Mais, par intégration par partie, on peut montrer que la TF de $f'(x)$ est $(ip)\tilde{f}(p)$. On peut généraliser pour les dérivées d'ordre plus élevé.
- Gaussienne. Si on part de la gaussienne $f(x) = (a/\pi)^{1/4} \exp(-ax^2/2)$, normalisée au sens où l'intégrale de $|f|^2$ est 1, on trouve $g(p) = (a\pi)^{-1/4} \exp(-p^2/(2a))$, c'est-à-dire une gaussienne de paramètre $a \rightarrow 1/a$. En mécanique quantique, on ne sera pas étonné de voir le fondamental de l'oscillateur harmonique d'hamiltonien $h = p^2/(2m) + kx^2/2$ décrit par une gaussienne, à cause de la symétrie entre x et p . Voir plus loin.
- Comportement asymptotique. Pour $t \rightarrow \pm\infty$, il faut $f(t) \rightarrow 0$ pour que l'intégrale de définition converge. Pour donner un sens à la formule de transformation inverse qui sera bientôt présentée, on a besoin de $\tilde{f}(p) \rightarrow 0$ pour $p \rightarrow \pm\infty$. Si f a des discontinuités, la preuve peut s'avérer délicate. Par contre, si f possède un minimum de régularité, quand $|p|$ augmente, il y a des oscillations de plus en plus rapides dans l'intégrale de définition (3.33), et donc de plus en plus d'annulation entre les parties positives et négatives des intégrales donnant $\Re f$ et $\Im f$.

3.7 Exemples

f	g
$\square(t)$	$\frac{1}{p} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{p}{2}\right)$
$a \square(at)$	$\frac{1}{p/a} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{p/a}{2}\right)$
$(a/\pi)^{1/4} \exp(-at^2/2)$	$(\pi a)^{-1/4} \exp(-p^2/(2a))$

3.8 États propres de la transformée de Fourier

Pour $a = 1$ dans l'exemple de la gaussienne traité ci-dessus, on identifie un état propre de valeur propre $\lambda = +1$ de la transformation linéaire $f \rightarrow g$. On peut, à titre d'exercice, chercher tous les états propres de cet opérateur.

3.9 Transformation inverse

Le résultat est

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(p) \exp(ipx) dp. \quad (3.34)$$

Il y a donc une parfaite symétrie entre la transformée et son inverse. Noter qu'en mécanique quantique, c'est le nombre d'onde k qui est la variable conjuguée de la position x . La relation ci-dessus est donc modifiée pour faire apparaître \hbar , si p est la quantité de mouvement. Voir plus loin.

Exemple Pour une gaussienne $a^{1/4} \exp(-ax^2/2)$, on trouve une transformée $a^{-1/4} \exp(-p^2/(2a))$ réelle, comme pour toute fonction paire. Le signe devant i importe peu. Il est évident que (3.34) redonne bien la fonction initiale.

Première démonstration Supposons que p ne soit pas trop grand, et que $f(x)$ décroisse rapidement et soit assez régulière. Alors, l'intégrale (3.34) peut être approchée par l'intégrale entre $\pm N \sqrt{2\pi/(2N+1)}$, laquelle est approchée par une somme de Riemann avec des points régulièrement espacés

$$\tilde{f}(p) \simeq \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{n=+N} f_n \exp[-in p \sqrt{2\pi/(2N+1)}], \quad f_n = f(n \sqrt{2\pi/(2N+1)}). \quad (3.35)$$

En particulier, aux points $p_m = m \sqrt{2\pi/(2N+1)}$ où \tilde{f} vaut $\tilde{f}_m = \tilde{f}(p_m)$, on trouve

$$\tilde{f}_m \simeq g_m = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{n=+N} f_n \exp[-i 2\pi n m/(2N+1)], \quad (3.36)$$

ce qui correspond à une TFDC. Donc inversement

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{m=-N}^{m=+N} g_m \exp[-i 2\pi n m/(2N+1)], \quad (3.37)$$

ce qui suggère d'enchaîner les déductions précédentes, mais en sens inverse : on remplace la somme par une intégrale, et la formule obtenue pour $x_n = n \sqrt{2\pi/(2N+1)}$ est interpolée pour n'importe quelle valeur de x .

On remarque que l'approximation d'une intégrale par une somme ou vice-versa est d'autant meilleure que N est grand, car les bornes se rapprochent de $\pm\infty$ et l'intervalle décroît comme $N^{-1/2}$.

Esquisse d'une autre démonstration Voir, par exemple, [3]. Soit

$$f_T(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } |x| < T/2 \\ 0 & \text{si } |x| > T/2, \end{cases} \quad (3.38)$$

de sorte que $f(x)$ peut être considérée comme $\lim_{T \rightarrow \infty} f_T$. Cette fonction f_T génère une fonction périodique h_T , identique à f_T sur $[-T/2, T/2)$ et répétée à l'identique sur $[T/2, 3T/2]$, etc., avec le risque assumé de discontinuité. Cette fonction admet un développement en série de Fourier, avec un changement de numérotation par rapport à (3.18),

$$h_T(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n \exp(-i n \omega x) \quad (3.39)$$

dont les coefficients sont donnés par

$$d_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} h_T(x) \exp(i n \omega x) dx. \quad (3.40)$$

En jouant astucieusement sur la limite $T \rightarrow \infty$, on démontre la formule de l'inversion de la TF.

3.10 Identités de Plancherel et Parseval

Le résultat est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(p)|^2 dp, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}^*(p) \tilde{f}(p) dp, \quad (3.41)$$

la seconde découlant de la première et vice-versa.

Exemples La gaussienne $f(x) = (a/\pi)^{1/4} \exp(-ax^2/2)$ est telle que l'intégrale de $|f(x)|^2$ est égale à 1. C'est aussi le cas de sa transformée $\tilde{f}(p) = (a\pi)^{-1/4} \exp(-p^2/(2a))$. On peut aussi comparer explicitement les normes de la fonction porte et du sinus cardinal obtenu par TF.

Démonstration On peut reprendre la stratégie utilisée pour la transformation inverse. Avec les mêmes notations,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{2N+1}} \sum_{n=-N}^{+N} |f_n|^2 = \sqrt{\frac{2\pi}{2N+1}} \sum_{n=-N}^{+N} |g_n|^2 \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(p)|^2 dp, \quad (3.42)$$

et il faut se convaincre que les “ \simeq ” peuvent devenir des limites bien maîtrisées. Comme pour la transformée inverse, on utilise simultanément deux résultats classiques d'analyse : approximation d'une intégrale généralisée par un intégrale simple dont les bornes augmentent indéfiniment ; approximation d'une intégrale simple par une suite de sommes de Riemann.

3.11 Théorèmes sur les écarts quadratiques

Notons σ et $\tilde{\sigma}$ les écarts quadratiques de x et p sous $|f|^2$ et $|\tilde{f}|^2$, respectivement. Ils sont définis par $\sigma^2 > 0$ et

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \bigg/ \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx, \quad (3.43)$$

et l'analogue pour $\tilde{\sigma}$. Le résultat est

$$\sigma \tilde{\sigma} \geq \frac{1}{2} \quad (3.44)$$

avec saturation pour une gaussienne, et application importante en mécanique dans les fameuses inégalités de Heisenberg.

Pour une gaussienne, avec les notations précédentes, on obtient

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{2a}}, \quad \tilde{\sigma} = \sqrt{\frac{a}{2}}, \quad (3.45)$$

ce qui montre l'égalité.

Dans le cas général, considérons

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{f}(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \int_{-\infty}^{+\infty} |f'(x)|^2 dx, \quad (3.46)$$

en utilisant les règles de dérivation. Si f réel, l'inégalité de Schwarz (celle qui en géométrie assure que $\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|$) donne

$$I \geq \left| \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) f'(x) dx \right|^2 = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \quad (3.47)$$

par intégration par parties. Si f complexe, l'inégalité est aggravée, car $|z| \geq |\Re z| = (z + z^*)/2$ pour $z = f^* f'$, ce qui permet de faire apparaître $f^* f' + f f'^*$ et d'enchaîner sur la même intégration par parties, menant au même résultat.

3.12 Transformée de Fourier multidimensionnelle

Si $\mathbf{r} = \{x, y, \dots\}$ décrit n variables, on peut définir la TF de $f(\mathbf{r})$ comme

$$\tilde{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int \cdots \int f(\mathbf{r}) \exp(-i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) d^{(n)} \mathbf{r}. \quad (3.48)$$

Un cas particulier fréquent est celui d'une fonction isotrope, dépendant du seul rayon $r = \|\mathbf{r}\|$. Dans le cas où $n = 3$, par exemple, on obtient

$$\tilde{f}(p) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{1}{p} \int_0^{+\infty} f(r) \sin(pr) r dr. \quad (3.49)$$

qui est aussi une fonction isotrope de \mathbf{p} .

Par exemple, un potentiel de Yukawa $v(r) = \exp(-\mu r)/r$ a une transformée de Fourier

$$\tilde{v}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{p^2 + \mu^2}, \quad (3.50)$$

utile par exemple pour calculer l'amplitude de diffusion dans ce potentiel à l'approximation de Born.

On généralise facilement les résultats obtenus pour la transformation inverse et pour les normes. Par exemple, on vérifie pour l'exemple ci-dessus

$$\iiint \exp(-2\mu r) r^{-2} d^{(3)} \mathbf{r} = \frac{2\pi}{\mu} = \frac{2}{\pi} \iiint (\mathbf{p}^2 + \mu^2)^{-2} d^{(3)} \mathbf{p}. \quad (3.51)$$

3.13 Applications de la transformée de Fourier

Elles sont nombreuses. Nous n'en développerons que quelques unes.

3.13.1 Théorie du signal

Voir les cours spécialisés. Filtrer le bruit. Modifier les images, etc.

3.13.2 Équations différentielles et aux dérivées partielles

On peut reprendre les exemples vus avec la transformée de Laplace.

3.13.3 Physique quantique

En MQ à une dimension, la fonction d'onde $\psi(x)$ est l'amplitude de probabilité pour que la particule se trouve au voisinage point x . Plus précisément, la probabilité (normalisée ou non) de trouver la particule entre x et $x + dx$ est $|\psi(x)|^2 dx$. L'amplitude de probabilité de la quantité de mouvement p est donnée par la transformée de Fourier

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp(-i p x / \hbar) . \quad (3.52)$$

On choisit en général de modifier la définition comme ci-dessus de façon à ce que la normalisation soit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x)|^2 dp . \quad (3.53)$$

La notation de Dirac permet de mieux retenir les règles. On pose

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle , \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle , \quad \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x)|^2 dp . \quad (3.54)$$

3.14 Oscillateur harmonique en mécanique quantique

L'hamiltonien correspondant est $p^2/(2m) + Kx^2/2$, soit en représentation de configuration

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{K}{2} x^2 . \quad (3.55)$$

On voit que p et x interviennent symétriquement, ou si l'on préfère la multiplication par x et i fois la dérivation.

Pour rendre le problème plus clair, il est préférable de se débarrasser des facteurs constants en exploitant les lois d'échelle de cet hamiltonien : un changement de masse, ou un changement de raideur ne font que modifier par un facteur les énergies et les distances. Si on pose $x = ay$ où a est une distance caractéristique à choisir astucieusement et y une variable sans dimension, l'opérateur devient

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{Ka^2}{2} x^2 . \quad (3.56)$$

et en choisissant $mKa^4 = 1$,

$$H = \hbar\sqrt{\frac{K}{m}} \left[\frac{d^2}{dy^2} + x^2 \right] \equiv \hbar\sqrt{\frac{K}{m}} h . \quad (3.57)$$

Donc si $h\varphi(y) = \epsilon\varphi(y)$, la transformée de Fourier $\tilde{\varphi}(y)$ sera aussi état propre avec la même valeur propre. Mais, en mécanique quantique à *une dimension*, les niveaux ne sont pas dégénérés, donc $\tilde{\varphi}(y) \propto \varphi(y)$.

On vérifie que c'est bien le cas pour le fondamental

$$\epsilon_0 = 1 , \quad \varphi_0 = \exp(-x^2/2) , \quad (3.58)$$

(ici non normalisé), mais aussi pour les états excités

$$\epsilon_n = 1 + 2n, \quad \varphi_n = H_n(x) \exp(-x^2/2), \quad (3.59)$$

où H_n est un polynôme d'Hermite. On pourra le vérifier directement ou bien en utilisant les opérateurs éleveur et abaisseur dans la méthode dite de Dirac, qui est expliquée dans les livres de mécanique quantique [4]. En particulier, $\varphi_n = (x\varphi_{n-1} - \varphi'_{n-1})/\sqrt{2n}$ respecte la propriété d'être, à un facteur près, sa propre transformée.

3.14.1 Particule NR dans un potentiel linéaire et particule UR dans un oscillateur harmonique

La symétrie $p \leftrightarrow x$ de l'oscillateur harmonique fait que les hamiltoniens ($a, b > 0$) $h_1 = ap^2 + bx^2$ et $h_2 = bp^2 + ax^2$ ont mêmes niveaux d'énergie et des fonctions d'onde TF l'une de l'autre. En effet, avec les notations classiques, le coefficient de p^2 est $1/(2\mu)$, où μ est la masse réduite et celui de x^2 $K/2$, où K est la constante de Hooke équivalente et les énergies sont proportionnelles à $\sqrt{K/\mu} \propto \sqrt{ab}$.

On peut faire mieux. On traite assez souvent l'hamiltonien

$$H_1 = \mathbf{p}^2/(\mu) + \lambda r, \quad (3.60)$$

dont la version unidimensionnelle décrit les niveaux d'énergie des neutrons dans un champ gravitationnelle (cette quantification a été observée récemment à l'ILL [5]) ou des électrons dans un champ électrique, et dont la version spatiale décrit le mouvement relatif d'un quark et d'un antiquark liés par un potentiel de confinement croissant linéairement. Ici μ est deux fois la masse réduite.

En posant $r = ax$, où a est une sorte de rayon de Bohr du problème et x une variable sans dimension, et en

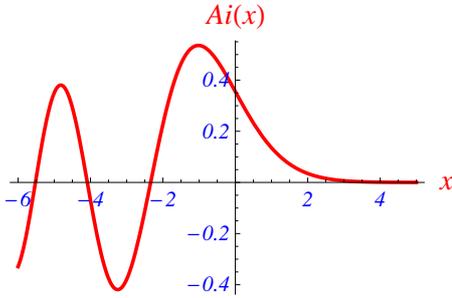


FIGURE 11 – Fonction d'Airy $Ai(x)$

optimisant a pour un maximum de simplicité, on arrive en représentation de position à

$$H_1 = \lambda^{2/3} (\mu/\hbar^2)^{-1/3} h_1, \quad h_1 = -\Delta_x + x \quad (3.61)$$

soit, pour les états avec moment angulaire $\ell = 0$, l'équation aux valeurs propres $h_1 \varphi(x) = \epsilon \varphi(x)$ se traduisant par l'équation différentielle

$$-u''(x) + xu(x) = \epsilon u(x), \quad u(0) = 0, \quad \int_0^\infty |u(x)|^2 dx < \infty, \quad (3.62)$$

qui est très proche de l'équation différentielle d'Airy,

$$-y''(x) + xy(x) = 0, \quad (3.63)$$

dont la solution régulière à l'infini est (à un facteur près) la fonction d'Airy $Ai(x)$, représentée sur la Fig. 11.

Le lien entre les deux équations différentielles est simplement une translation $x \rightarrow x - \epsilon$, et donc la condition $u(0) = 0$ sera réalisée si ϵ est l'opposé d'un zéro de $Ai(x)$, soit $\epsilon_1 = 2,33811\dots$, $\epsilon_2 = 4,08795\dots$, etc. En fait, le fondamental et les excitations radiales ont la même fonction d'onde réduite (non normalisée), mais décalée horizontalement d'un niveau à l'autre. Après normalisation, on obtient les fonctions d'onde de la Fig. 12. On pourra démontrer à titre d'exercice que $u_n(x) = Ai(x - \epsilon_n)/Ai(-\epsilon_n)$ est normalisée, ce qui signifie que le carré de la fonction d'onde à l'origine est $|\varphi_n(0)|^2 = 1$ pour le fondamental et toutes les excitations radiales. Ce problème linéaire est par certains côtés plus élégant que les cas coulombien et harmoniques qui

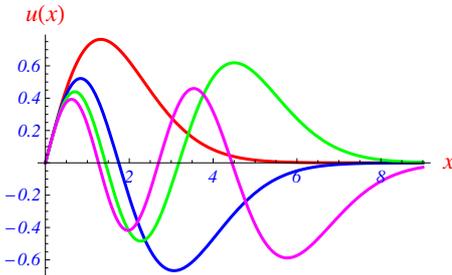


FIGURE 12 – Premiers états $\ell = 0$ dans un potentiel linéaire. Les fonctions d'onde réduites sont ici normalisées.

le carré de la fonction d'onde à l'origine est $|\varphi_n(0)|^2 = 1$ pour le fondamental et toutes les excitations radiales. Ce problème linéaire est par certains côtés plus élégant que les cas coulombien et harmoniques qui

constituent les modèles exactement solubles les plus connus en mécanique quantique, mais il est restreint à $\ell = 0$. Pour $\ell \geq 1$, on n'a pas de résolution analytique.

La résolution de (3.60) permet celle de

$$H_2 = p + \alpha r^2, \quad (3.64)$$

qui est une équation délicate en représentation de configuration, à cause de $p = \sqrt{p^2}$. Cet hamiltonien pourrait décrire une particule ultra-relativiste dans un potentiel harmonique. On passe d'un problème à l'autre par simple transformée de Fourier.

4 Distributions

4.1 Historique

La généralisation de la notion de fonction est due aux travaux de Heaviside, Dirac, Sobolev, etc., conduisant à la théorie des distributions de Laurent Schwartz.

Pour nombre d'applications, il suffit d'une connaissance un peu empirique, telle qu'elle est esquissée dans la prochaine section. Nous donnerons cependant plus loin une idée de la formulation plus rigoureuse.

L'idée principale est que dans le calcul de l'intégrale de produit

$$I_g(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx, \quad (4.1)$$

où $f(x)$ est une fonction test, qui décroît très vite quand $|x| \rightarrow \infty$, la valeur précise de $g(x)$ en chaque point importe peu, on ne s'intéresse qu'à l'effet sur les fonctions de test. Ce qui retient l'attention, c'est l'application linéaire $f \rightarrow I_g(f)$. À côté des applications linéaires associées à des fonctions g parfaitement continues et différentiables, on peut évaluer I pour des fonctions discontinues, comme

$$I_\Theta(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f(x) dx = \int_0^{+\infty} f(x) dx, \quad (4.2)$$

de la fonction "pas" de Heaviside, ou même des "fonctions" qui n'en sont pas comme

$$I_\delta(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0), \quad (4.3)$$

ce qui introduit la fonction "delta" de Dirac, qui en réalité n'est pas une fonction mais une distribution.

En particulier, on verra qu'on peut élargir la notion de dérivée, soit $g \rightarrow g'$, pour une fonction $g(x)$ qui n'est pas dérivable, mais pour laquelle l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g'(x) f(x) dx, \quad (4.4)$$

peut être définie sans ambiguïté pour toute une classe de fonctions test f .

4.2 Lien entre les fonctions de Heaviside et de Dirac

À titre d'exemple, considérons de nouveau la fonction "pas" (4.2) et le pic de Dirac (4.3), intégrées avec des fonctions test s'annulant très vite à l'infini, ainsi que leurs dérivées. Soit f l'une de ces fonctions tests, et f' sa dérivée,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f'(x) dx = -f(0) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx, \quad (4.5)$$

ce qui fait penser à la relation obtenue pour des fonctions ordinaires, par intégration par parties (ici le terme tout intégré est nul car f s'annule à $|x|$ grand)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [g(x)f'(x) + g'(x)f(x)] dx = 0, \quad (4.6)$$

incitant à considérer δ comme la dérivée de Θ , alors que $\Theta(x)$ n'est pas dérivable en $x = 0$, au sens habituel de la dérivation.

Noter que cette relation peut se comprendre si on considère Θ comme la limite quand $a \rightarrow 0^+$ de

$$g_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq -a/2, \\ (x + a/2)/a & \text{si } -a/2 < x < a/2, \\ 1 & \text{si } a/2 \leq x, \end{cases} \quad (4.7)$$

dont la dérivée est une fonction (parfois appelée "porte") rectangulaire, d'aire unité, qui est l'une des modèles les plus simples pour décrire le pic de Dirac par passage à la limite. Voir Fig. 13.

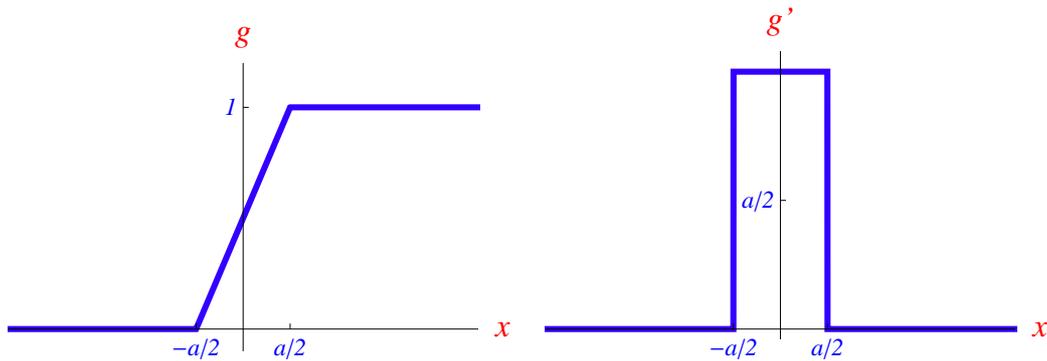


FIGURE 13 – Fonctions qui tendent vers les distributions de Heaviside et Dirac.

4.3 Théorie des distributions

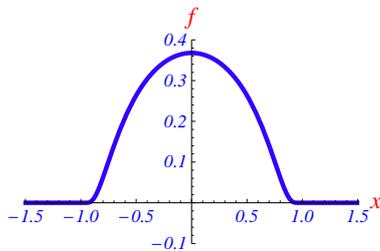


FIGURE 14 – Fonction à support compact et indéfiniment dérivable de l'équation (4.8)

Noter que pour \mathcal{D} , les fonctions restent continues et donc tendent vers zéro avant de s'annuler, avec des dérivées continues. Un exemple est

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{1-x^2}\right) & \text{si } |x| < 1, \\ 0 & \text{si } |x| > 1, \end{cases} \quad (4.8)$$

(voir figure Fig. 14), ou toute fonction obtenue en multipliant une fonction régulière par f .

Noter aussi que chaque fonction de \mathcal{D} possède son propre support borné, qui peut être de plus en plus grand par exemple pour une suite de fonctions. On peut, bien-sûr, définir un sous-espace de fonctions possédant le même support borné.

Dans ce contexte, après le choix d'un espace, noté \mathcal{K} , de fonctions test, qui est soit \mathcal{C}^∞ , soit \mathcal{S} , soit \mathcal{D} , soit un autre sous-espace, une distribution A est une application linéaire et continue

$$A : \mathcal{K} \mapsto \mathbb{C}, \quad (4.9)$$

dont on note le résultat de différentes façons $A : f \mapsto I_A(f) = (A, f) = \langle f \rangle = \dots$.

Revenons sur les trois composantes de cette définition. Une application de \mathcal{K} sur \mathbb{C} est une *fonctionnelle*. La linéarité signifie que si $f_1 \in \mathcal{K}$ et $f_2 \in \mathcal{K}$ et $\lambda \in \mathbb{C}$, alors

$$(A, f_1 + f_2) = (A, f_1) + (A, f_2) \quad \text{et} \quad (A, \lambda f_1) = \lambda (A, f_1). \quad (4.10)$$

La continuité signifie que si une suite de fonctions $\{f_i\}$ de \mathcal{K} a pour limite $f \in \mathcal{K}$ quand l'entier i tend vers l'infini, alors la suite des nombres complexes $\{(A, f_i)\}$ tend vers (A, f) .

Les exemples déjà vus sont

– l'intégrale du produit avec une fonction continue

$$(g, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx, \quad (4.11)$$

ce qui permet de dire que la notion de distribution généralise celle de fonction. Pour simplifier, on utilisera la même notation pour la fonction et la distribution associée.

– La distribution de Heaviside

$$(\Theta, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f(x) dx = \int_0^{+\infty} f(x) dx, \quad (4.12)$$

– La distribution de Dirac

$$(\delta, f) = f(0), \quad (4.13)$$

notée un peu abusivement

$$(\delta, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx, \quad (4.14)$$

alors que $\delta(x)$ n'est pas une fonction.

On parle de distributions *régulières* associées à des fonctions continues, et de distributions *singulières* pour les autres.

4.4 Propriétés des distributions

Espace des distributions Il est assez facile de définir la somme de deux distributions sur \mathcal{K} , $A = A_1 + A_2$, soit

$$(A, f) = (A_1, f) + (A_2, f) \quad \forall f \in \mathcal{K}, \quad (4.15)$$

et le produit par un complexe λ ,

$$(\lambda A, f) = (A, \lambda f) \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (4.16)$$

Ces propriétés donnent à l'ensemble des distributions sur \mathcal{K} la structure d'un espace vectoriel, qu'on peut noter \mathcal{K}' .

Noter que la hiérarchie $\mathcal{D} \subset \mathcal{S} \subset \mathcal{E} = \mathcal{C}^\infty$ implique $\mathcal{D}' \supset \mathcal{S}' \supset \mathcal{E}'$. Par exemple, la fonction $\exp(x^2)$ permet de définir une distribution de \mathcal{D}' , mais pas des deux autres.

Support d'une distribution

Produit de deux distributions ? Il n'est pas possible de le définir en général. Mais pour deux distributions régulières, associées à des fonctions ordinaires, le produit est défini, qui est associé au produit des deux fonctions. On peut aussi définir le produit d'une distribution régulière associée à la fonction $\alpha(x)$ et d'une distribution quelconque A par la relation

$$(\alpha A, f) = (A, \alpha f) \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (4.17)$$

Distribution traduite L'idée est de généraliser la règle simple

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x-a) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x+a) dx \quad (4.18)$$

pour des fonctions ordinaires. On définira donc la translation $A \mapsto A_a$ par

$$(A_a, f) = (A, {}^a f) \quad \text{avec} \quad {}^a f(x) = f(x+a), \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (4.19)$$

ou plus simplement $A_a(x) = A(x-a)$, avec les précautions à prendre avec cette notation.

Dilatation d'une distribution Pour des intégrales ordinaires,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(ax) f(x) dx = \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x/a) dx , \quad (4.20)$$

donc la règle se généralise en

$$(A(ax), f(x)) = \frac{1}{|a|} (A(x), f(x/a)) , \quad \forall f \in \mathcal{K} . \quad (4.21)$$

par exemple $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$, et $\delta(-x) = \delta(x)$, qui est donc une distribution ‘‘paire’’.

Dérivation d'une distribution Comme annoncé dans l'introduction, le guide est la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g'(x) f(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f'(x) dx , \quad (4.22)$$

lorsque le terme tout intégré de l'intégration par parties s'annule.

La dérivée de la distribution X est la distribution X' telle que $\forall f \in \mathcal{K}$,

$$(X', f) = -(X, f') . \quad (4.23)$$

Par exemple, pour la distribution de Heaviside,

$$(\Theta', f) = -(H, f') = - \int_0^{+\infty} f'(x) dx = f(0) = (\delta, f) . \quad (4.24)$$

Donc $\Theta' = \delta$, ce qui est vérifié par des suites de fonctions dont les distributions correspondantes tendent vers Θ .

Les règles de calcul habituelles des dérivées s'appliquent : dérivée d'une somme, d'un produit quand celui-ci est défini, etc.

Dérivées d'ordre supérieur On généralise en

$$(A^{(n)}, f) = (-1)^n f^{(n)}(0) , \quad \forall f \in \mathcal{K} . \quad (4.25)$$

4.5 Distribution associée à une convolution

4.5.1 Définition du produit de convolution

La définition est

$$h = g_1 * g_2 , \quad h(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(y-x) g_2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) g_2(y-x) dx , \quad (4.26)$$

qui se ramène à la définition introduite lors de la transformée de Laplace : si $g_1(x)$ et $g_2(x)$ contiennent un facteur $\Theta(x)$, c'est-à-dire s'annulent pour $x < 0$, l'intégrale est restreinte à l'intervalle $[0, y]$. Ce produit est symétrique, et chacune des fonctions intervient linéairement.

4.5.2 Distribution associée

Si on considère h comme une distribution régulière, son action sur une fonction test $f \in \mathcal{K}$ donne

$$(h, f) = \iint_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) g_2(y-x) f(y) dx dy = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) dx \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g_2(u) f(u+x) du \right] , \quad (4.27)$$

soit en notation condensée

$$(g_1 * g_2, f) = (g_1(x), (g_2(u), f(x+u))) . \quad (4.28)$$

Nous adopterons cette relation comme définition pour des distributions plus générales.

4.5.3 Propriétés

On peut montrer que $(g_1 \star g_2)' = g_1' \star g_2 = g_1 \star g_2'$.

La distribution δ joue le rôle d'unité, dans le sens où $\delta \star g = g \star \delta = g$.

On dira que h est inverse de g , et on notera parfois $h = g^{-1}$ si $g \star h = h \star g = \delta$, mais cet inverse n'est pas unique en général.

4.6 Transformée de Laplace d'une distribution

4.6.1 Définition

Soit une distribution $A \in \mathcal{D}'$, c'est-à-dire agissant sur des fonctions test à support borné. On appellera transformée de Laplace de la distribution A , soit $\mathcal{L}[A]$ la fonction $\mathbb{C} \mapsto \mathbb{C}$, définie par

$$\mathcal{L}[A](s) = (A, \exp(-st)) , \quad (4.29)$$

sous réserve d'existence, car on fait agir A sur une fonction $\mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$ qui n'est pas à support borné.

On retrouve des propriétés habituelles de la transformée de Laplace, comme la linéarité.

4.6.2 Transformée de Laplace de la distribution de Dirac

On trouve immédiatement $\mathcal{L}[\delta] = 1$.

4.6.3 Transformée de Laplace d'une distribution régulière

En utilisant la notation $\langle f \rangle$ pour la distribution régulière associée à la fonction f , on montre facilement que, sous réserve d'existence,

$$\mathcal{L}[\langle f \rangle](s) = \mathcal{L}[f] = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(-st) dt , \quad (4.30)$$

qui se ramène à une intégrale entre 0 et $+\infty$ pour les fonctions considérées dans la théorie élémentaire des transformées de Laplace, qui contiennent la fonction de Heavisde $\Theta(t)$. On peut considérer la relation ci-dessus comme une généralisation, pour des fonctions non nulles pour $t < 0$, sous réserve de l'existence de l'intégrale.

4.6.4 Transformée de Laplace d'une dérivée

On montre facilement que

$$\mathcal{L}[A'](s) = s \mathcal{L}[A] . \quad (4.31)$$

En effet la dérivée sera définie comme l'opposé de l'action sur la dérivée, par rapport à t , de $\exp(-st)$, ce qui donne ce facteur s .

Plus généralement,

$$\mathcal{L}[A^{(n)}](s) = s^n \mathcal{L}[A] . \quad (4.32)$$

Noter qu'on n'a pas l'équivalent de la constante $\phi(0)$ qui apparaît dans la théorie élémentaire. Mais on peut comprendre la différence. Si on part d'une fonction $\phi_0(t)$ nulle pour $t < 0$, et démarrant continument pour $t > 0$ avec $\phi_0(0) = 0$, il n'y a pas de différence. Les fonctions considérées au chapitre 2, nulles pour $t < 0$ et démarrant pour $t > 0$ par $\phi(0) \neq 0$ peuvent s'écrire $\phi(t) = \phi_0(t) + \phi(0) \Theta(t)$, et il suffit de dériver cette expression.

Par exemple, si on part de la distribution de Dirac, $\mathcal{L}[\delta'](s) = s$ et $\mathcal{L}[\delta^{(n)}](s) = s^n$.

4.6.5 Transformée de Laplace d'une convolution

La relation

$$\mathcal{L}[A \star B](s) = \mathcal{L}[A] \mathcal{L}[B] , \quad (4.33)$$

généralise le résultat pour les fonctions. Il est compatible avec le résultat sur la dérivation, $(A \star B)' = A' \star B = A \star B'$, car en prenant la transformée de Laplace, on aura exactement un facteur s .

4.7 Transformée de Fourier d'une distribution

4.7.1 Définition

Considérons une fonction ordinaire $g(x)$ munie d'une transformée de Fourier, et $f(x)$ une fonction de \mathcal{D} , donc munie d'une transformée de Fourier. On démontre assez facilement, en partant de g^* , cette variante du théorème de Parseval–Plancherel

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \tilde{f}(x) dx . \quad (4.34)$$

Cette propriété ouvre la porte à la définition de la TF d'une distribution. La seule difficulté, c'est qu'en partant d'une fonction f à support borné, sa TF \tilde{f} ne l'est pas. Il faut donc la précaution habituelle “sous réserve d'existence”, et on définit la TF \tilde{A} de la distribution A par

$$(\tilde{A}, f) = (A, \tilde{f}) , \quad \forall f . \quad (4.35)$$

4.7.2 Propriétés

Linéarité.

4.7.3 Exemple : distribution de Dirac

Le résultat est $\tilde{\delta} = 1/\sqrt{2\pi}$.

4.7.4 Exemple : distribution de Heaviside

Au sens ordinaire, la fonction “pas” ne possède pas de transformée de Fourier, car l'intégrale de $\exp(-ipx)$ ne converge pas quand la borne supérieure augmente indéfiniment. Au sens des distributions, on peut montrer que

$$\tilde{\Theta}(p) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{p} + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \delta(p) , \quad (4.36)$$

où la distribution $1/p$ est à comprendre au sens d'une valeur principale,

$$\left(\frac{1}{p}, f(p) \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0} \left[\int_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{f(p)}{p} dp + \int_{\epsilon}^{+\infty} \frac{f(p)}{p} dp \right] . \quad (4.37)$$

4.8 Calculs avec la distribution de Dirac

Rappelons la définition $(\delta, f) = f(0)$ et le lien avec la distribution de Heaviside, $\Theta' = \delta$. Nous avons également vu la propriété de dilatation $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$.

Il est possible de définir un pic de Dirac centré en $x = a$, noté δ_a ou, un peu abusivement $\delta(x - a)$, tel que $(\delta_a, f) = f(a)$ pour toute fonction f de \mathcal{K} .

On cherche maintenant à interpréter la composition de δ avec une fonction ordinaire $h(x)$ à valeurs réelles, de même qu'on compose deux fonctions ordinaires, g et h , pour former $g(h(x))$. Soit $\{g_n(x)\}$ une suite de fonctions dont les distributions associées tendent vers la distribution δ , par exemple, $g_n(x) = (n/\pi)^{1/2} \exp(-nx^2)$. Si $h(x)$ est monotone croissante, on aura par changement de variable $u = h(x)$, avec fonction inverse $x = \tilde{h}(u)$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_n(h(x)) f(x) dx = \int_{h(-\infty)}^{h(+\infty)} g_n(u) f(\tilde{h}(u)) / h'(\tilde{h}(u)) du . \quad (4.38)$$

En passant à la limite, on voit que si $h(x) = 0$ pour $x = a$, alors

$$(\delta(h), f) = (\delta_a, f(\tilde{h})/h'(\tilde{h})) = f(a)/h'(a) . \quad (4.39)$$

Pour une fonction monotone décroissante, on aurait $-h'(a)$ au lieu de $h'(a)$. Le résultat général pour une fonction $h(x)$ pas forcément monotone qui s'annule en a_1, a_2, \dots ,

$$(\delta(h), f) = \sum_n f(a_n)/|h'(a_n)|. \quad (4.40)$$

5 Applications des distributions, fonctions de Green

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous développons quelques applications des distributions en particulier pour les équations différentielles, qui seront l'objet de quelques rappels. Le concept de fonction de Green sera introduit.

5.2 Équations différentielles linéaires du second ordre

Considérons un système oscillant, mécanique ou autre, avec une excitation extérieure. L'équation différentielle générique est

$$\ddot{x}(t) + 2b(t)\dot{x}(t) + a(t)x(t) = g(t), \quad (5.1)$$

dont la version minimale suppose que b et a sont constants.

5.2.1 Rappels élémentaires

Les solutions de l'équation homogène forment un espace de dimension 2. Si $b = 0$ et a est constant, lorsque $a > 0$, ce sont les oscillations $\exp(\pm i\sqrt{a}t)$ qu'on peut regrouper en $\cos(\sqrt{a}t)$ et $\sin(\sqrt{a}t)$, tandis que pour $a < 0$, une base de solutions est formée par les exponentielles réelles $\exp(\pm\sqrt{-a}t)$ ou les fonctions de trigonométrie hyperbolique associées.

Si $b \neq 0$ et que a et b sont constants, on cherche d'habitude une base de solutions exponentielles $\exp(rt)$, avec r réel ou complexe solution de l'équation caractéristique associée. Une variante minime consiste à poser $u(t) = \exp(bt)x(t)$, pour obtenir $\ddot{u}(t) + (a - b^2)u(t) = 0$, qui permet de se ramener au cas précédent, et donc à discuter selon le signe de $a - b^2$.

Quand a et b ne sont pas des constantes, la recherche des solutions est moins facile. Il arrive par exemple qu'on ait assez vite une solution $x_0(t)$, mais que la seconde soit plus difficile d'accès. C'est le cas par exemple pour les équations différentielles auxquelles obéissent les polynômes orthogonaux, avec des a et b eux-mêmes polynômes en t . On peut poser

$$x(t) = x_0(t)y(t), \quad (5.2)$$

pour aboutir à une équation de degré moins élevé pour \dot{y}

$$x_0\ddot{y} + 2(\dot{x}_0 + b)\dot{y} = 0, \quad (5.3)$$

qui se ramène facilement au calcul d'une intégrale.

Pour passer à l'équation inhomogène, il suffit de connaître une solution particulière, $x_p(t)$, et la solution la plus générale sera

$$x(t) = x_p(t) + \alpha_1 x_1(t) + \alpha_2 x_2(t) \quad (5.4)$$

obtenue en ajoutant une solution quelconque de l'équation homogène, décrite ici dans sa base $\{x_1(t), x_2(t)\}$. Les constantes α_1 et α_2 sont déterminées par les conditions initiales.

Reste à trouver une solution particulière. Dans nombre d'applications, on se laisse guider par l'intuition. Pour des coefficients a et b constants ou polynomiaux, et $g(t)$ aussi polynomial, une solution polynomiale est recherchée. Pour une excitation périodique (on prend $g(t) = g_0 \exp(i\omega t)$, puis la partie réelle), et a et b constants, il existe une solution $A g_0 \exp(i\omega t)$, où A , complexe, contient l'amplitude et le déphasage de la réponse stationnaire.

Une méthode plus générale pour résoudre l'équation complète à partir des solutions de l'équation homogène consiste à faire "varier" les constantes. On pose plus précisément

$$x(t) = \alpha_1(t)x_1(t) + \alpha_2(t)x_2(t), \quad \dot{x}(t) = \alpha_1(t)\dot{x}_1(t) + \alpha_2(t)\dot{x}_2(t), \quad (5.5)$$

ce qui suppose que

$$\dot{\alpha}_1(t)x_1(t) + \dot{\alpha}_2(t)x_2(t) = 0, \quad (5.6)$$

et en reportant dans l'équation différentielle on trouve en outre que

$$\dot{\alpha}_1(t) \dot{x}_1(t) + \dot{\alpha}_2(t) \dot{x}_2(t) = g(t), \quad (5.7)$$

et en combinant (5.6) et (5.7), on calcule facilement $\dot{\alpha}_1(t)$ et $\dot{\alpha}_2(t)$, d'où $\alpha_1(t)$ et $\alpha_2(t)$, c'est-à-dire la solution la plus générale de l'équation avec second membre.

5.2.2 Exploitation de la linéarité

L'équation (5.1) est également linéaire par rapport à son second membre, à savoir que si $x_{p,i}$ est une solution particulière avec un second membre $g_i(t)$, alors

$$x_p(t) = x_{p,1}(t) + x_{p,2}(t) + \dots \quad (5.8)$$

sera solution pour le second membre $g(t) = g_1(t) + g_2(t) + \dots$.

L'ajustement des conditions initiales, par contre, risque de ne pas se propager. Si par exemple, on impose $x_{p,i}(0) = 1$ et $\dot{x}_{p,i}(0) = 0$, ces conditions ne seront pas satisfaites par (5.8).

Mais il y a des exceptions. En particulier, on peut chercher la solution particulière *causale*, avec $x_p(0) = 0$ et $\dot{x}_p(0) = 0$, qui ne doit son existence pour $t > 0$ qu'à l'excitation $g(t)$ et non pas à la persistance d'un mouvement antérieur. Alors la superposition de solutions $x_{p,i}(t)$ causales est elle-même causale.

5.2.3 Second membre en pic de Dirac

L'idée est alors de résoudre (5.1) avec $\delta(t - t')$ comme second membre, et d'en déduire la solution pour un second membre quelconque en le réécrivant

$$g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(t') \delta(t - t') dt'. \quad (5.9)$$

On cherche donc une solution de

$$\ddot{x}(t) + 2b(t)\dot{x}(t) + a(t)x(t) = \delta(t - t'), \quad (5.10)$$

qui implique la généralisation au champ des distributions de l'équation différentielle originale (5.1) portant sur des fonctions ordinaires. Tout l'art est de choisir une solution qui permet, lors de la superposition, la mise en place des conditions limites du problème. Nous commencerons par des exemples.

5.2.4 Exemple avec des conditions limites de type corde vibrante

On veut résoudre

$$y'' + y = \frac{1}{\sin x}, \quad (5.11)$$

avec $y(0) = y(\pi/2) = 0$. Plus généralement, imposer $y(a_1) = \alpha_1$ et $y(a_2) = \alpha_2$ constitue ce qu'on appelle des *conditions de Dirichlet*.

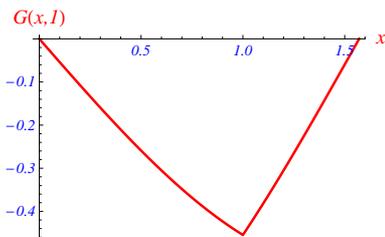


FIGURE 15 – Fonction de Green avec limites de Dirichlet, ici pour $z = 1$.

Ici, nous recherchons d'abord la *fonction de Green* $G(x, z)$ solution de

$$\frac{\partial^2 G(x, z)}{\partial x^2} + G(x, z) = \delta(x - z). \quad (5.12)$$

Pour $x < z$ et pour $x > z$, la fonction $G(x, z)$ est une combinaison linéaire de $\sin x$ et $\cos x$. Si on impose l'annulation en $x = 0$, l'annulation en $x = \pi/2$, la continuité en $x = z$ et un saut unité de la dérivée en $x = z$, on arrive à

$$G(x, z) = \begin{cases} -\cos z \sin x & \text{pour } x < z, \\ -\sin z \cos x & \text{pour } x > z, \end{cases} \quad (5.13)$$

représentée sur la Fig. 15. On en déduit la solution de notre problème

$$y(x) = \int_0^{\pi/2} G(x, z) / \sin z \, dz = -x \cos x + \sin x \ln \sin x, \quad (5.14)$$

qu'on peut retrouver à titre d'exercice par la méthode de variation des constantes.

5.2.5 Exemple avec condition causale

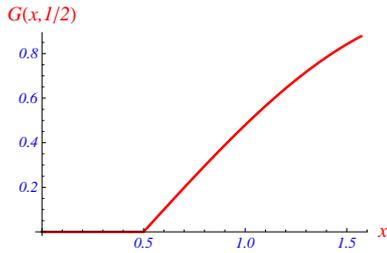


FIGURE 16 – Fonction de Green avec limites causales, ici pour $z = 1/2$.

Considérons maintenant une équation similaire

$$y'' + y = f(x), \quad (5.15)$$

avec les conditions $y(0) = 0$ et $y'(0) = 0$. Autrement dit, sans $f(x)$, la fonction y serait identiquement nulle. Il est plus intéressant ici de choisir pour $G(x, z)$ une fonction nulle pour $x < z$ et démarrante avec une valeur nulle et une pente unité pour $x > z$, soit

$$G(x, z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < z, \\ \sin(x - z) & \text{pour } x > z, \end{cases} \quad (5.16)$$

représentée sur la Fig.16.

Finalement la solution de l'équation est

$$y(x) = \int_0^x \sin(x - z) f(z) \, dz, \quad (5.17)$$

où le message est clair : ne contribuent au point $x > 0$ que les contributions antérieures à x . Par exemple, pour $f(x) = x$, on obtient $y(x) = x - \sin x$, ce qui peut être vérifié directement.

5.2.6 Cas d'une équation linéaire plus générale

Revenons à l'équation (5.1). On choisit comme base des solutions de l'équation homogène $c(t, t')$ et $s(t, t')$ qui satisfont (le point signifie la dérivation par rapport à la première variable, la seconde étant fixe) $c(t', t') = 1$, $\dot{c}(t', t') = 0$, $s(t', t') = 0$ et $\dot{s}(t', t') = 1$. Cette notation évoque $\cos t$ et $\sin t$ solutions de $\ddot{y} + y = 0$. On obtient facilement

$$x(t) = 0 \text{ si } t < t', \quad x(t) = s(t, t') \text{ si } t \geq t', \quad (5.18)$$

car la dérivée \dot{x} contient un saut d'ampleur unité à $t = t'$, qui se traduit par une fonction δ pour sa dérivée \ddot{x} .

En résumé, la solution est

$$y(t, t_0) = \Theta(t - t_0) s(t, t_0). \quad (5.19)$$

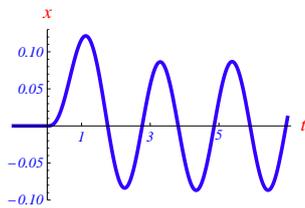


FIGURE 17 – Exemple d'oscillateur excité, résolu ici par la méthode de superposition de pics delta

Maintenant, supposons que l'excitation dans (5.1) commence seulement à $t = t_0$, et que l'oscillateur soit au repos à ce moment là (sinon, on ajoutera un terme $x_0 c(t, t_0) + \dot{x}_0 s(t, t_0)$ à la solution). Le second membre $g(t)$ peut se lire comme (5.9), avec une borne inférieure t_0 , et donc par l'argument de linéarité invoqué plus haut, la solution, valable pour ce second membre $g(t)$ est

$$x(t) = \int_{t_0}^{+\infty} g(t') \Theta(t - t') s(t, t') \, dt' = \int_{t_0}^t g(t') s(t, t') \, dt', \quad (5.20)$$

qui permet de calculer une solution particulière pour n'importe quel second membre.

Un exemple est donné ci-dessous, pour l'équation à coefficients constants avec $a = 4$, $b = \sqrt{3}$, et $g(t) = \sin(3t)$. On voit bien le régime transitoire qui démarre lentement, puis l'établissement de la solution stationnaire.

5.3 Applications aux équations non linéaires

La dernière partie de (5.20) donne bien l'interprétation physique : le signal à l'instant t est dû à la somme des excitations des temps antérieurs.

Pour les équations linéaires de la physique, la solution avec une fonction "delta" comme second membre est appelée *fonction de Green* du système, et *propagateur* pour les équations de physique quantique.

On peut généraliser l'usage des fonctions de Green pour les appliquer à cas non d'équations non linéaires, transformées en équations intégrales susceptibles d'être résolues par itérations.

Ce sera plus clair sur des exemples.

5.3.1 Méthode itérative pour l'oscillateur anharmonique

Considérons une fois encore l'oscillateur anharmonique (3.20), soit ($a > 0$ et $b > 0$)

$$\ddot{x}(t) + a^2 x(t) = -b x(t)^3 = 0, \quad (5.21)$$

avec, dans les applications numériques ultérieures, $a = 1$ et $b = 0.4$. Le dernier terme est mis exprès à droite pour être considéré comme un terme de source, ce qui permet de réécrire le problème comme une équation intégrale

$$x(t) = x_0 \cos(at) + v_0/a \sin(at) - b/a \int_0^t x(t_0)^3 \sin[a(t - t_0)] dt_0, \quad (5.22)$$

que l'on peut résoudre par itérations : on part de la solution sinusoïdale $x^{(0)}(t)$ correspondant à $b = 0$, et on construit successivement

$$x^{(n+1)}(t) = x^{(n)}(t) - b/a \int_0^t x^{(n)}(t_0)^3 \sin[a(t - t_0)] dt_0. \quad (5.23)$$

On voit sur la Fig. 18, pour un départ de $x = -1$ avec une vitesse nulle, la solution numérique et les approximations $x^{(0)}(t)$ et $x^{(1)}(t)$.

Noter une astuce qu'on retrouve par exemple en physique quantique. On sait facilement résoudre l'atome d'hélium avec noyau fixe en négligeant la répulsion entre les électrons. On peut ensuite inclure cette répulsion par itérations successives, par ce qu'on appelle "la théorie des perturbations". La convergence est assez bonne, mais on peut l'améliorer notablement en partant d'un atome d'hélium fictif où les électrons subissent seulement un potentiel central attractif de charge atténuée par effet d'écran, $Z < 2$. On traite ensuite la répulsion entre les électrons et le reste de l'attraction, $\propto (2 - Z) \sum 1/r_i$, comme une perturbation. On choisit Z , la charge effective du noyau, de sorte qu'au premier ordre, la répulsion et le reliquat d'attraction se compensent. Voir les bons livres de mécanique quantique ou de chimie *ab initio*. Ici, l'analogue est de chercher un terme linéaire $a_1^2 x(t)$ qui remplace "au mieux" $a^2 x(t) + b x(t)^3$. Plus précisément, a_1 est choisi de manière à ce que le terme correctif, $(a - a_1)x + b x^3$ ne modifie pas la période au premier ordre. Dans notre exemple numérique, $a_1 \simeq 1.155$ au lieu de $a = 1$ en négligeant le terme anharmonique. Réécrivons donc l'équation du mouvement

$$\ddot{x}(t) + a_1^2 x(t) = (a_1 - a)x(t) - b x(t)^3 = 0, \quad (5.24)$$

et par la même méthode, on peut construire les solutions successives

$$\begin{aligned} y^{(0)}(t) &= x_0 \cos(a_1 t) + v_0/a_1 \sin(a_1 t), \\ y^{(n+1)}(t) &= y^{(n)}(t) + \int_0^t \left[(a_1 - a)y^{(n)}(t_0) - b y^{(n)}(t_0)^3 \right] \sin[a_1(t - t_0)]/a_1 dt_0. \end{aligned} \quad (5.25)$$

On voit sur la Fig. 18 (droite) que la convergence est beaucoup plus rapide.

On pourra répéter la méthode avec d'autres exemples, par exemple le pendule simple, d'équation

$$\ddot{\vartheta}(t) + a^2 \sin \vartheta(t) = 0, \quad a^2 = g/l, \quad (5.26)$$

et comparer avec d'autres méthodes classiques permettant d'aller au-delà de l'approximation harmonique.

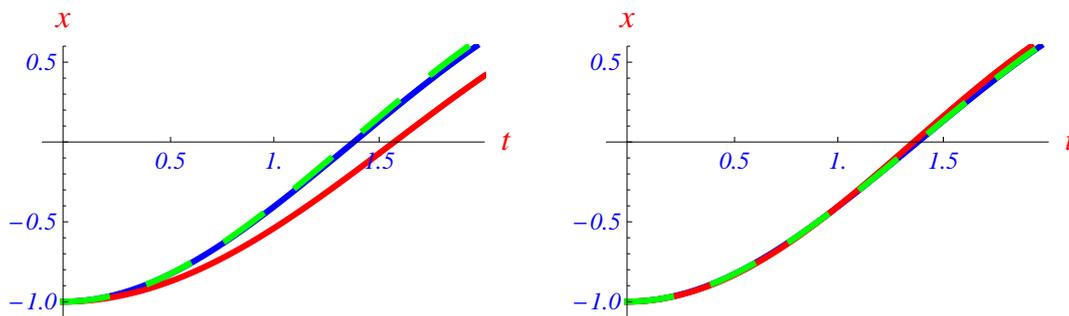


FIGURE 18 – Loi horaire de l'oscillateur anharmonique sur le premier quart de période, avec l'approximation harmonique (rouge), la solution numérique (bleue) et l'itération au premier ordre (pointillé vert). À gauche, on isole simplement le terme anharmonique. À droite, on part d'une solution harmonique optimisée.

5.3.2 Corde vibrante inhomogène

C'est un problème intéressant en soi, mais qui présente aussi de nombreuses analogies avec l'équation de Schrödinger : équation en x et t dont les modes stationnaires sont gouvernés par une équation du second ordre en s , discrétisation des pulsations ou énergies par imposition des conditions limites, ...

Rappelons l'équation de la corde. On suppose qu'elle reste proche de la position d'équilibre horizontale (la gravité est négligée, qui donnerait une flèche en forme de chaînette), et la pente locale reste faible. Soit T la tension horizontale, la même partout. Si $y(x, t)$ décrit la déviation verticale en fonction de la position x et du temps t , la force verticale exercée par la partie droite sur la partie gauche est $T \partial y / \partial x$. La loi de Newton, sur un élément de longueur δx et de masse $\rho(x) \delta x$ s'écrit

$$\rho(x) \delta x \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = T \left. \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right|_{x+\delta x} - T \left. \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right|_x, \quad (5.27)$$

et en passant à la limite, on obtient l'équation bien connue

$$\rho(x) \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2}. \quad (5.28)$$

Si la masse linéique est constante, $\rho(x) = a$, cette équation admet parmi ses solutions des ondes progressives $y(x, t) \propto \cos(\omega t \pm kx + \phi)$ de n'importe quelle pulsation ω pourvu que le nombre d'onde lui soit reliée par $k = \omega/c$, où la vitesse de propagation est indépendante de la fréquence, et donnée par $c = \sqrt{T/a}$. Pour une corde de longueur L , tendue entre les points $x = \pm L/2$, on peut chercher les modes stationnaires $y(x, t) = \cos(\omega t + \phi) f(x)$ et $f(x) = A \sin[k(x + L/2)]$ satisfait l'équation de propagation si $k = \omega/c$ et la condition limite à gauche. Celle de droite donne $k = n \pi / L$ où $n \in \mathbb{N}^*$, et donc $\omega = n c \pi / L$, avec un fondamental et des harmoniques.

Corde avec masselotte Imaginons d'abord un fil de pêcheur, de masse linéique uniforme a , avec au milieu un plomb ponctuel de masse m .

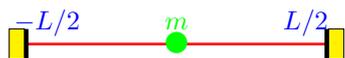


FIGURE 19 – Corde vibrante avec masse ajoutée

On peut traiter le problème à partir de l'équation de la corde sur chacune des deux portions, l'équation de Newton pour le plomb et des conditions de raccordement appropriées. Voilà, assez rapidement, le déroulé. On cherche une solution

$$Y(x, t) = y(x) \cos(\omega t), \quad (5.29)$$

avec annulation en $x = \pm L/2$, continuité en $x = 0$, et solution sinusoidale pour $x \neq 0$, ce qui est réalisé par

$$y(x) = \begin{cases} a \sin(k(L/2 + x)) & \text{si } x < 0, \\ a \sin(k(L/2 - x)) & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (5.30)$$

donc une discontinuité de dérivée $y'(0^+) - y'(0^-)$ dont le produit par T donne la force vertical exercée par la corde sur la masse. La loi de Newton donne donc

$$T [y'(0^+) - y'(0^-)] = -m \omega^2 y(0) \quad (5.31)$$

soit

$$\frac{2T}{c} \cos\left(\frac{\omega L}{2c}\right) = -m \omega \sin\left(\frac{\omega L}{2c}\right), \quad (5.32)$$

qui donne les valeurs possibles de la pulsation ω .

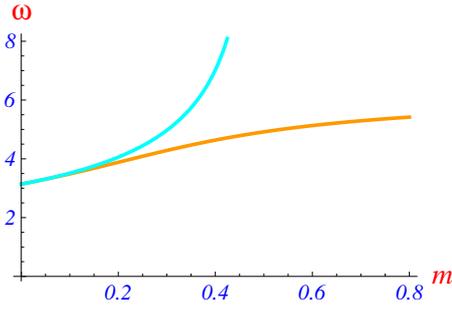


FIGURE 20 – Pulsation fondamentale d'une corde de longueur $L = 1$ de masse linéique $a = 1$, de tension $T = 1$, surchargée en son milieu d'une masse m . Courbe supérieure : calcul au premier ordre. Courbe inférieure : calcul exact.

La variante ci-dessous permet de mettre en œuvre la distribution de Dirac. Si on cherche une solution stationnaire de pulsation ω de (5.28), soit $Y(x, t) = \cos(\omega t + \phi) f(x)$, la partie spatiale vérifiera

$$T f''(x) + \omega^2 (a + m \delta(x)) f(x) = 0. \quad (5.33)$$

Ici, au contraire des fonctions du temps, pour lesquelles on peut chercher à exprimer la causalité, on n'a pas de raison de privilégier $x > 0$ ou $x < 0$. La fonction $|\sin(kx)|/(2k)$ satisfait l'équation ci-dessus en dehors de $x = 0$ et présente un saut unitaire de la dérivée, ce qui se traduit par un pic delta pour la dérivée seconde. En ajustant les coefficients, on trouve la solution

$$f(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) + \omega^2 m A |\sin(kx)| / (2kT), \quad \omega = ck \quad (5.34)$$

et les conditions limites en $x = \pm L/2$ donnent $B = 0$ et

$$\cos(kL/2) + (m/T) (k/(2a)) \sin(kL/2) = 0, \quad (5.35)$$

qui permet de calculer k puis ω .

Puisqu'on dispose d'une solution exacte, on peut tester une approximation. Elle consiste à chercher la meilleure corde homogène qui donne une fréquence qui n'est pas modifiée par la correction au premier ordre.

Pour le cas général d'une distribution de masse $a(x)$, la partie spatiale $f(x)$ associée à une pulsation ω doit satisfaire

$$f''(x) + \frac{a(x)\omega^2}{T} f(x) = 0, \quad (5.36)$$

décomposée en

$$f''(x) + \bar{k}^2 f(x) = \bar{k}^2 (1 - a(x)/\bar{a}) f(x), \quad (5.37)$$

qui se transforme en équation intégrale

$$f(x) = A \sin[\bar{k}(x + L/2)] + \bar{k} \int_{-L/2}^x (1 - a(x')/\bar{a}) \sin[\bar{k}(x - x')] f(x') dx' \quad (5.38)$$

En partant de $\bar{k} = \pi/L$, qui satisfait aux conditions limites, on choisit \bar{a} de manière à ce que le second terme maintienne au premier ordre (quand f est remplacé dans l'intégrale par le premier terme) l'annulation de $f(x)$ en $x = L/2$. On obtient successivement

$$\bar{a} \int_{-L/2}^{+L/2} \sin[\bar{k}(x + L/2)] \sin[\bar{k}(L/2 - x)] dx = \int_{-L/2}^{+L/2} a(x) \sin[\bar{k}(x + L/2)] \sin[\bar{k}(L/2 - x)] dx \quad (5.39)$$

puis la vitesse moyenne $\bar{c} = \sqrt{T/\bar{a}}$ et enfin la pulsation approchée $\omega_{app} = \bar{k} \bar{c}$. La figure 20 montre la comparaison entre les valeurs exacte et approchée de ω quand m varie.

5.3.3 Équation de Schrödinger

Prenons le cas d'un problème de mécanique quantique à une dimension

$$-\psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.40)$$

où le potentiel V et l'énergie E ont absorbé le facteur $2m/\hbar^2$.

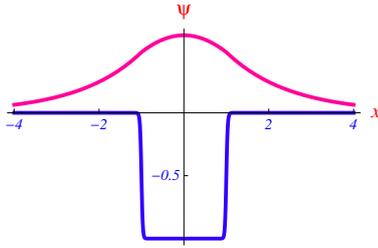


FIGURE 21 – État fondamental dans un puits de largeur 2 et de profondeur 1.

Parmi les cas exactement solubles figurent le puits carré, qui requiert un ajustement d'une solution exponentielle à l'extérieur et sinusoïdale à l'intérieur. L'énergie est la solution d'une équation qu'on peut résoudre par itérations ou d'autres procédés numériques. Voir, par exemple, la figure 21.

Quand la profondeur augmente, la fonction d'onde est de plus en plus localisée dans le puits, et à la limite

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } |x| > a, \\ 0 & \text{si } |x| < a, \end{cases} \quad (5.41)$$

avec toutes les précautions d'usage, car la variation trop brusque du potentiel n'est pas très physique. La solution non normalisée $\{\psi_0(x) = \cos(\pi x/(2a)), E_0 = \pi^2/(4a^2)\}$ cor-

respond à l'état fondamental.

Imaginons maintenant un petit potentiel résiduel à l'intérieur de la cavité, par exemple

$$v(x) = \alpha x^2. \quad (5.42)$$

À l'intérieur du puits, l'équation de Schrödinger s'écrit

$$\psi''(x) + (E - \bar{v})\psi(x) = (v(x) - \bar{v})\psi(x), \quad (5.43)$$

où l'on a, comme dans les exemples précédents, décomposé le terme perturbateur en un potentiel moyen \bar{v} avec lequel l'équation est soluble (ici une constante), et le reste. En posant $k^2 = E - \bar{v}$, avec $k > 0$, on retrouve que $k = \pi/(2a)$ est la façon la plus économique de satisfaire aux conditions limites quand le membre de droite est négligé dans l'équation intégral-différentielle équivalente à (5.43) qui donne $\psi(x)$

$$\psi(x) = A \cos(kx) + \int_{-a}^x \sin[k(x-x')] [v(x') - \bar{v}] \frac{\psi(x')}{k} dx'. \quad (5.44)$$

Pour que la condition limite à droite reste satisfaite au premier ordre, c'est-à-dire quand $\psi(x)$ est remplacé dans l'intégrale par $A \cos(kx)$, on doit imposer que

$$E - E_0 = \bar{v} = \frac{\int_{-a}^{+a} \cos^2(kx) v(x) dx}{\int_{-a}^{+a} \cos^2(kx) dx}. \quad (5.45)$$

qui donne la correction d'énergie comme valeur moyenne du potentiel supplémentaire avec comme mesure la densité (carré de la fonction d'onde) obtenue dans le problème non perturbé. Le résultat est très général.

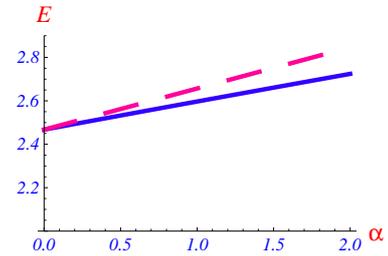


FIGURE 22 – État fondamental dans un puits infini de largeur 2, avec un potentiel résiduel αx^2 . En bleu, solution exacte, en rouge pointillé, traitement au premier ordre de la perturbation.

5.3.4 Lien avec la théorie des perturbations

En algèbre linéaire, on peut exprimer les valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur $A + \epsilon B$ comme développement limité en puissances successives de ϵ . Ces méthodes sont largement appliquées en mécanique quantique, sous le nom de "théorie des perturbations". Le cas le plus simple est celui d'opérateurs de dimension finie n , agissant dans \mathbb{R}^n , réels et symétriques, à valeurs propres distinctes. Alors, si on part de l'équation aux valeurs propres et imagine un développement limité de la valeur propre et du vecteur propre,

$$(A + \epsilon B)(X_0 + \epsilon X_1 + \dots) = (E_0 + \epsilon E_1 + \dots)(X_0 + \epsilon X_1 + \dots), \quad (5.46)$$

on peut identifier à chaque ordre. On impose préalablement que les corrections au vecteur propre sont orthogonales à X_0 , par un choix de la normalisation, et on obtient, à l'ordre zéro $A X_0 = E_0 X_0$ et à l'ordre 1,

$$(A - E_0) X_1 = (E_1 - B) X_0 \quad (5.47)$$

très semblable à l'équation (5.43). En prenant le produit scalaire avec X_0 , on trouve la correction à l'énergie

$$E_1 = \frac{(X_0, B X_0)}{(X_0, X_0)}, \quad (5.48)$$

comme dans (5.45).

Pour le vecteur propre, il faut faire un peu attention. L'opérateur $A - E_0$ n'est pas inversible, par définition d'une valeur propre. Mais est inversible sa restriction au sous-espace orthogonal à l'espace propre associé à la valeur propre E_0 . On peut écrire très schématiquement

$$X_1 = "(E_0 - A)^{-1}" B X_0, \quad (5.49)$$

qui généralise le second terme de (5.44). L'inverse de $E - A$, où A est l'hamiltonien, est appelé propagateur.

On peut écrire le résultat ci-dessus de manière plus rigoureuse à l'aide de projecteurs. Soit P_0 le projecteur sur l'état d'énergie E_0 , et Q_0 le projecteur complémentaire. On peut remplacer X_1 par $Q_0 X_1$. En multipliant (5.47) par Q_0 , on peut résoudre exactement dans le sous-espace complémentaire de ce sous-espace propre, et écrire

$$X_1 = Q_0 [Q_0 (E_0 - A) Q_0]^{-1} B X_0, \quad (5.50)$$

et on remarque que l'énergie E_1 est éliminée.

6 Équations de Sturm–Liouville

6.1 Rappels sur les matrices symétriques ou hermitiennes

Plaçons nous d'abord dans \mathbb{R}^n muni de la métrique euclidienne habituelle. Si A est une matrice réelle et symétrique $n \times n$, alors

- Ses valeurs propres λ_i sont réelles,
- Des vecteurs propres associés à des valeurs propres différents sont orthogonaux,
- La matrice est diagonalisable en base orthonormée.

Par exemple, la matrice de Pauli σ_x , avec des notations évidentes

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1, \quad X_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

se transforme en σ_z par simple rotation.

Noter que certaines matrices non explicitement symétriques peuvent d'y ramener par changement de métrique, en modifiant l'échelle des axes. Ainsi

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \rightarrow A' = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{6} \\ \sqrt{6} & 5 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

et plus généralement de toute matrice 2×2 dont les éléments non-diagonaux ont même signe.

La démonstration des propriétés spectrales des matrices réelles symétriques est classique, mais il est utile de la rappeler pour pouvoir ensuite voir l'analogue dans le cas des équations de Sturm–Liouville. La propriété de symétrie dit que $(X', AX) = (AX', X)$ pour tout X et X' , au lieu de $(\tilde{A}X', X)$ dans le cas général, si \tilde{A} dénote la transposée de A . Si X_i est un vecteur propre associé à la valeur propre λ_i , alors

$$0 = (X_i^*, AX_i) - (A^* X_i^*, X_i) = (\lambda_i^* - \lambda_i)(X_i^*, X_i) \quad (6.3)$$

ce qui démontre la première propriété.

Pour $\lambda_1 \neq \lambda_2$, par exemple,

$$0 = (X_2, AX_1) - (AX_2, X_1) = (\lambda_1 - \lambda_2)(X_2, X_1) \quad (6.4)$$

ce qui montre que $(X_2, X_1) = 0$.

Pour la dernière propriété, on peut raisonner par récurrence. Supposons la propriété vraie jusqu'à la dimension $n - 1$ et considérons une matrice réelle symétrique A de dimension n . Le polynôme caractéristique, de degré n , a au moins une racine, qui est réelle, soit λ . Soit X un vecteur propre associé et \mathcal{E} le sous-espace orthogonal. Comme AX n'a pas de composante sur \mathcal{E} et que A est symétrique, pour tout vecteur $Y \in \mathcal{E}$, AY n'a pas de composante sur X . Autrement dit, A se décompose en un bloc diagonal 1×1 de valeur λ et un bloc $(n - 1) \times (n - 1)$. En diagonalisant ce dernier, on a la résultat.

Énonçons sans démonstration (elle est très similaire) le résultat pour les matrices hermitiennes. On se place dans \mathbb{C}^n , avec la métrique habituelle $(Y, X) = Y_1^* X_1 + \dots + Y_n^* X_n$. Pour toute matrice A , on définit l'hermitienne conjuguée A^\dagger comme la complexe conjuguée de la transposée. Une matrice est dite hermitienne si $A^\dagger = A$: ses valeurs propres sont réelles, ses vecteurs propres sont orthogonaux et forment un ensemble complet, ce qui signifie que si on normalise les vecteurs propres, la matrices est diagonalisable par transformation unitaire.

À titre d'exemple et d'exercice, on peut diagonaliser

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Un autre exemple est

$$A = \begin{pmatrix} 3 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 3 \end{pmatrix}, \quad (6.6)$$

qui satisfait $\tilde{A}^* = A$ (la matrice est égale à la transposée de la complexe conjuguée.) On pourra diagonaliser cette matrice à titre d'exercice.

Noter que la théorie des opérateurs linéaires représentés par des matrices réelles et symétriques est relié à celle des formes quadratiques associées elles-aussi à de telles matrices,

$$\Phi(x_1, \dots, x_n) = a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots = \tilde{X}.A.X, \quad \tilde{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}. \quad (6.7)$$

Par exemple, la diagonalisation de σ_x implique l'identité

$$2xy = \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 - \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2, \quad (6.8)$$

mais il y a évidemment des manières plus diverses de réécrire les formes quadratiques comme des combinaisons linéaires de carrés. En mécanique classique ou quantique, par exemple, il est fait beaucoup usage de l'identité de König qui permet d'exprimer la somme des énergies cinétiques individuelles comme un terme de mouvement collectif complété par une contribution du mouvement relatif,

$$\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} \left(\frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\right)^2. \quad (6.9)$$

Noter finalement que la diagonalisation en base orthonormée des matrices hermitiennes implique une propriété de stationnarité qui est la clé des calculs dits "variationnels" en mécanique. Soit $V = X + \epsilon Y$ où ϵ est un nombre petit, X un vecteur propre normé associé à la valeur propre λ et Y un vecteur orthogonal. Pour $\epsilon = 0$, on a $AX = \lambda X$ et $\langle X|X \rangle = 1$. Il est facile de voir que $\langle V, V \rangle = 1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ et que $\langle V, AV \rangle = \lambda + \mathcal{O}(\epsilon^2)$.

Les opérateurs différentiels que nous considérerons plus bas agissent dans des espaces de dimension infinie. On généralisera facilement le concept de d'opérateur symétrique ou d'hermitien, qui donnera des valeurs propres réelles et des sous-espaces propres orthogonaux. Ce qui sera plus délicat, de sera de montrer que la suite des valeurs propres des opérateurs de Sturm–Liouville tend vers l'infini, et que les vecteurs propres forment un ensemble complet, sur lequel de larges classes de fonctions peuvent être développées.

6.2 Wronskien

Un outil très utile pour les équations différentielles linéaires est le *wronskien* de deux fonctions

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_1' y_2. \quad (6.10)$$

dont la nullité en tout point implique que y_1 et y_2 sont proportionnelles. Inversement $W \neq 0$ signifie que les fonctions sont indépendantes. Pour une équation différentielle linéaire, $W(y_1, y_2) \neq 0$ pour deux solutions signifie qu'il ne s'agit pas de la même solution dupliquée à un facteur près.

Pour une équation linéaire du second ordre sans dérivée première,

$$y''(x) + a(x)y(x) = 0, \quad (6.11)$$

satisfaite par $y_1(x)$ et $y_2(x)$, on déduit facilement

$$y_1(x)y_2''(x) - y_1''(x)y_2(x) = dW(y_1, y_2)/dx = 0, \quad (6.12)$$

c'est-à-dire que le wronskien reste constant : deux solutions "bien différentes" le restent.

Pour une équation avec dérivée première, l'évolution du wronskien est un peu plus subtile. Soit

$$y''(x) + b(x)y'(x) + a(x)y(x) = 0, \quad (6.13)$$

la nouvelle équation, et encore y_1 et y_2 deux solutions. Par combinaison (on multiplie par y_1 l'équation pour y_2 , par y_2 celle pour y_1 et on retranche)

$$dW(y_1, y_2)/dx + b(x)W(y_1, y_2) = 0, \quad (6.14)$$

soit pour $w(x) = W(y_1, y_2)$,

$$w(x) = w(x_0) \exp \left[- \int_{x_0}^x b(x') dx' \right], \quad (6.15)$$

qui ne s'annule que si l'intégrale diverge. Donc deux solutions indépendantes le restent, mais peuvent diverger ou converger. Par exemple, pour une oscillateur amorti avec $a > 0$ et $b > 0$ constants, les solutions tendent exponentiellement vers zéro et ont donc un wronskien nul à l'infini.

6.3 Définition d'une équation de Sturm–Liouville

Il s'agit de certaines équations différentielles et aux valeurs propres du type

$$p(x) y''(x) + r(x) y'(x) + q(x) y(x) + \lambda \rho(x) y(x) = 0, \quad (6.16)$$

$q(x)$ et $\rho(x)$ sont des fonctions réelles de la variable réelle x , complétées par des conditions limites, une relation entre $p(x)$ et $r(x)$ et des conditions de positivité sur p et ρ .

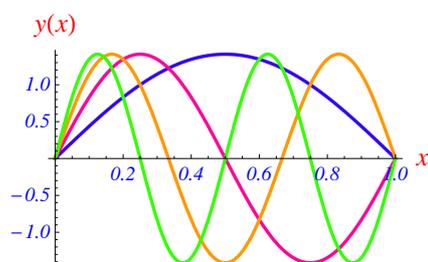
On peut réécrire cette équation comme

$$\mathcal{L} y = \lambda \rho y, \quad \mathcal{L} = - \left[p(x) \frac{d^2}{dx^2} + r(x) \frac{d}{dx} + q(x) \right], \quad (6.17)$$

avec des conditions qui donnent à \mathcal{L} des propriétés qui généralisent celles des matrices symétriques ou hermitiennes.

Voyons d'abord quelques exemples simples, ou du moins connus, et nous essayerons ensuite de dégager des résultats plus généraux.

6.4 Corde vibrante



Avec des unités appropriées qui permettent de fixer à la valeur unité la longueur et le rapport de la tension masse linéique, on a une équation de propagation $\partial_{tt} u(x, t) = \partial_{xx} u(x, t)$, avec $u(0, t) = u(1, t) = 0$, et si l'on cherche un mode stationnaire $u(x, t) = \exp(i \omega t) y(x)$, avec

$$\begin{aligned} y''(x) + \lambda y(x) &= 0, \\ \lambda &= \omega^2, \\ y(0) &= y(1) = 0, \end{aligned} \quad (6.18)$$

FIGURE 23 – Premiers modes d'une corde vibrante les solutions sont très connues, $\lambda = n^2$, où $n \in \mathbb{N}^*$ est un entier positif, et $y_n(x) = \sqrt{2} \sin(n \pi x)$. Voir figure 23.

On vérifie directement les propriétés suivantes :

1. les valeurs propres sont réelles.
2. elles forment une suite λ_n , bornée inférieurement et tendant vers $+\infty$ quand $n \rightarrow \infty$.
3. les fonctions propres y_n sont orthogonales,
4. y_n possède $(n - 1)$ zéros dans $]0, 1[$,
5. les zéros de y_{n+1} et de y_n sont intercalés, soit $0 < x_1^{(n+1)} < x_1^{(n)} < x_2^{(n+1)} < x_2^{(n)} < \dots < x_{n-1}^{(n+1)} < x_{n-1}^{(n)} < x_n^{(n+1)}$

La démonstration à partir de l'équation est instructive, car elle permet des généralisations à des cas où l'on ne dispose pas d'une solution explicite.

En combinant

$$y_i'' + \lambda_i y_i = 0, \quad \text{et} \quad y_j'' + \lambda_j y_j = 0, \quad (6.19)$$

on obtient

$$dW(y_i^*, y_j)/dx + (\lambda_i^* - \lambda_j) y_i^* y_j = 0, \quad (6.20)$$

et par intégration,

$$(\lambda_i^* - \lambda_j) \int_0^1 y_i^* y_j dx = 0. \quad (6.21)$$

Donc si $i = j$, comme l'intégrale est positive, on voit que λ_i est réel. Si $i \neq j$, les fonctions sont orthogonales, au sens du produit hermitien défini par cette intégrale. Comme l'équation différentielle (6.18) est réelle, on peut choisir y_n réel, ce que nous supposons désormais.

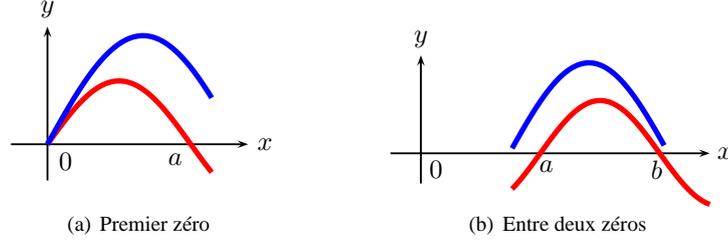


FIGURE 24 – Disposition des zéros de deux solutions de valeurs propres λ_1 (rouge) et $\lambda_2 > \lambda_1$ (bleu).

En exploitant (6.20) entre 0 et x , on obtient

$$-W(y_2(x), y_1(x)) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^x y_1 y_2 dx = 0. \quad (6.22)$$

Supposons que $\lambda_2 > \lambda_1$ et que a soit le premier zéro de y_1 . Pour $x = a$, on a

$$-y_2(a)y_1'(a) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^a y_1 y_2 dx = 0. \quad (6.23)$$

si on choisit que y_1 soit positif entre 0 et a , avec donc $y_1'(a) < 0$, on voit que l'hypothèse $y_2 \geq 0$ pour $0 \leq x \leq a$ est incompatible avec l'équation (6.23). Voir figure 24(a).

Si l'on recommence entre deux zéros successifs de y_1 , voir figure 24(b) on a

$$-y_2(a)y_1'(a) - y_2(b)y_1'(b) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^x y_1 y_2 dx = 0. \quad (6.24)$$

et le scénario $y_1 \geq 0$ et $y_2 \geq 0$ entre a et b , $y_1'(a) > 0$ et $y_1'(b) < 0$ est exclu.

En conclusion, un état propre avec valeur propre $\lambda_i > \lambda_1$ s'annule au moins une fois entre les zéros de $y_1(x)$. En fait une analyse plus poussée montre que le nombre de zéros augmente d'une unité quand on passe d'une valeur propre à la valeur propre immédiatement supérieure, le fondamental étant sans nœud. Nous ne donnerons qu'une indication : l'orthogonalité est en fait plus générale. Pour toute valeur réelle λ , on peut définir une fonction $y(\lambda, x)$ qui satisfait à la condition limite à gauche. Et on aura la généralisation de (6.23) suivante

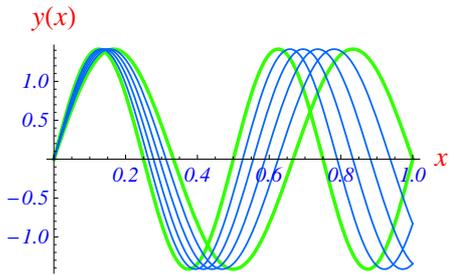


FIGURE 25 – Évolution continue d'un état propre au suivant : les nœuds se déplacent progressivement vers la gauche.

$$-W(y(\lambda, x), y(\lambda', x)) + (\lambda - \lambda') \int_0^x y(\lambda, x) y(\lambda', x) dx = 0, \quad (6.25)$$

avec la même conséquence : si $\lambda' > \lambda$, $y(\lambda', x)$ possède au moins un nœud entre deux zéros de $y(\lambda, x)$.

Si $\lambda \nearrow$ en partant de λ_i , le zéro en $x = b$, et les autres zéros de y_i se déplacent continûment vers la gauche, jusqu'à ce qu'un nouveau zéro apparaisse en $x = b$, lorsque λ atteint la valeur λ_{i+1} . Voir Fig. 25.

6.5 Polynômes de Legendre

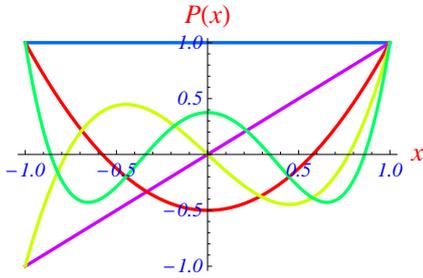


FIGURE 26 – Allure de premiers polynômes de Legendre.

Chacun est solution de l'équation

$$-[(1-x^2)y']' + \frac{m^2}{1-x^2} = \lambda y = 0, \quad (6.26)$$

qui est de type SL. Le cas habituel est $m = 0$. Pour m entier non nul, on parlera des polynômes de Legendre *associés*.

Les conditions limites sont telles que y et y' sont finis quand $x \rightarrow \pm 1$, ce qui détermine les valeurs propres $\lambda = \ell(\ell + 1)$, avec $\ell \in \mathbb{N}$. La normalisation habituelle des polynômes de Legendre est $P_\ell(1) = 1$.

Pour $m = 0$, la solution est donnée par la formule de Rodriguez

$$\lambda = \ell(\ell + 1), \quad \ell \in \mathbb{N}, \quad P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell, \quad (6.27)$$

avec les résultats connus pour $n = 0, 1, \dots$

$$P_n(x) = \left\{ 1, x, \frac{1}{2} (3x^2 - 1), \frac{1}{2} (5x^3 - 3x), \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3), \dots \right\}, \quad (6.28)$$

avec l'allure donnée sur la figure 26, réduite à $[-1, +1]$, où l'on peut observer la normalisation $P_n(1) = 1$, l'alternance de fonctions paires et impaires, le nombre croissant de zéros, et leur entrelacement pour deux valeurs successives de n . L'orthogonalité s'exprime par

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \delta_{n,m} \frac{2}{2n+1}. \quad (6.29)$$

Noter aussi la fonction génératrice

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) z^n. \quad (6.30)$$

Les polynômes de Legendre constituent le prototype le plus simple et le plus connu d'ensemble de polynômes orthogonaux.

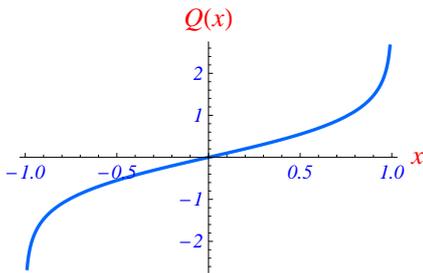


FIGURE 27 – Allure de $Q_0(x)$.

Pour comprendre le rôle des conditions limites, indiquons la forme de l'autre solution, choisie comme

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}, \quad (6.31)$$

et plus généralement

$$Q_n(x) = \frac{1}{2} P_n(x) \ln \frac{1+x}{1-x} - W_{n-1}(x), \quad (6.32)$$

où W_n est un polynôme de degré n . L'allure de Q_0 est donnée sur la figure 27. La solution la plus générale pour $m = 0$ est donc $\alpha P_0(x) + \beta Q_0(x)$. Imposer la régularité en $x = \pm 1$ sélectionne donc $\beta = 0$.

Une application importante des polynômes de Legendre et autres polynômes orthogonaux est l'interpolation de fonctions et le calcul approché d'intégrales. D'une manière générale, une fonction définie sur au moins $[-1, +1]$ peut être interpolée de manière polynomiale à partir de sa valeur en n points $\{x_i\}$, soit

$$F(x) = \sum_{i=1}^n F(x_i) \frac{(x-x_1) \cdots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_i-x_1) \cdots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \cdots (x_i-x_n)}, \quad (6.33)$$

ce qui permet d'estimer une valeur approchée en d'autres points et une valeur approchée de l'intégrale. En utilisant comme points les zéros du polynôme de Legendre $P_n(x)$, soit

$$F(x) = \sum_{i=1}^n F(x_i) \frac{P_n(x)}{(x - x_i) P_n'(x_i)}, \quad (6.34)$$

on obtient remarquablement une valeur approchée de l'intégrale

$$\int_{-1}^{+1} F(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n F(x_i) w_i \quad (6.35)$$

qui est exacte pour tout polynôme de degré $2n - 1$ ou inférieur, ce qui est très économique. Les logiciels de calculs stockent bien-sûr les valeurs des abscisses $\{x_i\}$ et des poids associés $\{w_i\}$, pour lesquels on peut démontrer que

$$w_i = \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(x)}{(x - x_i) P_n'(x_i)} dx = -\frac{2}{(n + 1) P_n'(x_i) P_{n+1}(x_i)}. \quad (6.36)$$

6.6 Polynômes d'Hermite

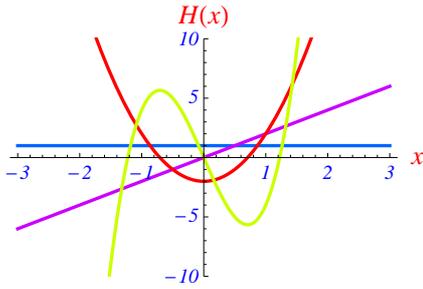


FIGURE 28 – Allure des premiers $H_n(x)$.

Une définition possible est

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2/2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2/2). \quad (6.37)$$

qui donne pour les premiers (voir figure 28)

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \end{aligned} \quad (6.38)$$

La normalisation est telle que le coefficient de x^n est 2^n . Ces polynômes sont orthogonaux, mais pas orthonormés, vis-à-vis de l'intégration sur \mathbb{R} avec un poids $\exp(-x^2)$. Ils sont d'ailleurs utilisés, sous cette forme ou sous quelques variantes, en statistique. La relation d'orthogonalité est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) \exp(-x^2) dx = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{nm}. \quad (6.39)$$

H_n est une des solutions de

$$u'' - 2x u' = -2\lambda u, \quad (6.40)$$

pour $\lambda = n$. Pour d'autres valeurs de λ , il n'y a pas de solution polynomiale. L'autre solution implique la fonction erreur et des polynômes.

Une autre forme de cette équation différentielle est

$$-[\exp(-x^2/2) u]'' + x^2 [\exp(-x^2/2) u] = (2\lambda + 1) [\exp(-x^2/2) u], \quad (6.41)$$

où l'on reconnaît l'oscillateur harmonique de la mécanique quantique à une dimension.

Les polynômes $H_n(x)$ servent à interpoler des fonctions et à calculer des intégrales avec un poids $\exp(-x^2)$. La formule à n points, dite de Gauss-Hermite est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-x^2) dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i), \quad (6.42)$$

où les x_i sont les zéros de H_n et les poids donnés par

$$w_i = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 [H_{n-1}(x_i)]^2} . \quad (6.43)$$

Revenons aux équations différentielles (6.40) et (6.41), et voyons comment la “quantification” apparaît si on impose que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x) \exp(-x^2/2) = 0$. Remarquons d’abord que si u est solution, sa partie paire et sa partie impaire (l’une peut être nulle !) sont solutions séparément. On peut donc chercher d’abord une solution paire, sous la forme

$$u(x) = a_0 + a_1 x^2 + \dots + a_i x^{2i} + \dots , \quad (6.44)$$

qui donne la relation de récurrence

$$a_{i+1} = \frac{2(2i - \lambda)}{(2i + 2)(2i + 1)} a_i . \quad (6.45)$$

Dans le cas général, $a_{i+1}/a_i \rightarrow 1/(i + 1)$ comme pour le développement en séries de $\exp(x^2)$ et nous admettons qu’effectivement $u(x)$ diverge comme $\exp(x^2)$ et que les conditions limites imposées ne sont pas satisfaites. Par contre si λ est un entier pair, soit $\lambda = 2n$, la série s’arrête au rang $i = n$ et nous obtenons un polynôme pair.

De même, la recherche d’une solution impaire donne

$$u(x) = \sum b_i x^{2i-1} , \quad 2i(2i + 1) b_{i+1} = 2[(2i - 1) - \lambda] b_i , \quad (6.46)$$

et l’on retrouve le même scénario d’explosion en $\exp(x^2)$ sauf si $\lambda = 2n - 1$ où $n \in \mathbb{N}^*$.

Inversement, si on part d’une solution régulière à grand x , on trouve une solution qui sera en général irrégulière quand $x \rightarrow 0$ sauf pour les valeurs déjà identifiées du paramètre λ . Pour les experts, une solution de (6.40) est la fonction hypergéométrique de Kummer $U(-\lambda/2, 1/2, x^2)$ qui croît très modérément à l’infini et donc satisfait à nos conditions limites, mais qui se comporte en $|x|/\Gamma(-\lambda/2)$ quand $x \rightarrow 0$. Cette discontinuité de dérivée doit évidemment sauter, ce qui se passe si Γ , la fonction qui généralise la fonction factorielle des entiers, devient infinie. C’est le cas pour $-\lambda/2 = 0, -1, -2, -3, \dots$, et on retrouve les polynômes de Hermite pour ces valeurs.

6.7 Autres polynômes orthogonaux d’usage fréquent

Les polynômes de Laguerre, que l’on rencontre dans les états liés coulombiens sont orthogonaux dans $[0, +\infty[$, avec une fonction poids $\exp(-x)$.

Les polynômes de Chebyshev de premier ou second type sont orthogonaux dans $[-1, +1]$, avec une fonction poids $(1 - x^2)^{\mp 1/2}$, respectivement. Ce sont des cas particuliers des polynômes de Jacobi, pour lesquels la fonction poids est $(1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$. Dans chacun des cas, ils sont la solution polynomiale (à un facteur près) d’une équation différentielle du type

$$g_2(x) y''(x) + g_1(x) y'(x) + a_n y(x) = 0 , \quad (6.47)$$

où a_n ne prend que des valeurs discrètes indicées par l’entier n . Entre deux valeurs successives, il n’y a pas de solution polynomiale. L’équation (6.47) peut se ramener à une forme de Sturm–Liouville.

6.8 Forme canonique de l’équation de Sturm–Liouville

Il y a plusieurs manières de réécrire une équation linéaire du second ordre. Nous avons par exemple déjà évoqué l’oscillateur amorti

$$y''(x) + 2b y'(x) + a y(x) = 0 , \quad (6.48)$$

qui peut se réécrire

$$y(x) = \exp(-bx) u(x) , \quad u''(x) + (a - b^2) u(x) = 0 , \quad (6.49)$$

correspondant à un système sans amortissement.

La forme canonique d'une équation de Sturm–Liouville est

$$p(x) y''(x) + r(x) y'(x) + q(x) y(x) + \lambda \rho(x) y(x) = 0, \quad r(x) = p'(x) \quad (6.50)$$

avec $p(x) \geq 0$ et $\rho(x) > 0$.

Si la condition $r(x) = p'(x)$ n'est pas satisfaite, on peut s'y ramener. On multiplie l'équation par $f(x)$ et on cherche à ce que $f(x) r(x) = [f(x) p(x)]'$, ce qui détermine $f(x)$ à un facteur constant près.

Par exemple, l'équation de Bessel :

$$x^2 y'' + x y' + (\lambda^2 x^2 - \nu^2) y = 0, \quad (6.51)$$

peut se réécrire

$$(x y')' + (\lambda^2 x - \nu^2/x) y = 0. \quad (6.52)$$

6.9 Conditions aux limites pour l'hermiticité

La solution n'est déterminée que si l'équation différentielle est complétée par des conditions limites. Noter cependant que pour une équation de Schrödinger à une dimension, la condition d'annulation rapide pour $x \rightarrow \pm\infty$ ne détermine la solution, quand elle existe, qu'à une constante multiplicative près, qui correspond à un choix de normalisation.

Supposons que l'on cherche des solutions dans un intervalle $[a, b]$, fini d'abord, qui pourra ensuite être rendu infini. Imposer seulement $y'(a)/y(a)$ donne en général (à un facteur près) une solution, soit $y_1(x)$ pour toute valeur de λ . De même, imposer $y'(b)/y(b)$ donne une autre solution, soit $y_2(x)$. Imposer *simultanément* $y'(a)/y(a)$ et $y'(b)/y(b)$ revient à chercher s'il existe des valeurs de λ pour lesquelles $y_1(x)$ et $y_2(x)$ sont proportionnelles, et la réponse est en général négative.

Considérons par exemple $y''(x) + \lambda y(x) = 0$ sur $[0, 1]$. La condition $y'(0)/y(0) = 0$ fixe $y_1(x) = \cos(\sqrt{\lambda}x)$, tandis que $y'(1)/y(1) = \infty$ détermine $y_2(x) = \sin(\sqrt{\lambda}(x-1))$ qui ne sont évidemment compatibles que si $\sqrt{\lambda}$ est un multiple de $\pi/2$.

Voyons le cas général. On veut obtenir, pour $\mathcal{L}y = (py)'+qy$, que

$$\int_a^b y_2^*(\mathcal{L}y_1) dx = \left[\int_a^b y_1^*(\mathcal{L}y_2) dx \right]^*. \quad (6.53)$$

Prenons le cas où tout est réel pour alléger l'écriture. Le cas complexe suit le même raisonnement, mais il faut bien-sûr imposer la réalité de p et q . Par intégration par parties,

$$\int_a^b [y_2 (\mathcal{L}y_1) - y_1 (\mathcal{L}y_2)] dx = [y_2 p y_1' - y_1 p y_2']_a^b. \quad (6.54)$$

L'orthogonalité globale ne nécessiterait que $[\dots]_a^b = 0$, mais pour bénéficier de l'“orthogonalité locale”, qui conduit au théorème nodal, on impose l'annulation *séparément* en $x = a$ et en $x = b$. Ce qui est réalisé, on peut s'en convaincre rapidement si $\exists \alpha \in \mathbb{R}$ et $\exists \beta \in \mathbb{R}$ tels que

$$y(a) \cos \alpha - p(a) y'(a) \sin \alpha = 0, \quad y(b) \cos \beta - p(b) y'(b) \sin \beta = 0. \quad (6.55)$$

6.10 Résultats généraux pour les équations de Sturm–Liouville

- Les valeurs propres sont réelles,
- Les fonctions propres sont orthogonales sur $[a, b]$, avec la fonction de poids $\rho(x)$.
- Ces fonctions propres ont un nombre $n = 0, 1, \dots$ de nœuds, qui varie de manière monotone en fonction de la valeur propre,
- Les nœuds de deux fonctions propres successives sont entrelacés.

6.11 Application à l'équation radiale de Schrödinger

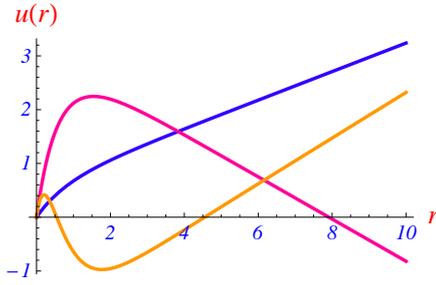


FIGURE 29 – Fonction d'onde radiale à énergie nulle pour $g = 1, 2$ et 8 dans le potentiel de Yukawa $-g \exp(-r)/r$.

Avant d'entreprendre le calcul complet, on peut étudier l'équation pour $E = 0$, en fonction de g (on se ramène au cas $a = 1$ par changement d'échelle, sans perte de généralité) :

$$-u''(r) - g \frac{\exp(-r)}{r} u(r) = 0, \quad u(0) = 0, \quad (6.58)$$

On le voit sur la figure 29, il y a un changement de régime entre $g = 1$ et $g = 2$. Pour $g = 1$, la fonction d'onde pour $E = 0$ ne s'annule pas, ce qui signifie qu'il n'y a pas d'état propre avec $E < 0$. Par contre, pour $g = 2$, il y a un zéro, et donc un état lié. Pour $g = 8$, un second état lié est apparu. Bien-sûr, on peut raffiner le balayage en g , pour établir plus précisément les seuils de couplage.

On peut aller plus loin. Pour $g = 2$, on intègre l'équation depuis $r = 0$ avec $E = -0.03$ et $E = -0.01$. Les résultats sont montrés sur la figure 30.

On conclut que l'énergie du fondamental est entre les deux : à $E = -0.03$, il n'a pas de zéro, mais à $E = -0.01$, on est au-dessus, et la fonction radiale s'annule.

On verra dans l'exemple ci-dessous que si, pour une valeur propre d'essai, on calcule aussi la solution qui satisfait aux conditions limites à droite, on peut estimer une correction qui permet d'approcher par itérations la valeur exacte.

Cherchons les états liés $\ell = 0$ dans le potentiel de Yukawa attractif

$$V(r) = -g \frac{\exp(-ar)}{r}, \quad (6.56)$$

Au contraire des cas à $d = 1$ ou $d = 2$ dimensions, au contraire des cas de potentiels confinants (oscillateur harmonique) ou de potentiel de longue portée (Coulomb), l'existence d'un ou plusieurs états liés n'est pas garanti. Il faut résoudre l'équation radiale (on suppose $\hbar^2/(2\mu) = 1$ ou absorbé dans g et E)

$$-u''(r) - g \frac{\exp(-ar)}{r} u(r) = E u(r), \quad (6.57)$$

et chercher si une ou plusieurs solutions existent avec $E < 0$, $u(0) = 0$, $u(r) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow \infty$.

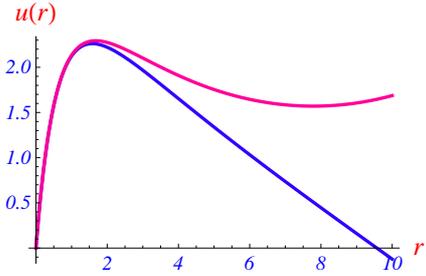


FIGURE 30 – Fonction radiale régulière à l'origine, pour un couplage attractif $g = 2$ et deux énergies d'essai, $E = -0.03$ et $E = -0.01$.

6.12 Correction à la fréquence propre pour une corde

Reprenons l'exemple de la corde $y'' + \lambda y = 0$ avec $y(\pm 1/2) = 0$, et imaginons que l'on parte d'une valeur $\lambda_1 = k_1^2$ quelconque, qui ne soit pas du type $k_1 = n\pi$ avec $n \in \mathbb{N}^*$. On peut adopter des solutions à gauche et à droite, et s'arranger pour que $y(0) = 1$ dans les deux cas, soit

$$y_1(x) = \begin{cases} \sin(k_1(1/2 - x)) / \sin(k_1/2) & \text{si } x < 0, \\ \sin(k_1(1/2 + x)) / \sin(k_1/2) & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (6.59)$$

La dérivée présentera une discontinuité en $x = 0$, de valeur $\epsilon = 2 \cot(k_0/2)$. Ce qui signifie que nous avons établi une solution non pas du problème initial, mais de l'équation modifiée

$$y''(x) + \lambda y(x) - \epsilon \delta(x) y(x) = 0. \quad (6.60)$$

On revient à l'équation initiale en ajoutant une interaction $\epsilon \delta(x)$, que l'on peut traiter au premier ordre (voir le paragraphe sur la corde lestée d'une masselotte).

La figure 31 montre la bonne convergence du processus s'il est itéré. On part de $k_1 = 12$ et on arrive vite très près de la valeur exacte $k = 3\pi$.

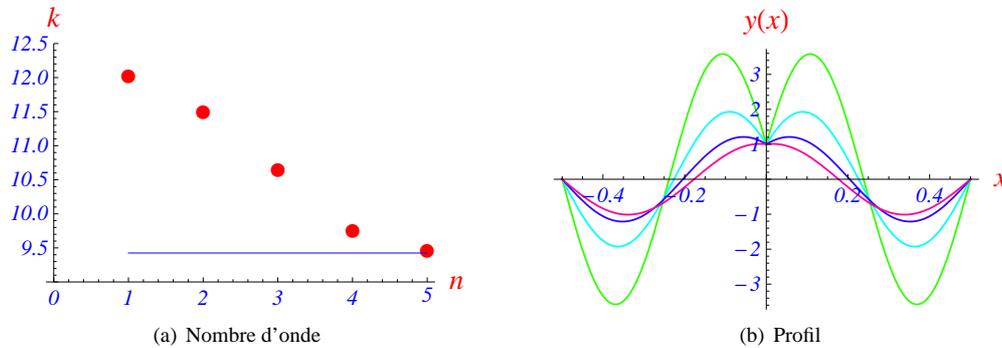


FIGURE 31 – Corrections itératives de raccordement pour une corde vibrante,

On voit sur la figure 31 qu'au fur et à mesure, le profil devient plus régulier : les solutions gauche et droite tendent l'une vers l'autre, et convergent vers la solution exacte. La méthode a été utilisée ici artificiellement sur une équation dont la solution est déjà connue. Elle peut être mise en œuvre pour la recherche de valeurs propres d'équations plus difficiles. Voir par exemple, [2].

6.13 Factorisation des équations différentielles et des équations de SL

Prenons d'abord l'exemple des équations d'oscillation. Si $D = d/dx$, on a

$$D^2 + a^2 = (D + ia)(D - ia) = (D - ia)(D + ia) \quad (6.61)$$

Pour que $(D^2 + a^2)y(x) = 0$, il suffit de résoudre $(D - ia)y(x) = 0$ ou bien $(D + ia)y(x) = 0$, ce qui donne $y(x) \propto \exp(\pm ia x)$, permettant de construire une base de solutions pour l'équation originale. Mais évidemment une solution comme $\cos(ax)$ n'annule aucun des facteurs. L'intérêt est de résoudre une équation du premier ordre au lieu du second.

La généralisation à une équation linéaire à coefficients constants d'ordre quelconque est immédiate et mène à la méthode de l'équation *caractéristique*. Dire que

$$D^n + \alpha_{n-1} D^{n-1} + \dots + \alpha_1 D + \alpha_0 = \prod_{i=1}^n (D - r_i), \quad (6.62)$$

revient à chercher les solutions r_i de l'équation polynomiale

$$r^n + \alpha_{n-1} r^{n-1} + \dots + \alpha_1 r + \alpha_0 = 0, \quad (6.63)$$

et de construire une base $\{\exp(r_i x)\}$ de solutions de l'équation différentielle. Noter que si une racine r_i est double, $\exp(r_i x)$ et $x \exp(r_i x)$ sont solutions du facteur $(D - r_i)^2 y(x) = 0$ ce qu'on peut vérifier directement ou comme limite des combinaisons $[\exp(r_a x) + \exp(r_b x)]/2$ et $[\exp(r_a x) - \exp(r_b x)]/(r_a - r_b)$ quand $r_a \rightarrow r_b \rightarrow r_i$.

La factorisation est plus délicate pour une équation à coefficients non constants, car D ne commute pas avec les fonctions. Par exemple, pour factoriser $D^2 + a(x)$, on peut utiliser l'identité [1]

$$[D \mp \alpha(x)][D \pm \alpha(x)] = D^2 + \alpha^2(x) \pm \alpha'(x), \quad (6.64)$$

et résoudre l'équation de Riccati en $\alpha(x)$

$$\alpha^2(x) \mp \alpha'(x) + a(x) = 0. \quad (6.65)$$

Par exemple, pour $a(x) = -x^2 \mp 1$, on vérifie directement que

$$(D \pm x)(D \mp x) = D^2 - x^2 \mp 1, \quad (6.66)$$

à la base de la méthode de Dirac de résolution de l'oscillateur harmonique (voir plus loin).

Un exemple plus compliqué est [1]

$$y'' - \left(x^2 - 2x + 3 + \frac{1}{x} + \frac{7}{4x^2} - \frac{5}{x^3} + \frac{1}{x^4} \right) y = 0, \quad (6.67)$$

qui s'écrit

$$(D + \alpha)(D - \alpha)y = 0, \quad \alpha = \frac{1}{x+1} + \frac{1}{x-1} - \frac{3}{2x} + \frac{1}{x^2} + x - 1, \quad (6.68)$$

et permet d'identifier la solution particulière

$$y = (x^2 - 1) x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{x} + \frac{x^2}{2} - x\right). \quad (6.69)$$

Revenons à l'oscillateur harmonique. L'identité

$$-(D - x)(D + x) = -D^2 + x^2 - 1, \quad (6.70)$$

montre que l'annulation de $D + x$, réalisé par la gaussienne $\phi_0(x) = \exp(-x^2/2)$ (non normalisée ici) implique que $(-D^2 + x^2)\phi_0 = \phi_0$ ce qui établit une valeur propre $\lambda_0 = +1$ pour l'opérateur $-D^2 + x^2$, avec ϕ_0 comme vecteur propre associé.

On généralise assez facilement à

$$-\left(D - x + \frac{\ell+1}{x}\right)\left(D + x - \frac{\ell+1}{x}\right) = -D^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + x^2 - 3 + 2\ell, \quad (6.71)$$

qui permet de retrouver l'état le plus bas de l'équation radiale de l'oscillateur harmonique spatial, de moment angulaire ℓ et d'énergie $3 + 2\ell$, et de fonction d'onde radiale ($x \geq 0$)

$$u_\ell(x) = x^{\ell+1} \exp(-x^2/2). \quad (6.72)$$

Pour l'oscillateur habituel à une dimension, on peut aller plus loin. L'identité

$$(-D^2 + x^2)(D - x) = (D - x)(-D^2 + x^2) + 2(D - x), \quad (6.73)$$

montre qu'en partant de ϕ_0 et de sa valeur propre $\lambda_0 = 1$, on construit de proche en proche

$$\phi_n = (D - x) \phi_{n-1}, \quad (6.74)$$

avec valeur propre $\lambda_n = 1 + 2n$.

Pour l'oscillateur spatial, c'est forcément un peu plus compliqué. Dans le cas $\ell = 0$, il faut appliquer deux fois l'opérateur $D - x$ pour passer d'un niveau à l'excitation radiale supérieure, car on ne prend que les états impairs de l'équation radiale à une dimension. Si on veut s'en tenir à des opérateurs du premier ordre, on peut utiliser,

$$\pm D \pm \frac{\ell + 1}{x} + x, \quad (6.75)$$

qui permet de progresser de ± 1 unité en moment angulaire et de ± 1 unité en excitation radiale, et donc de proche en proche, de construire les vecteurs propres les uns à partir des autres. Considérons, par exemple, l'un de ces opérateurs, $B = D + (\ell + 1)/r + r$. On peut vérifier que

$$(-D^2 + \ell(\ell + 1)/r^2 + r^2 - (2\ell + 3))B = B(-D^2 + (\ell + 1)(\ell + 2)/r^2 + r^2 - (2\ell + 5)), \quad (6.76)$$

ce qui démontre (voir les flèches vertes sur la figure 32) que si l'on part d'un état de moment angulaire $\ell + 1$ et de valeur propre $2\ell + 5 + 4n$, où $n \in \mathbb{N}$, on obtient soit zéro (si $\ell = 0$) soit un état propre de moment angulaire $\ell + 1$ et de valeur propre $2\ell + 3 + 4n$, c'est-à-dire correspondant au même nombre radial.

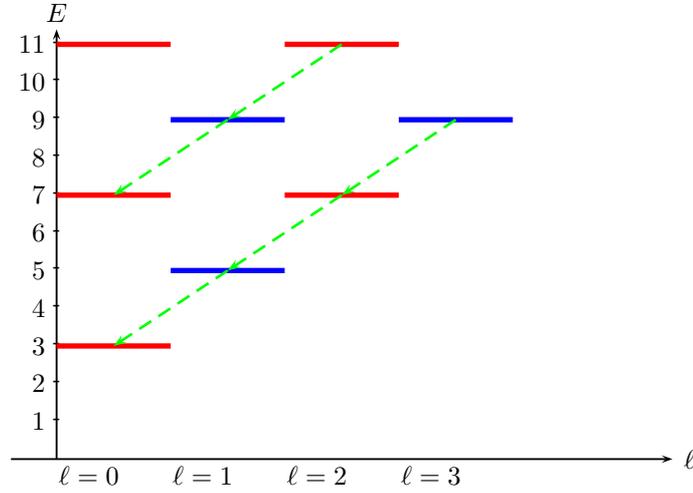


FIGURE 32 – Spectre de l'oscillateur spatial et action d'un des opérateurs de transition.

Le cas du potentiel coulombien peut être traité de manière analogue. Après changement d'échelle, on peut écrire

$$h_\ell = -D^2 + \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - \frac{1}{r}, \quad (6.77)$$

l'opérateur dont on cherche les valeurs propres du spectre discret, $h_\ell u_{n,\ell} = -k^2 u_{n,\ell}$, avec $k > 0$. Le procédé élémentaire consiste à isoler les comportements à $r = 0$ et r grand, soit

$$u_{\ell,n} = r^{\ell+1} \exp(-kr) v(r), \quad (6.78)$$

où $v(r)$ satisfait

$$\frac{v(r)}{r} [-1 + 2k(\ell + 1)] + 2k v'(r) - 2(\ell + 1) \frac{v'(r)}{r} - v''(r) = 0, \quad (6.79)$$

et si on cherche un développement en séries

$$v(r) = \sum_i a_i r^i, \quad (6.80)$$

on obtient la relation de récurrence

$$a_n [-1 + 2k(1 + n + 2\ell)] = a_{n+1} (n + 1) (n + 2\ell + 2), \quad (6.81)$$

qui montre qu'en général la série est infinie, avec $a_{n+1}/a_n \rightarrow 2k/n$ quand $n \rightarrow \infty$, soit $v(r) \sim \exp(2kr)$ pour r grand, ce qui ne convient pas, mais que si $1/k = 2(n + \ell + 1)$, où n est un entier positif ou nul, $v(r)$ est un simple polynôme, ce qui donne $u(r)$ normalisable.

La méthode un peu plus élaborée consiste à introduire des opérateurs qui permettent de modifier soit ℓ à $n' = n + \ell + 1$ donné (n' est appelé le nombre quantique principal), soit de modifier n à ℓ donné. L'une d'eux est

$$A_\ell^\pm = \frac{\ell}{r} - \frac{1}{2\ell} \pm D. \quad (6.82)$$

Par exemple, l'identité

$$h_\ell A_{\ell+1}^+ = A_{\ell+1}^+ h_{\ell+1}, \quad (6.83)$$

montre comment passer d'un état $(n', \ell + 1)$ à un état (n', ℓ) de même nombre quantique principal et donc de même énergie. Voir la figure 33.

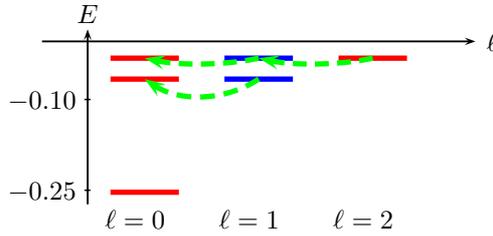


FIGURE 33 – Spectre dans le potentiel de Coulomb attractif. Les flèches indiquent la transformation étudiée. L'autre opérateur permet une progression verticale.

Inversement, $A_{\ell+1}^-$ fait progresser ℓ d'une unité, à énergie constante. Résoudre $A_{\ell+1}^- u[r] = 0$ donne facilement la fonction d'onde de l'état de ℓ maximal à énergie donnée, qui est aussi l'état d'énergie minimale à ℓ donné. On trouve

$$\epsilon = -\frac{1}{4(\ell + 1)^2}, \quad u(r) = r^{\ell+1} \exp[-r/(2(\ell + 1))]. \quad (6.84)$$

Les spectres des figs. 32 et 33 montrent des dégénérescences remarquables. Des conditions suffisantes ont été obtenues pour que par exemple, le premier état D soit au dessus ou au dessous du deuxième état S, selon le sens de la concavité de $V(r)$ comme fonction de r^2 , le cas limite correspondant à l'oscillateur harmonique, où V varie linéairement avec r^2 . Pour un potentiel linéaire, $E(1D) > E(2S)$. De même, la dégénérescence du cas Coulombien a été associée à $\Delta V = 0$. Si ΔV reste de signe constant, on aura un écart systématique, avec par exemple $E(2P) > E(2S)$ ou $E(2P) < E(2S)$ dans les notations habituelles de physique atomique. Effectivement, l'électron extérieur d'un atome alcalin voit une charge plus grande que $+1$ à courte distance, car l'écrantage des électrons internes est moins fort. Par contre, dans un atome muonique, le muon négatif pénètre un peu dans le noyau, et voit donc une charge inférieure à $+Z$. Ce qui signifie ΔV de signes opposés dans les deux cas, et effectivement des brisures de sens opposés de la dégénérescence coulombienne sont observées.

Potentiel de Pöschl–Teller Parmi les cas connus de potentiels solubles en mécanique quantique, figure le potentiel de Pöschl–Teller

$$U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)} \quad (6.85)$$

ici dans sa version la plus simple. Il correspond à l'équation radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) - \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)} \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (6.86)$$

où il y a visiblement un peu trop de constantes. Par exemple, \hbar et m restent groupées en \hbar^2/m . Mais on peut faire mieux et voir en TD qu'on peut se ramener à

$$h_g[y(x)] = -y''(x) - \frac{g(g+1)}{\cosh^2(x)} y(x) = \epsilon y(x). \quad (6.87)$$

L'opérateur différentiel se factorise assez facilement, au moyen de

$$a_{\pm} = g \tanh x \pm D, \quad (6.88)$$

avec des identités comme

$$a_- a_+ = h_g + g^2, \quad (6.89)$$

qui montre que l'annulation de a_+ donne une solution sans nœud, normalisable, qui identifie le fondamental de h_g avec $\epsilon = -g^2$.

À partir de

$$a_- h_{g-1} = h_g a_-, \quad (6.90)$$

on voit qu'à partir du fondamental de h_{g-1} , qui existe pour $g > 1$, avec une valeur propre $-(g-1)^2$, on obtient par action de a_- le premier niveau excité de h_g , avec valeur propre $-(g-1)^2$. Etc.

A Calcul d'intégrales

Nous donnons ici quelques étapes pour démontrer la relation (2.37). Refaire les calculs en détail pourra constituer un bon exercice. Les pianistes, après tout, font bien leurs gammes.

Commençons par le très classique

$$I = \int_0^{\infty} \exp(-x^2) dx, \quad (\text{A.1})$$

qui élevé au carré et évalué en coordonnées polaires, donne

$$I^2 = \iint \exp(-x^2 - y^2) dx dy = (\pi/2) \int_0^{\infty} r dr \exp(-r^2) = \pi/4, \quad (\text{A.2})$$

d'où $I = \sqrt{\pi}/2$, car $I > 0$. Cette intégrale est très utile en physique statistique (distribution de Boltzmann) et pour les calculs variationnels en physique quantique à l'aide de gaussiennes. Des développements bien au-delà de ce qui est envisagé ici ont conduit aux travaux qui ont valu à leurs auteurs le prix Nobel de chimie en 1998.

Le résultat ci-dessus explique le facteur de normalisation de la fonction "erreur" et de la fonction complémentaire

$$\operatorname{erf}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du, \quad \operatorname{erfc}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-u^2) du. \quad (\text{A.3})$$

Un cran au dessus est

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-x^2 - 1/x^2) dx, \quad (\text{A.4})$$

se qui peut se réécrire

$$J = \frac{1}{e^2} \int_0^{\infty} \exp[-(x - 1/x)^2] dx. \quad (\text{A.5})$$

qui suggère le changement de variable $2u = x - 1/x$, soit

$$x = u + \sqrt{u^2 + 1}, \quad dx = \left(1 + \frac{u}{\sqrt{u^2 + 1}}\right) du \quad (\text{A.6})$$

mais le deuxième terme du jacobien, impair, ne contribue pas, car u varie de $-\infty$ à $+\infty$. Le résultat est

$$J = \frac{\sqrt{\pi}}{2e^2}. \quad (\text{A.7})$$

D'autres intégrales s'en déduisent ou se calculent de façon analogue. Pour $\alpha > 0$ et $p > 0$,

$$J(p, \alpha) = \int_0^{\infty} \exp(-pt - \alpha/t) \frac{dt}{\sqrt{t}} = \exp(-2\sqrt{\alpha p}) \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{p}}. \quad (\text{A.8})$$

Et par dérivation,

$$\tilde{J}(p, \alpha) = \int_0^{\infty} \exp(-pt - \alpha/t) \frac{dt}{\sqrt{t^3}} = \exp(-2\sqrt{\alpha p}) \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}. \quad (\text{A.9})$$

Ce qui signifie que la TL de $\exp(-ax^2/t)/t^{3/2}$ est le membre de droite. En utilisant le théorème sur la TL d'une primitive s'annulant à l'origine, on déduit que

$$\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha/t}) \rightarrow \exp(-2\sqrt{\alpha p})/p. \quad (\text{A.10})$$

Références

- [1] L. M. Berkovich. Method of factorization of ordinary differential operators and some of its applications. *Appl. Anal. Discrete Math.*, 1(1) :122–149, 2007.
- [2] D. R. Hartree. *The calculation of atomic structures*. Wiley, New York, NY, 1957.
- [3] M. Kibler. *Éléments de mathématiques pour la physique et la chimie (avec 230 exemples et 230 exercices et problèmes)*. Gordon & Breach, 2003. seconde édition d'un ouvrage publié en 2001 ISBN : 2-84703-012-3 - 2ème édition - théorie.
- [4] A. Messiah. *Mécanique quantique*. Dunod, Paris, 1959.
- [5] V. V. Nesvizhevsky, H. G. Börner, A. K. Petukhov, H. Abele, S. Baeßler, F. J. Rueß, T. Stöferle, A. Westphal, A. M. Gagarski, G. A. Petrov, and A. V. Strelkov. Quantum states of neutrons in the Earth's gravitational field. *Nature*, 415 :297–299, Jan. 2002.
- [6] K. F. Riley, M. P. Hobson, and S. J. Bence. *Mathematical methods for physics and engineering. 3rd ed.* Cambridge : Cambridge University Press. xxvii, 1333 p., 2006.