

# Cours de Physique Mathématique

L3, premier semestre, année 2012–13

[www.ipnl.in2p3.fr/cours/richard](http://www.ipnl.in2p3.fr/cours/richard)


Jean-Marc Richard

Version du 4 décembre 2012

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Équations différentielles et aux dérivées partielles</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Transformée de Laplace</b>	<b>17</b>
<b>4</b>	<b>Transformée de Fourier</b>	<b>25</b>
<b>5</b>	<b>Distributions</b>	<b>37</b>
<b>6</b>	<b>Applications des distributions, fonctions de Green</b>	<b>44</b>
<b>7</b>	<b>Équations de Sturm–Liouville</b>	<b>52</b>
<b>8</b>	<b>Récapitulation pour une équation</b>	<b>66</b>
<b>A</b>	<b>Calcul d'intégrales</b>	<b>71</b>

## 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 [1, 2], entre beaucoup d'autres.

La trame sera l'équation de Schrödinger et les équations analogues de la physique, avec des rappels sur les équations différentielles et aux dérivées partielles, une introduction aux méthodes de résolution utilisant la transformation de Laplace ou de Fourier, une présentation des fonctions de Green et leurs applications, et un exposé des propriétés générales des équations de Sturm–Liouville.

Je remercie particulièrement les collègues qui m'ont signalé des coquilles et maladresses dans les versions antérieures de ce document.

## 2 Équations différentielles et aux dérivées partielles

### 2.1 Introduction

**P**OUR les équations différentielles, nous nous contenterons de rappels élémentaires sur les résultats fondamentaux et les méthodes de résolution explicite. Pour ces dernières, nous insisterons sur les équations séparables et les équations linéaires, qu'on rencontre souvent en physique.

Pour les équations aux dérivées partielles, nous expliquerons la classification générale et discuterons de quelques équations linéaires classiques.

Des considérations de bon sens permettent souvent d'obtenir nombre de résultats avant de se lancer dans des calculs détaillés. Prenons l'exemple de

$$y''(x) + (1 + x^2)y(x) = 0. \quad (2.1)$$

Si en un point  $x_0$ , on observe que  $y(x_0) > 0$ , alors  $y'(x_0) < 0$  : la fonction décroît. Inversement si  $y(x_0) < 0$ , la fonction croît. Ce qui exclut une traversée de l'axe  $y = 0$ . D'ailleurs, si on avait  $y(x_1) = 0$ , on aurait  $y'(x_1) = 0$  et la fonction resterait identiquement nulle. On voit donc que le seul scénario plausible est celui d'une fonction qui tend de façon monotone vers zéro quand  $x \rightarrow +\infty$ . Ce qui est confirmé par une résolution explicite

$$y(x) = y_0 \exp[-(x - x_0) - (x^3 - x_0^3)/3]. \quad (2.2)$$

Dans le cas d'une équation du second ordre

$$y''(x) + a(1 + x^2)y(x) = 0, \quad (2.3)$$

le cas  $a > 0$  signifie que si  $y(x_0) > 0$ , la concavité est tournée vers le bas. La fonction peut être croissante, mais la croissance est en cours de diminution et le graphe de la fonction est rabattu vers l'axe  $y = 0$ . Il y a donc un effet de modération. On ne sera pas surpris de trouver des oscillations en effectuant la résolution explicite. Les oscillations sont de plus en plus rapides : on peut penser à une approximation locale de type  $y'' + \omega^2 y = 0$ , avec  $\omega$  qui augmente lentement. Voir fig. 1.

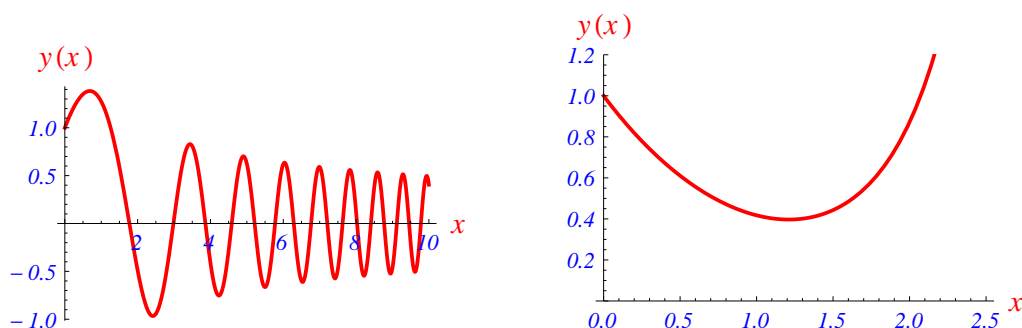


FIGURE 1 – Résolution exacte de (2.3), à gauche pour  $a = 1$  en partant de  $y(0) = 1$  et  $y'(0) = 1$ , à droite pour  $a = -1$  en partant de  $y(0) = 1$  et  $y'(0) = -1$ .

Par contre si  $a < 0$ , un départ  $y(x_0) > 0$  est accompagné par une concavité tournée vers le haut. Il y a amplification, et la fonction explose vers  $y \rightarrow +\infty$ , même si on part avec une dérivée négative. Voir fig. 1.

### 2.2 Équations séparables

#### 2.2.1 Primitive

L'équation  $y'(x) = f(x)$ , où  $f(x)$  est une fonction donnée, est le cas le plus simple. L'existence d'une primitive de  $f(x)$  requiert beaucoup moins de conditions que l'existence d'une dérivée. Si l'intégrabilité de  $f$

est acquise, alors  $y(x)$  est déterminée à une constante additive près, qui peut être indentifiée à la valeur en un point donné, avec la notation

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(x)dx . \quad (2.4)$$

On considérera une équation différentielle comme *résolue* si on peut se ramener à une évaluation de primitive, que l'intégrale soit ou non calculable avec des fonctions élémentaires.

Noter que la notion d'intégrale « calculable » n'est pas très bien définie. Historiquement, on a ajouté au catalogue des fonctions élémentaires des fonctions comme le logarithme, la fonction erreur ou les fonctions elliptiques précisément pour élargir le domaine des intégrales calculables. On pourra s'entraîner à calculer quelques primitives classiques comme celles de  $\ln x/x$  ou de  $1/\sin x$ .

### 2.2.2 Primitive de la fonction réciproque

Dans les applications en physique, on est souvent face à un problème très voisin, du type

$$\frac{dy}{dx} = g(y) . \quad (2.5)$$

Par exemple, le courant de décharge d'un condensateur dépend de la tension, ou le taux de désintégration d'un échantillon radioactif dépend de la population encore active. Sous réserve que  $g$  ne s'annule pas, on peut procéder comme précédemment, est mais non pas pour  $y(x)$  directement, mais pour sa fonction réciproque  $x(y)$  qui est en effet bien définie dans chaque intervalle où  $g(y)$  a un signe donné.

On obtient

$$x(y) = x_0 + \int^{y'} \frac{dy'}{g(y')} . \quad (2.6)$$

Noter que la constante est dans  $x$ . Cela signifie que si  $y_0(x)$  est solution de l'équation différentielle  $y'(x) = g(y)$ , il en est de même de toute fonction  $y_a(x) = y_0(x + a)$  obtenue par translation horizontale, ce qu'on aurait pu dire tout de suite.

### 2.2.3 Équations séparables

La généralisation est une équation qu'on arrive – au moins par intervalles – à mettre sous la forme

$$g(y)dy = f(x)dx . \quad (2.7)$$

En mécanique, on a souvent des carrés de vitesse  $(dy/dx)^2$ , et il faut séparer les cas selon le signe de cette vitesse. La résolution est de la forme

$$G(y) = F(x) + C^{te} , \quad (2.8)$$

où  $G$  est une primitive de  $g$  et  $F$  de  $f$ . La fonction  $y(x)$  est donc donnée par une équation implicite.

### 2.2.4 Exemple : oscillateur harmonique

Si une masse  $m$  effectue un mouvement à une dimension sous le seul effet d'un potentiel (= énergie potentielle !)  $kx^2/2$  où  $k$  est la constante de Hooke ou raideur, le bilan d'énergie est  $m\dot{x}^2/2 + kx^2/2 = E$ , où  $E$  est l'énergie totale, qui est une constante du mouvement. Un changement de l'unité de temps et de l'unité de longueur permet de se ramener à

$$\dot{x}^2 + x^2 = 1 , \quad (2.9)$$

sans perte de généralité.

La démarche normale, pour des équations différentielles, est de tenter de *réduire le degré*. Oublions donc que nous sommes ici dans un cas d'exception à cette règle et qu'il existe une équation linéaire du second ordre associée à (2.9) et assez facile à résoudre. La résolution par équation séparable est d'ailleurs instructive, car elle pourra se généraliser pour des oscillations non harmoniques.

La discussion qualitative de (2.9) se fait dans les cours de mécanique élémentaire. La particule, lancée par exemple de  $x = 0$  au temps  $t = 0$  avec une vitesse  $\dot{x} = 1$  arrivera en  $x = 1$  avec une vitesse nulle, repartira en arrière jusqu'en  $x = -1$ , etc. Le mouvement est périodique. Les quatre phases du mouvement sont parfaitement symétriques et on peut se contenter de la loi horaire lors la première phase. Comme  $\dot{x} > 0$ , on a

$$dt = \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}, \quad (2.10)$$

d'où  $t = \arcsin x$ , ce qui correspond bien à la solution classique.

### 2.2.5 Pendule simple

Les notations habituelles  $m, \ell, g, \theta$  sont utilisées. Le théorème du moment cinétique donne

$$\ell \ddot{\theta} + g \sin \theta = 0, \quad (2.11)$$

et de nouveau, on peut se ramener au cas de  $g/\ell = 1$  par changement d'unité de temps, sans perte de généralité.

L'approximation des petites oscillations,  $\ddot{\theta} + \theta = 0$  est en général très bonne, car du fait de la parité de la fonction sinus, le premier terme correctif est en  $\theta^3$ , et non pas  $\theta^2$ . Nous verrons plus loin comment décomposer le moment moteur en  $\sin \theta = \theta + (\sin \theta - \theta)$  et traiter le second terme comme une correction, avec possibilité d'itérations convergeant vers la solution exacte. Nous verrons aussi qu'une décomposition plus subtile, pour une énergie donnée,  $\sin \theta = \lambda \theta + (\sin \theta - \lambda \theta)$  permet d'améliorer la convergence.

Un mathématicien à qui on soumet l'équation  $\ddot{\theta} + \sin \theta = 0$  sans lui indiquer l'origine physique remarquera que cette équation est incomplète : il lui manque une dépendance explicite en  $\dot{\theta}$  et en la variable  $t$ . Il la transformera en  $\dot{\theta}^2 + \cos \theta = \epsilon$ , où  $\epsilon$ , calculable en fonction des conditions initiales, est une *intégrale première*.

Pour le physicien, il est clair qu'un bilan d'énergie donne une équation de degré moins élevé. La somme de l'énergie cinétique  $m\ell^2\dot{\theta}^2/2$  et de l'énergie potentielle  $mgl(1 - \cos \theta)$  est une constante, qu'on peut identifier avec l'énergie potentielle au point d'amplitude maximale  $\theta_m$ , soit toujours avec  $g/\ell = 1$ ,

$$\dot{\theta}^2 = 2(\cos \theta - \cos \theta_m). \quad (2.12)$$

Les aspects qualitatifs ne sont pas changés, avec une périodicité, et dans chaque période, quatre phases symétriques. Supposons  $\dot{\theta} > 0$ . L'équation est séparable et on obtient en supposant que l'horloge est déclenchée au passage à la verticale,

$$t(\theta) = \int_0^\theta \frac{d\theta'}{\sqrt{2 \cos \theta' - 2 \cos \theta_m}}. \quad (2.13)$$

La loi horaire  $\theta(t)$  est la fonction réciproque.

En particulier, la période est (il faut multiplier par  $\sqrt{\ell/g}$  pour revenir aux unités initiales)

$$T = 4 \int_0^{\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{2 \cos \theta - 2 \cos \theta_m}}. \quad (2.14)$$

Cette expression ne se prête pas facilement à des développements, car il s'agit d'une intégrale généralisée, et il y a une double dépendance en  $\theta_m$ . Pour rendre cette expression plus maniable, on écrit au dénominateur  $2 \cos \theta - 2 \cos \theta_m = 4[\sin^2(\theta_m/2) - \sin^2(\theta/2)]$  puis on pose  $\sin(\theta/2) = \sin(\theta_m/2) \sin u$ , pour obtenir

$$T = 4 \int_0^{\pi/2} \frac{du}{\sqrt{1 - \sin^2(\theta_m/2) \sin^2 u}}. \quad (2.15)$$

qui fait apparaître ce que l'on appelle une intégrale elliptique complète de première espèce

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}}. \quad (2.16)$$

On trouve des intégrales de ce genre quand on veut calculer la longueur d'un arc d'ellipse.

Même si on ne connaît rien aux intégrales elliptiques, on voit que (2.15) se prête à un développement limité en fonction de  $\theta_m$ . On peut facilement montrer que la période du pendule simple est de la forme

$$T(\theta_m) = T_0 \left( 1 + \frac{\theta_m^2}{16} + \dots \right), \quad (2.17)$$

et on vérifie *a posteriori* que l'approximation des petites oscillations est excellente.

## 2.3 Quelques équations classiques

Il y a une littérature très abondante sur les équations différentielles, et certaines portent le nom du mathématicien qui les a étudiées. Donnons deux exemples.

### 2.3.1 Équation de Bernoulli

$$y'(x) + P(x)y(x) = Q(x)y^n, \quad (2.18)$$

où  $P(x)$  et  $Q(x)$  sont de fonctions données suffisamment régulières dans un intervalle pour que des solutions existent. L'exposant constant  $n$  est supposé  $n \neq 1$ , sinon on tombe sur une équation linéaire très simple.

On pose  $v = y^{1-n}$  d'où

$$y'(x) = v'(x) \frac{y^n}{1-n}, \quad (2.19)$$

ce qui donne l'équation en  $v$

$$v'(x) + (1-n)P(x)v(x) = (1-n)Q(x), \quad (2.20)$$

équation linéaire avec second membre dont la méthode de résolution sera rappelée à la section suivante.

### 2.3.2 Équation de Riccati

Pour l'équation,

$$y' = q_0(x) + q_1(x)y + q_2(x)y^2, \quad (2.21)$$

on peut montrer que le changement de fonction  $y = -u'/(q_2u)$  donne une équation linéaire homogène du second ordre du type

$$u'' - Ru' + Su = 0, \quad (2.22)$$

avec  $S = q_2q_0$  et  $R = q_1 + q_2'/q_2$ .

On pourrait à première vue s'étonner du nombre de constantes d'intégration. L'équation originale (2.21) a une constante d'intégration, par exemple la valeur initiale  $y(0)$ . Les solutions de l'équation modifiée forment un espace vectoriel de dimension 2, soit  $u = a_1u_1(x) + a_2u_2(x)$ . Mais on voit que la dérivée logarithmique  $u'/u$  dont est tirée  $y = -u'/(q_2u)$  ne dépend que du rapport  $a_2/a_1$ .

## 2.4 Équations linéaires du premier ordre

### 2.4.1 Équation homogène

N.B. En principe, on devrait dire « équation linéaire » et « équation affine », mais le poids des habitudes fait que l'on parle d'équation linéaire « homogène » ou « avec second membre ».

Soit

$$y'(x) + a(x)y(x) = 0. \quad (2.23)$$

Les solutions forment un espace vectoriel de dimension 1. Effectivement, si  $y_0$  est solution et que l'on cherche une nouvelle solution sous la forme  $y(x) = u(x)y_0(x)$ , on arrive à  $u'(x) = 0$ , soit  $u(x) = C^{\text{te}}$ . Ce raisonnement suppose que l'on puisse diviser par  $y_0(x)$ . Mais on voit bien que si l'on avait  $y(x) = 0$  en un point où  $a(x) \neq 0$ , alors on aurait aussi  $y'(x) = 0$  et une solution identiquement nulle.

Ce qui montre que si  $a(x)$  s'annule ou devient infini, il faut faire attention. Imaginons  $a(x) = 1/(1-x)$ . Un calcul simple montre que  $y(x) = y_0(1-x)$  où  $y_0$  est la valeur en  $x = 0$ . Toutes les solutions s'annulent donc en  $x = 1$ . Inversement, si on cherche à imposer des conditions initiales en  $x = 1$ , on *doit* imposer  $y(1) = 0$ , mais on peut jouer sur la valeur de  $y'(1)$  pour balayer tout l'espace des solutions.  $x = 1$  est ce qu'on appelle un *point fixe attractif*.

Si on change le signe, et considère désormais  $a(x) = -1/(1-x)$ , les solutions sont de la forme  $y_0/(1-x)$ . On a un *point fixe répulsif*.

En dehors des singularités de  $a(x)$ , on aura tout simplement

$$y(x) = y_0 \exp \left[ - \int_{x_0}^x a(x') dx' \right]. \quad (2.24)$$

Par exemple si on cherche l'état fondamental de l'oscillateur harmonique à une dimension par la méthode de Dirac, à base d'opérateurs élévateur  $a$  et abaisseur  $a^\dagger$ , il doit annuler l'opérateur abaisseur et donc satisfaire  $\psi'(x) + x\psi(x) = 0$ . On trouve la gaussienne  $\psi(x) \propto \exp(-x^2/2)$ , la constante étant fixée par la condition de normalisation.

## 2.4.2 Équation linéaire du premier ordre inhomogène

Soit

$$y'(x) + a(x)y(x) = f(x). \quad (2.25)$$

On a une structure d'espace affine pour les solutions. Si  $Y(x)$  est une solution particulière,  $y(x) - Y(x)$  est solution de l'équation homogène associée. On retient donc la recette :  $y(x) =$  solution particulière de l'équation complète + solution quelconque de l'équation homogène, soit

$$y(x) = y_0(x) + Y(x). \quad (2.26)$$

Dans bien des cas, (charge d'un condensateur, mouvement avec frottement où  $y(x)$  est la vitesse en fonction du temps, source radioactive alimentée par une réaction nucléaire, etc., on a  $a < 0$ , si bien que  $Y(x) \rightarrow 0$  quand  $x \rightarrow \infty$ . On voit que deux solutions correspondant à des conditions initiales différents se rejoignent. On perd la mémoire des conditions initiales pour aboutir à une réponse universelle qui ne dépend que de l'excitation extérieure  $f(x)$ . C'est l'opposé du fameux « effet papillon ».

**Linéarité par rapport au second membre** L'observation sera très utile pour les fonctions de Green, par exemple, que si l'on connaît une solution particulière  $Y_i(x)$  correspondant au second membre  $f_i(x)$ , alors  $\lambda_1 Y_1(x) + \lambda_2 Y_2(x) + \dots$  sera solution de

$$y'(x) + a(x)y(x) = \lambda_1 f_1(x) + \lambda_2 f_2(x) + \dots \quad (2.27)$$

Évidemment, certaines conditions initiales, par exemple  $Y_i(0) = 1$ , ne sont pas satisfaites par la superposition.

**Calcul d'une solution particulière** Dans nombre de cas, le second membre  $f(x)$  est assez simple, et on peut deviner une solution particulière polynomiale ou exponentielle ou trigonométrique. Sinon, on peut utiliser une méthode de « variation de la constante ». Si  $y_0(x)$  est solution de l'équation homogène,  $Cy_0(x)$  l'est aussi, quelque soit la constante  $C$ . On cherche par analogie une solution de l'équation, complète comme  $C(x)y_0(x)$ . En remplaçant, on obtient  $C'(x) = f(x)/y_0(x)$  et il suffit d'intégrer.

## 2.5 Équations linéaires du second ordre

### 2.5.1 Cas homogène

Il s'agit de

$$y''(x) + p(x)y(x) + q(x)y(x) = 0. \quad (2.28)$$

Le résultat essentiel est que les solutions forment un espace vectoriel de dimension 2. Il suffit d'avoir résolu l'équation pour deux jeux de conditions initiales indépendants pour connaître toutes les autres solutions.

**Critère d'indépendance** Dire que  $y_1(x)$  et  $y_2(x)$  sont des solutions indépendantes signifie qu'en un point donné,  $\{y_1(x), y_1'(x)\}$  et  $\{y_2(x), y_2'(x)\}$  ne sont pas proportionnels. Autrement dit leur *wronskien*

$$W(y_1, y_2) = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = y_1 y_2' - y_1' y_2 \quad (2.29)$$

doit être non nul.

C'est une condition cohérente, car elle se propage quand  $x$  varie. En effet, en combinant l'équation différentielle pour  $y_1$ , multipliée par  $y_2$ , à l'équation pour  $y_2$ , multipliée par  $y_1$ , on arrive facilement à

$$W'(x) + p(x)W(x) = 0. \quad (2.30)$$

Cette équation implique que, sauf singularité de  $p(x)$ ,  $W(x)$  évolue en gardant son signe, soit

$$W = W_0 \exp \left[ - \int_{x_0}^x p(x') dx' \right]. \quad (2.31)$$

Donc deux solutions indépendantes en un point le seront encore en un autre, ce qui est cohérent.

**Trouver une autre solution** Si on connaît déjà une solution, soit  $y_1(x)$ , de (2.28), on peut en trouver une autre sous la forme  $y_2(x) = C(x)y_1(x)$ . On appelle parfois cette méthode «variation de la constante», parce que si  $y_1(x)$  est solution,  $Cy_1(x)$  aussi !

On part du wronskien ci-dessus, et obtient  $C'(x) = W(x)/y_1(x)^2$ , d'où

$$y_2(x) = y_1(x) \int^x \frac{W(x') dx'}{y_1^2(x')}. \quad (2.32)$$

Premier exemple. Pour l'équation  $y'' + y = 0$ , on a la solution  $y_1(x) = \cos x$ . Si on feint d'ignorer la deuxième solution, on peut la chercher par la méthode précédente, en imposant un wronskien (constant car l'équation ne contient pas de dérivée première)  $W(y_1, y_2) = 1$ , et obtenir

$$y_2(x) = y_1(x) \int^x \frac{dx'}{\cos^2(x')} = \cos x [\tan x + C^{te}]. \quad (2.33)$$

Autre exemple. Pour l'oscillateur harmonique à une dimension en mécanique quantique, une fois simplifié par changement d'unités de longueur et d'énergie, le fondamental est solution de

$$-\psi''(x) + x^2\psi(x) = \psi(x), \quad (2.34)$$

et la solution normalisée correspondant à l'état fondamental est

$$\psi_0(x) = \pi^{-1/4} \exp(-x^2/2), \quad (2.35)$$

qu'on peut aussi obtenir, nous l'avons vu, par annulation de l'opérateur abaisseur. Si on cherche une autre solution de (2.34), s'annulant en  $x = 0$  et dont le wronskien avec  $\psi_0$  soit égal à 1, on trouve

$$\frac{1}{2} \pi^{3/4} \exp(-x^2/2) \operatorname{erfi}(x), \quad (2.36)$$

qui implique la fonction erreur imaginaire

$$\operatorname{erfi}(z) = -i \operatorname{erf}(iz), \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (2.37)$$



**Cas de coefficients constants** Soit

$$y''(x) + 2by'(x) + cy(x) = 0. \quad (2.38)$$

Si  $b = 0$ , on a des oscillations, avec  $y(x)$  combinaison linéaire de  $\sin(\sqrt{c}x)$  et  $\cos(\sqrt{c}x)$  si  $c > 0$ . Les physiciens écrivent souvent la solution générale  $y(x) = A \cos(\sqrt{c}x + \phi)$  pour faire apparaître l'amplitude, mais la décomposition en sinus et cosinus est plus commode pour écrire les conditions initiales, soit

$$y(x) = y_0 \cos(\sqrt{c}(x - x_0)) + (y'_0/\sqrt{c}) \sin(\sqrt{c}(x - x_0)). \quad (2.39)$$

Si  $c < 0$ , on peut reprendre les expressions ci-dessus en trigonométrie hyperbolique, ou utiliser une base de solutions  $\exp(\pm\sqrt{-c}x)$ .

Si  $b \neq 0$ , le plus simple est de multiplier (2.38) par  $\exp(bx)$ . On voit que  $z(x) = \exp(bx)y(x)$  satisfait

$$z''(x) + (c - b^2)z(x) = 0. \quad (2.40)$$

ce qui ramène à la discussion précédente, selon le signe de  $c - b^2$ .

La méthode la plus générale, mais un peu lourde dans le cas d'une équation du second ordre, est celle de l'équation caractéristique. Pour

$$a_n y^{(n)}(x) + a_{n-1} y^{(n-1)}(x) + \dots + a_1 y'(x) + a_0 y(x) = 0, \quad (2.41)$$

on cherche une base de solutions  $\exp(rx)$  où  $r$  est réel ou complexe.  $r$  est solution de l'équation dite caractéristique

$$a_n r^n + a_{n-1} r^{n-1} + \dots + a_1 r + a_0 = 0, \quad (2.42)$$

qui a en général  $n$  solutions distinctes. Si la racine  $r_1$  est double, on vérifie que  $\exp(r_1 x)$  et  $x \exp(r_1 x)$  sont solutions de l'équation différentielle, et on a bien le compte de solutions linéairement indépendantes.

La résolution de l'équation caractéristique est parfois l'occasion de découvrir des propriétés simples des équations polynomiales. Par exemple, si les coefficients  $a_i$  sont tous positifs, les racines réelles ne peuvent être positives !

### 2.5.2 Cas inhomogène

Soit

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = f(x). \quad (2.43)$$

De nouveau, les solutions forment un espace affine, et s'écrivent comme somme d'une solution particulière et de la solution la plus générale de l'équation homogène (2.28) associée. Si  $f(x)$  est somme de plusieurs termes, on peut résoudre avec chaque terme séparément, et superposer les solutions obtenues.

**Recherche d'une solution particulière** Dans bien des exemples de physique élémentaire, une solution particulière peut être devinée comme polynôme, ou exponentielle ou fonction sinusoïdale dont on doit ajuster l'amplitude. La méthode dite de «variation des constantes» permet de résoudre l'équation complète (2.43) si on connaît une base de solutions,  $y_1(x)$  et  $y_2(x)$  de l'équation homogène (2.28). On cherche

$$y(x) = a_1(x)y_1(x) + a_2(x)y_2(x), \quad y'(x) = a_1(x)y'_1(x) + a_2(x)y'_2(x). \quad (2.44)$$

La cohérence de ce deux équations et (2.43) donnent

$$\begin{aligned} a'_1(x)y_1(x) + a'_2(x)y_2(x) &= 0, \\ a'_1(x)y'_1(x) + a'_2(x)y'_2(x) &= f(x). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Le déterminant est le wronskien de  $y_1$  et  $y_2$ . Il ne s'annule pas du fait de leur indépendance. On peut donc calculer explicitement  $a'_1$  et  $a'_2$ , et déduire  $a_1$  et  $a_2$  par intégration. D'où

$$y(x) = y_1(x) \left[ C_1 - \int^x \frac{y_2(x')f(x')dx'}{W[y_1(x'), y_2(x')]} \right] + \{1 \leftrightarrow 2\}, \quad (2.46)$$

où l'on retrouve la structure affine des solutions et la linéarité par rapport à  $f$ .

## 2.6 Systèmes d'équations différentielles couplées

### 2.6.1 Généralités

Les exemples sont nombreux, à commencer par les oscillations couplées en mécanique.

On peut noter toute équation différentielle peut formellement se ramener à un système d'équations couplées du premier ordre. Par exemple, pour une équation du second ordre résolue sous la forme

$$y'' = F(y, y', x), \quad (2.47)$$

peut se lire

$$z' = F(y, z, x), \quad y' = z, \quad (2.48)$$

cas particulier de

$$z' = F(y, z, x), \quad y' = G(y, z, x). \quad (2.49)$$

### 2.6.2 Systèmes linéaires

On a des exemples en mécanique quantique avec des canaux couplés. Par exemple, pour le deutérium, état lié proton–neutron, le fonction d'onde contient une onde  $s$  ( $\ell = 0$ ) couplée à un spin 1 pour donner un moment cinétique  $J = 1$ , et une onde  $d$  ( $\ell = 2$ ) qui donne aussi  $J = 1$ . Les fonctions d'onde radiales réduites  $u(r)$  et  $w(r)$  sont solutions des équations de Schrödinger couplées

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + V_{11}(r)u(r) + V_{12}(r)w(r) &= Eu(r), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ w''(r) - \frac{6}{r^2} w(r) \right] + V_{12}(r)u(r) + V_{22}(r)w(r) &= Ew(r), \end{aligned} \quad (2.50)$$

où les potentiels  $V_{ij}$  sont donnés par un modèle de l'interaction nucléon–nucléon (Yukawa, ...).

Les solutions forment un espace vectoriel. Dans le cas ci-dessus, de dimension 4. Ce qui fait que des solutions particulières, ne correspondant pas à des situations physiques, peuvent se combiner pour donner le résultat du problème.

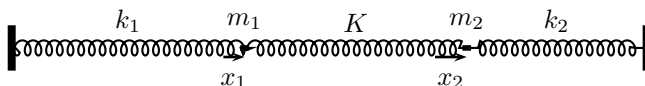
## 2.7 Systèmes linéaires à coefficients constants

Ils peuvent se ramener à

$$\dot{x}_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} x_j(t), \quad (2.51)$$

car si par exemple, on part d'un système  $\ddot{x} = \alpha x + \beta y + \dots$ , on peut toujours poser  $x_1 = x$ ,  $x_2 = \dot{x}$ ,  $x_3 = y$ , ..., et écrire :  $\dot{x}_1 = x_2$ ,  $\dot{x}_2 = \alpha x_1 + \beta x_3 + \dots$ , etc.

L'exemple le plus simple est celui des ressorts couplés en mécanique. Les équations sont



$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 &= Kx_2 - (K + k_1)x_1, \\ m_2 \ddot{x}_2 &= Kx_1 - (K + k_2)x_2, \end{aligned} \quad (2.52)$$

FIGURE 2 – Ressorts couplés

Dans le cas particulier où  $k_1 = k_2 = K$  et  $m_1 = m_2$  et après un changement d'unités, on doit résoudre

$$\ddot{x}_1 + 2x_1 - x_2 = 0, \quad \ddot{x}_2 + 2x_2 - x_1 = 0. \quad (2.53)$$

On a vu comment convertir des équations de degré élevé en un système d'équations du premier ordre. On pourrait être tenté par la démarche inverse, et, par élimination, se ramener un système d'équations couplées

à une seule équation de degré plus élevé. Dans cet exemple, on peut extraire  $x_2 = 2x_1 + \ddot{x}_1$  de la première équation, et reporter dans la seconde, pour obtenir

$$\ddot{\ddot{x}}_1 + 4\ddot{x}_1 + 3x_1 = 0, \quad (2.54)$$

pas très difficile à résoudre, sauf quand arrive la mise en place des conditions initiales, qui implique pas moins de quatre constantes d'intégration, alors qu'un problème de mécanique pour  $x_1(t)$  seul doit pouvoir se résoudre avec vitesse et position initiales. Le problème est qu'on a perdu de l'information dans la dérivation au cours de l'élimination. Il faut exprimer  $\ddot{x}_1(0)$  et  $\ddot{\ddot{x}}_1(0)$  en fonction de  $x_2(0)$  et  $\dot{x}_2(0)$ .

Une méthode plus simple consiste à faire apparaître la somme  $\sigma = x_1 + x_2$  et la différence  $\delta = x_1 - x_2$  qui satisfont à des équations découplées

$$\ddot{\sigma} + \sigma = 0, \quad \ddot{\delta} + 3\delta = 0, \quad (2.55)$$

dont la résolution est immédiate et qui ont, de plus, une interprétation physique transparente : si on lance les des mobiles parallèlement et avec la même vitesse, on aura toujours  $x_1 = x_2$  par symétrie, le ressort central est neutralisé, et on est réduit aux oscillations d'une masse unique  $2m$  entre deux ressorts. Par contre si le lancement est antiparallèle pour les déplacements et vitesses, on aura toujours  $x_1 + x_2 = 0$  et tout se passe comme si le milieu du ressort central était immobilisé : chaque masse  $m$  est retenue par une raideur  $k$  d'un côté et  $2k$  de l'autre, d'où le facteur 3 dans l'équation.

Dans le cas où les masses et ressorts n'ont pas la même valeur à gauche et à droite, on peut ré-écrire (2.52) comme

$$\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

Noter que la matrice  $2 \times 2$  notée  $A$  n'est pas explicitement symétrique, mais a des valeurs propres réelles. On peut faire apparaître une matrice explicitement symétrique par le changement de fonction  $x_i \rightarrow y_i = \sqrt{m_i}x_i$  (certains logiciels de diagonalisation seront plus rapides si on spécifie que la matrice est réelle et symétrique). Par diagonalisation, on se ramène à des équations découplées.

Un autre exemple est celui du mouvement d'une particule classique dans un champ magnétique, de la forme

$$m\dot{v}_x = qBv_y, \quad m\dot{v}_y = -qBv_x, \quad (2.57)$$

avec une matrice qui est cette fois antisymétrique.

Plus généralement, dans un champ électromagnétique uniforme et constant, le mouvement relativiste d'une particule chargée est de la forme

$$\dot{\tilde{p}} = \frac{d\tilde{p}}{d\tau} = F\tilde{p}(\tau), \quad (2.58)$$

où  $\tau$  est le temps propre, la matrice  $4 \times 4$  notée  $F$  contient la charge et les composantes des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ , et  $\tilde{p}$  est le quadrivecteur énergie-impulsion.

Toutes ces équations peuvent se ramener à une équation du type

$$\dot{x} = Ax, \quad (2.59)$$

où  $x$  est un vecteur de fonctions inconnues. À ce stade, on peut diagonaliser la matrice, ce qui ramène à des équations découplées  $\dot{y}_i = \lambda_i y_i(t)$ , puis revenir aux fonctions initiales  $x_i(t)$ . Mais on peut aussi tenter une résolution directe

$$x = \exp(A)x(0), \quad (2.60)$$

où l'exponentielle de matrice est définie comme

$$\exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}. \quad (2.61)$$

Mais toute matrice possède un polynôme minimal qu'elle annule, et par conséquent, il y a un nombre fini de puissances de  $A$  indépendantes. Donc

$$\exp(A) = \mathbb{1} + \alpha_1 A + \dots + \alpha_m A^m. \quad (2.62)$$

Si on arrive à connaître ces coefficients  $\alpha_i$ , la diagonalisation peut être évitée. Prenons le cas d'un spin 1/2 dans un champ magnétique. Son équation d'évolution est du type

$$\dot{x} = a\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}x, \quad (2.63)$$

où le vecteur à deux composantes  $x$  contient les composantes  $s_z = \pm\hbar/2$ ,  $\hat{n}$  est la direction du champ,  $a$  une constante, et  $\boldsymbol{\sigma}$  l'ensemble des trois matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.64)$$

Il est évident qu'une rotation des axes pour s'aligner sur  $\hat{n}$  donne  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}$  de la forme du  $\sigma_z$  ci-dessus, donc diagonal. Mais on peut éviter cette rotation en remarquant que  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n})^2 = \mathbb{1}$ . La solution est donc  $x(t) = [\text{ch } a \mathbb{1} + \text{sh } a \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}]x(0)$  ou sa variante de trigonométrie circulaire si  $a = ia'$  avec  $a' \in \mathbb{R}$ .

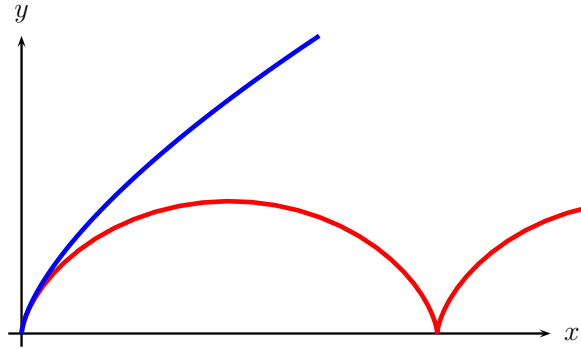


FIGURE 3 – Trajectoire d'une particule lâchée au repos dans un champ  $E$  et un champ  $B$  uniformes, constants et égaux en module (en unités où  $c = 1$ ). Rouge : approximation non-relativiste (à traiter comme exercice); bleu : calcul relativiste.

Il arrive de rencontrer des problèmes où la diagonalisation est impossible. C'est le cas pour le mouvement relativiste d'une particule chargée dans des champs  $E$  et  $B$  perpendiculaires et de même intensité (dans des unités où la vitesse de la lumière est  $c = 1$ ). Les équations sont, avec  $qE/m = qB/m = a$ , et le temps propre comme variable,

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= a p_x, \\ \dot{p}_x &= a p_0 + a p_y, \\ \dot{p}_y &= -a p_x, \end{aligned} \quad (2.65)$$

qu'on peut résoudre sans difficulté, en les combinant empiriquement. Mais si on insiste sur une formulation matricielle,

$$\dot{\tilde{p}} = a A \tilde{p}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

on se retrouve avec une matrice  $A$  nilpotente ( $A^3 = 0$ ), dont les valeurs propres sont nulles, et qui n'est donc pas diagonalisable (sinon elle serait identiquement nulle). Mais l'exponentiation est évidemment très facile, car la série (2.62) n'a que 3 termes !

Le cas ci-dessus est intéressant pour la dynamique relativiste, car le mouvement non-relativiste est qualitativement modifié lors du traitement relativiste. On démontre que la trajectoire est déduite de l'énergie-impulsion par simple intégration par rapport au temps propre, soit

$$m \frac{dt}{d\tau} = p_0(\tau), \quad m \frac{dx}{d\tau} = p_x(\tau), \quad m \frac{dy}{d\tau} = p_y(\tau). \quad (2.67)$$

On obtient (voir Fig. 3) une trajectoire qui ne se retourne pas, au contraire de la cycloïde non-relativiste.

Dans le cas plus général du mouvement relativiste dans un champ électromagnétique constant, régi par (2.58), l'exponentiation de la matrice  $4 \times 4$  s'avère plus délicate. Une méthode possible [3] consiste à récrire l'équation d'évolution non plus comme celle d'un quadrivecteur, mais comme celle d'une matrice  $2 \times 2$ , soit  $\xi = \tilde{p}_0 \mathbb{1} + \tilde{p}_x \sigma_x + \tilde{p}_y \sigma_y + \tilde{p}_z \sigma_z$ , de la forme  $\dot{\xi} = f^\dagger \cdot \xi + \xi \cdot f$ , où de nouveau le point indique la dérivée par rapport au temps propre. Ici  $f$  est une matrice  $2 \times 2$  qui contient les champs électrique et magnétique, et qu'on peut exponentier facilement, pour aboutir à la solution  $\xi(t) = \exp(f^\dagger) \cdot \xi(0) \cdot \exp(f)$ . On ne peut évidemment pas faire cette réduction avec n'importe quelle matrice  $4 \times 4$ .

## 2.8 Équations aux dérivées partielles linéaires

On en rencontre souvent en physique, comme l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \alpha \Delta T(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.68)$$

ou l'équation de la corde vibrante

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2} = 0. \quad (2.69)$$

Le paradoxe est que la version unidimensionnelle de l'équation de la chaleur, pourtant de degré moins élevé, est plus délicate à résoudre que l'équation de la corde.

La linéarité fait que les solutions forment un espace vectoriel, mais de dimension infinie. Ce qui pose des problèmes délicats pour savoir si un ensemble de solutions indépendantes forme une base complète et si le développement d'une solution quelconque sur cette base est convergent.

### 2.8.1 EDP linéaires du premier ordre

Considérons d'abord

$$A(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + B(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = 0, \quad (2.70)$$

sans terme en  $u(x, y)$ . Sur une ligne du plan  $(x, y)$  où  $u(x, y)$  serait constant, on aurait  $u_x dx + u_y dy = 0$ . Les lignes de  $u(x, y)$  constant sont donc les solutions de l'équation différentielle *ordinaire*

$$\frac{dx}{A(x, y)} = \frac{dy}{B(x, y)}, \quad (2.71)$$

qui implique une constante d'intégration arbitraire, soit  $c = h(x, y)$ , où  $h$  est une fonction maintenant *connue*. On voit que  $u(x, y) = f(h(x, y))$ , où  $f$  est une fonction d'une variable *arbitraire* (mais tout de même différentiable) est la solutions générale. L'exemple sera proposé en TD de  $xu_x - 2yu_y = 0$ .

Une généralisation est

$$A(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + B(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + C(x, y)u(x, y) = 0. \quad (2.72)$$

Supposons que l'on ait trouvé une solution particulière  $u_0(x, y)$  de l'équation complète (2.72). On cherche  $u(x, y) = u_0(x, y)v(x, y)$ , et on trouve que  $v(x, y)$  satisfait l'équation précédente,  $A(x, y)v_x + B(x, y)v_y = 0$ , soit  $v(x, y)$  fonction arbitraire d'une certaine combinaison  $p(x, y)$  des variables. Au total  $u(x, y) = u_0(x, y)f(p(x, y))$ .

Par exemple, si on cherche à résoudre

$$y \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} - x \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + u(x, y) = 0, \quad (2.73)$$

on trouve rapidement  $u(x, y) = u_0(x, y)f(x^2 + y^2)$ . Le plus dur est de trouver une solution particulière. On peut vérifier que  $u_0(x, y) = \exp[\arctan(x/y)]$  convient.

Une autre généralisation, plus simple, est de considérer l'équation linéaire inhomogène

$$A(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + B(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + C(x, y)u(x, y) = K(x, y). \quad (2.74)$$

La connaissance d'une solution particulière permet, par soustraction, de se ramener au cas précédent.

### 2.8.2 EDP linéaires du second ordre

La plus connue est l'équation de propagation sans amortissement des ondes mécaniques ou électromagnétiques, qui dans les unités où la célérité est  $c = 1$  s'écrit

$$u_{xx}(x, t) = u_{tt}(x, t), \quad (2.75)$$

et a pour solution générale  $u(x, t) = f(x - t) + g(x + t)$  impliquant deux fonctions arbitraires  $f$  et  $g$ .

Presque aussi connue est l'équation de Laplace à deux dimensions, qui intervient en électrostatique et pour les écoulements irrotationnels,

$$u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) = 0, \quad (2.76)$$

dont la solution est  $u(x, y) = f(x + iy) + g(x - iy)$ , ce qui explique l'utilisation assez fréquente des fonctions analytiques de la variable complexe  $z = x + iy$ .

Plus généralement, pour

$$Au_{xx}(x, y) + 2Bu_{xy}(x, y) + Cu_{yy}(x, y) = 0, \quad (2.77)$$

on cherche une classe de solutions comme fonction arbitraire de  $x + \lambda y$ , ce qui donne l'équation en  $\lambda$

$$A + 2B\lambda + C\lambda^2 = 0, \quad (2.78)$$

avec en général deux solutions, réelles si  $B^2 - AC > 0$  comme dans le cas des ondes ou complexes comme dans le cas de l'électrostatique à deux dimensions. Si  $B^2 - AC = 0$ , il n'y a qu'une solution  $\lambda$ , et la solution générale est  $u(x, y) = f(x + \lambda y) + xg(x + \lambda y)$ . On peut vérifier qu'on aurait pu choisir  $y$  plutôt que  $x$ , au prix d'une redéfinition des fonctions.

### 2.8.3 EDP linéaire, mais de degré inhomogène

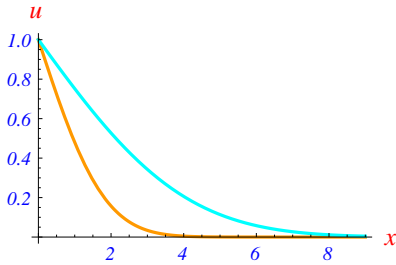


FIGURE 4 – Réponse en température à un choc thermique (ici  $u_0 = 1$ ), en unités où  $a = 1$ . À deux instants différents, ici  $t = 1$  et  $t = 5$ , les solutions sont déduites par affinité d'axe vertical.

Autrement dit, un changement  $t \rightarrow \lambda t$  résulte en  $x \rightarrow \mu x$ . Pour préserver l'équation, il faut que  $\lambda = \mu^2$ . Ce qui signifie que l'on cherche une fonction de  $z = x/\sqrt{t}$ , soit  $u(x, t) = f(z)$ . En reportant, on trouve

$$f''(z) + \frac{z}{2}f'(z) = 0, \quad (2.80)$$

qui est du premier ordre en  $f'$ , et, avec les conditions limites  $f(0) = 1$  et  $f(+\infty) = 0$ , donne bien

$$f(z) = \text{erf}_c(z/2) \quad (2.81)$$

soit

$$u(x, t) = \Theta(t) u_0 \text{erf}_c\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right). \quad (2.82)$$

Le prototype est l'équation de la chaleur à une dimension d'espace

$$u_{xx}(x, t) = au_t(x, t), \quad a > 0, \quad (2.79)$$

pour laquelle on peut choisir  $a = 1$  pour simplifier ou garder  $a$  pour contrôler les unités. Il a déjà été souligné que cette équation est paradoxalement plus difficile que l'équation de degré plus élevé  $u_{xx} = u_{tt}$ , mais de degré homogène. Parmi les solutions de (2.79) figure le cas particulier d'une solution dont les profils en  $x$  à des  $t$  différents sont homothétiques. Un exemple où un tel comportement est soupçonné est celui du choc thermique : à l'extrémité d'une barre semi-infinie, de température initiale  $u = 0$  par convention, on impose pour  $t > 0$  une température  $u(0, t) = 1$  (on pourra ensuite multiplier par n'importe quelle constante dimensionnée).

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

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\zeta^2} d\zeta, \quad \operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-\zeta^2} d\zeta. \quad (2.83)$$

Nous retrouverons le résultat (2.82) par une autre méthode dans le chapitre sur la transformée de Laplace.

### 2.8.4 Classification des équations aux dérivées partielles linéaires

Pour une équation à une seule variable  $y''(x) + ay(x) = 0$ , il y a une différence qualitative importante de comportement des solutions selon le signe de  $a$ . Dans l'un des cas, on a des oscillations, dans l'autre une explosion exponentielle quand  $x \rightarrow +\infty$  ou  $-\infty$  ou les deux.

La généralisation aux équations aux dérivées partielles est la suivante. Elle est globale pour des coefficients constants  $A, B, \dots$ , ou locale dans le cas contraire.

Imaginons l'équation du second ordre

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + \dots = 0, \quad (2.84)$$

où  $u_{xy} = \partial^2 u / (\partial x \partial y)$ , etc. Les points indiquent des dérivées d'ordre 1 ou la fonction  $u(x, y)$  ou un terme constant. Les termes d'ordre 2 sont analogues à une conique d'équation cartésienne

$$Ax^2 + 2Bxy + Cy^2 + \dots = 0, \quad (2.85)$$

ce qui inspire le vocabulaire. Selon que la forme quadratique s'annule ou non dans le domaine réel, on aura ou non des asymptotes ou branches paraboliques. Pour les équations aux dérivées partielles

1.  $B^2 - AC < 0$  Équation *elliptique*
2.  $B^2 - AC = 0$  Équation *parabolique*
3.  $B^2 - AC > 0$  Équation *hyperbolique*

Pour des équations avec plus que deux variables, la classification compte les valeurs propres positives.

### 2.8.5 Factorisation

Pour une corde coincée entre deux extrémités fixes en  $x = 0$  et  $x = L$ , et soumise à l'équation  $c^2 y_{xx}(x, t) = y_{tt}(x, t)$  on peut utiliser la solution générale  $y(x, t) = f(x - ct) + g(x + ct)$ , mais il existe une manière directe, qui consiste à chercher des solutions particulières  $y(x, t) = A(x)B(t)$ . Avec quelques précautions sur les annulations possibles, on arrive à

$$\frac{A''(x)}{A(x)} = c^2 \frac{B''(t)}{B(t)}, \quad (2.86)$$

et la valeur commune est forcément une constante, soit  $K$ . Comme  $A$  doit s'annuler en  $x = 0$  et en  $x = L$ , la concavité doit retourner la fonction et on ne voit guère que  $K < 0$ , soit  $K = -k^2$ . D'où  $A'(x) = y_m \sin(kx)$  et donc  $k = k_n = n\pi/L$  avec  $n \in \mathbb{N}^*$  et  $B(t) = \cos(\omega_n t + \phi_n)$ , avec  $\omega_n = ck_n$ , et toutes les superpositions possibles de ces modes.

On retrouve ces solutions pour une particule quantique dans un puits aux parois infinies.

Plus généralement, on cherche souvent une base de solutions de la forme

$$y(x, t) = A(x) \exp(i\omega t), \quad (2.87)$$

et la signification physique est immédiate.

C'est le cas pour passer de l'équation de Schrödinger à l'équation stationnaire, ou pour l'évolution de la température dans le sol, de séparer les variations diurnes et saisonnières. Si  $T(x, t) = \tau(x) \exp(i\omega t)$ , on obtient

$$i\omega\tau = \alpha\tau''(x), \quad (2.88)$$

dont on peut chercher des solutions  $\tau \propto \exp(kx)$  avec  $k$  complexe, c'est-à-dire combinant propagation et amortissement. Le fait le plus remarquable est que la vitesse de propagation et le taux d'amortissement en profondeur dépend de  $\omega$ , c'est à dire n'affecte pas de la même façon les hautes et basses fréquences.

**2.8.6 Systèmes d'équations aux dérivées partielles**

Pour mémoire. L'exemple le plus important en physique est celui des équations de Maxwell.



## 3 Transformée de Laplace

### 3.1 Motivation

**PRE**VENONS 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. 5. 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), qui correspond

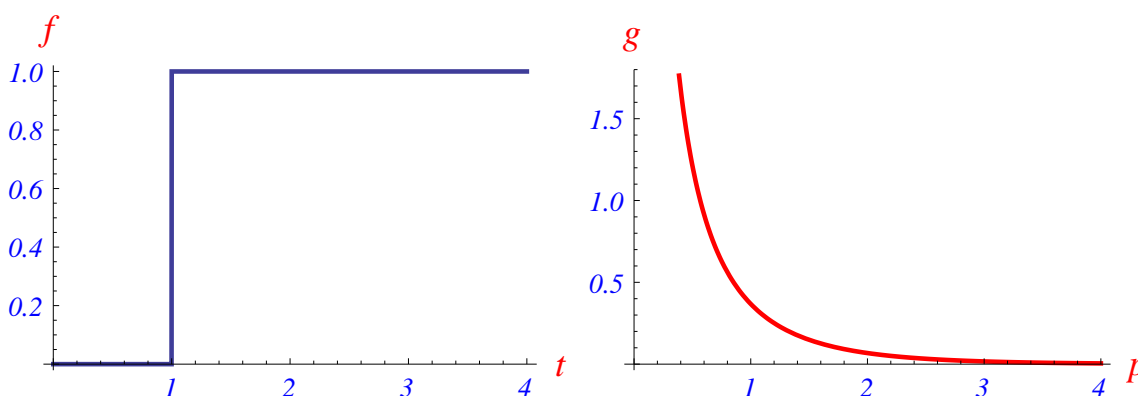


FIGURE 5 – Fonction pas (gauche) et sa transformée de Laplace (droite)

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.

### 3.2 Définition

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

$$g(p) = \int_0^{+\infty} f(t) \exp(-pt) dt, \quad (3.1)$$

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  $t = 0$ .

### 3.3 Exemples

La table 1, non exhaustive, donne quelques TL.

### 3.4 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  $f(at)$ .

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

$f(t)$ pour $t \geq 0$	$\mathcal{L}(\Theta f)$
1	$\frac{1}{p}$
$e^{at}$	$\frac{1}{p-a}$
$t^n$	$\frac{n!}{p^{n+1}} (n = 0, 1, \dots)$
$\sin at$	$\frac{a}{p^2 + a^2}$
$\cos at$	$\frac{p}{p^2 + a^2}$
$\text{sh } at$	$\frac{a}{p^2 - a^2}$
$\text{ch } at$	$\frac{p}{p^2 - a^2}$
$\Theta(t-a)$	$\frac{e^{-ap}}{s}$
$\delta(t-a)$	$\exp(-ap)$
$f'(t)$	$pg(p) - f(0)$
$f''(t)$	$p^2 g(p) - pf(0) - f'(0)$
$\int_0^t f(u) du$	$g(p)/p$

**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,

$$\int_0^{+\infty} f'(t) \exp(-pt) dt = p g(p) - f(0) \tag{3.2}$$

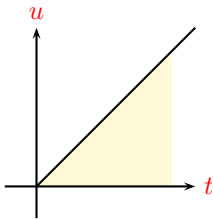
et plus généralement

$$\int_0^{+\infty} f^{(n)}(t) \exp(-pt) dt = p^n g(p) - p^{n-1} f(0) - p^{n-2} f'(0) - \dots - f^{(n-1)}(0) . \tag{3.3}$$

**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)

$$f(t) = (f_1 * f_2)(t) = \int_0^t f_1(u) f_2(t-u) du . \tag{3.4}$$



La TL est

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

FIGURE 6 – Domaine d'intégration pour la transformée de Laplace d'une convolution

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

$$g(p) = g_1(p) g_2(p) . \tag{3.5}$$

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

$$f(0^+) = \lim_{p \rightarrow \infty} p g(p) , \tag{3.6}$$

et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{p \rightarrow 0} p g(p) , \tag{3.7}$$

### 3.5 Transformée inverse

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

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(pt) g(p) dp . \tag{3.8}$$

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

$$g(p) = \frac{1}{p^2 + p + 1} = \frac{1}{i\sqrt{3}} \left[ \frac{1}{p - j} - \frac{1}{p - j^2} \right], \quad (3.9)$$

pour obtenir

$$f(t) = \frac{1}{i\sqrt{3}} [\exp(jt) - \exp(j^2t)] = \frac{2}{\sqrt{3}} \exp(-t/2) \sin(\sqrt{3}t/2). \quad (3.10)$$

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

$$g(p) = \frac{1}{(p + 1/2)^2 + 3/4} \quad (3.11)$$

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 (3.11).

### 3.6 Application aux oscillateurs linéaires

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

$$\ddot{x}(t) + a^2x(t) = 0, \quad (3.12)$$

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

$$y(p) = \frac{px_0 + \dot{x}_0}{p^2 + a^2}, \quad (3.13)$$

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

$$x(t) = x_0 \cos(at) + (\dot{x}_0/a) \sin(at). \quad (3.14)$$

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

$$\ddot{x}(t) + 2b\dot{x}(t) + a^2x(t) = 0. \quad (3.15)$$

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

$$u(t) = \exp(bt) x(t), \quad \ddot{u}(t) + (a^2 - b^2)u(t) = 0, \quad (3.16)$$

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

La TL est

$$y(p) = \frac{(p + 2b)x_0 + \dot{x}_0}{p^2 + 2bp + a^2}, \quad (3.17)$$

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

$$y(p) = \frac{(p + b)x_0 + bx_0 + \dot{x}_0}{(p + b)^2 + a^2 - b^2}, \quad (3.18)$$

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

$$x(t) = \exp(-bt) \left[ x_0 \operatorname{ch}(\sqrt{b^2 - a^2}t) + (bx_0 + \dot{x}_0) \operatorname{sh}(\sqrt{b^2 - a^2}t) / \sqrt{b^2 - a^2} \right]. \quad (3.19)$$

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

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

$$\ddot{x}(t) + 2b\dot{x}(t) + a^2x(t) = g \cos(ct) . \quad (3.20)$$

La TL est maintenant donnée par

$$(p^2 + 2bp + a^2)y(p) = (p + 2b)x_0 + \dot{x}_0 + \frac{g}{p^2 + c^2} . \quad (3.21)$$

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  $y(p)$  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.

### 3.7 Courbe tautochrone

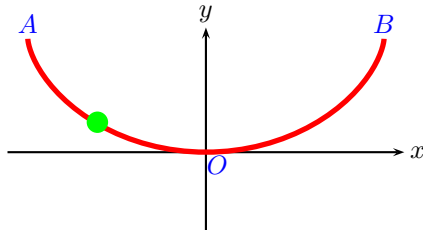


FIGURE 7 – Trajectoire dans un champ de gravitation uniforme

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

$$m\dot{s}^2/2 + mgy = mgy_0 . \quad (3.22)$$

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

$$m\dot{s}^2 + ks^2 = ks_0^2 . \quad (3.23)$$

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

$$\frac{dx}{ds} = \sqrt{1 - \frac{s^2}{4a^2}} , \quad (3.24)$$

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

$$\frac{dx}{d\alpha} = 4a \cos^2 \alpha = 2a [1 + \cos(2\alpha)] , \quad (3.25)$$

et finalement

$$x = a [\alpha + \sin(2\alpha)/2] \quad y = a \sin^2 \alpha , \quad (3.26)$$

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 (3.22) 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  $y_0$ .

$$\frac{T(y_0)}{4} = \int_0^{y_0} \frac{ds}{\sqrt{2g(y_0 - y)}}. \quad (3.27)$$

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

$$T(y_0) = \int_0^{y_0} \frac{f(y) dy}{\sqrt{2g(y_0 - y)}}. \quad (3.28)$$

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  $T(y_0)$

$$\tilde{T}(p) = \frac{2\sqrt{2\pi}}{\sqrt{g}} \frac{\tilde{f}(p)}{\sqrt{p}}. \quad (3.29)$$

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

$$\tilde{f}(p) = \frac{T_0\sqrt{g}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{p}}, \quad (3.30)$$

et donc par inversion

$$f(y) = \frac{T_0\sqrt{g}}{2\pi\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{y}}, \quad (3.31)$$

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

### 3.8 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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (3.32)$$

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

$$u(x, t) = \begin{cases} u_0 & \text{pour } x \leq 0, \\ u_0(1 - x/b) & \text{pour } 0 < x < b, \\ 0 & \text{pour } x \geq b. \end{cases} \quad (3.33)$$

**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 (3.32) 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)

$$\underline{u}(x, t) = u_0 \exp(i\omega t + kx), \quad (3.34)$$

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,

$$u(x, t) = u_0 \cos(\omega t - x\sqrt{\omega/(2a)}) \exp(-x\sqrt{\omega/(2a)}). \quad (3.35)$$

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 (3.32) 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. 8)

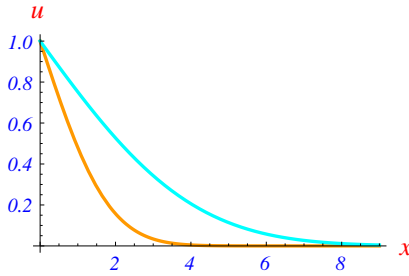


FIGURE 8 – Réponse en température à un choc thermique (ici  $u_0 = 1$ ), en unités où  $a = 1$ . À deux instants différents, ici  $t = 1$  et  $t = 5$ , les solutions sont déduites par affinité d'axe vertical.

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

$$U(x, p) = \frac{u_0}{p} \exp(-x\sqrt{p/a}). \quad (3.36)$$

On peut vérifier (voir appendice A) qu'il s'agit bien de la TL de la solution (2.82) obtenue au chapitre précédent :

$$u(x, t) = \Theta(t) u_0 \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{at}} \right). \quad (3.37)$$

Comme application, on peut étudier la réponse à un créneau  $u_0 [\Theta(t) - \Theta(t - t_0)]$  (voir Fig. 9, haut à gauche). La solution est

$$u(x, t) = u_0 \left[ \Theta(t) \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) - \Theta(t - t_0) \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{a(t - t_0)}} \right) \right]. \quad (3.38)$$

La figure 9 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.

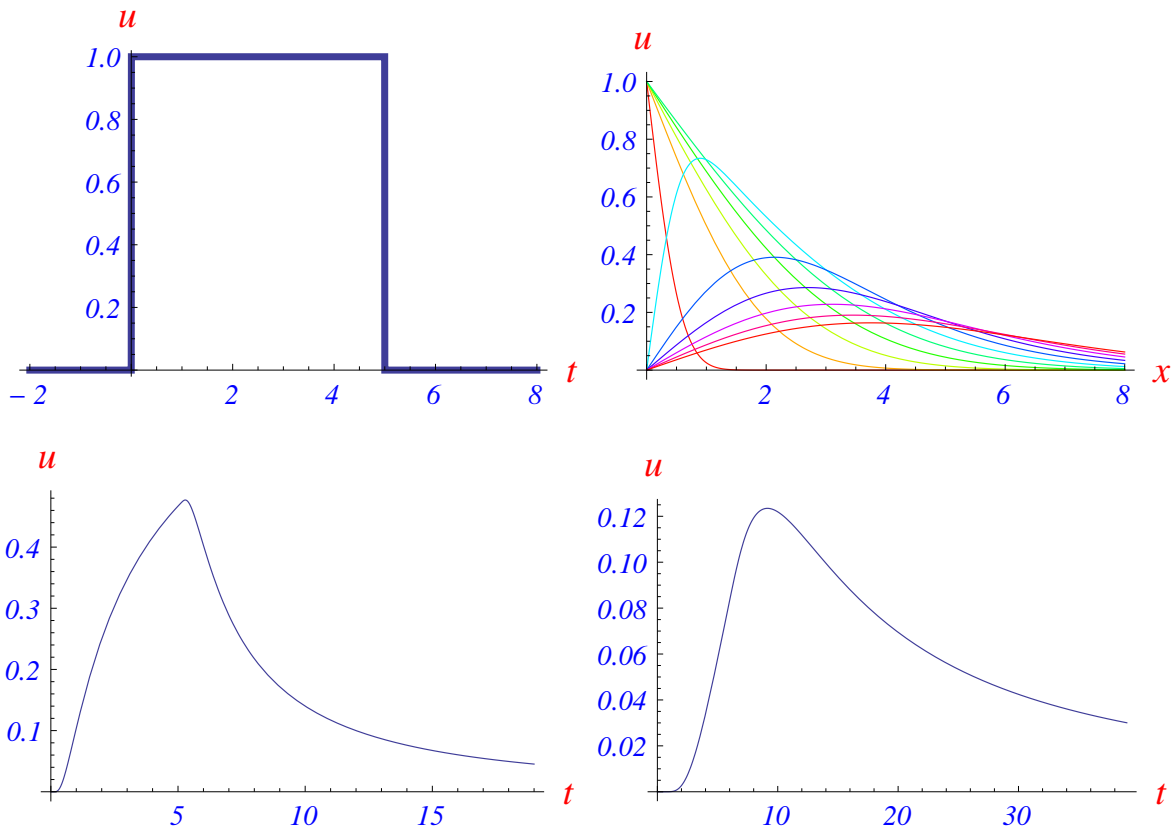



FIGURE 9 – Réponse en température à un échelon (ici  $u_0 = 1$  et  $t_0 = 5$ ), en unités où  $a = 1$ .



## 4 Transformée de Fourier

### 4.1 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.

### 4.2 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

$$\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} x_n \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad k = 0, \dots, N - 1, \quad (4.1)$$

et la transformée inverse est donnée par

$$x_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k \exp\left(\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad n = 0, \dots, N - 1. \quad (4.2)$$

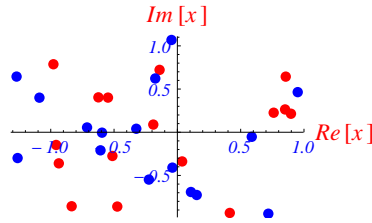


FIGURE 10 – Images (bleu) par transformée discrète de 36 points (rouge) choisis par tirage au sort dans le carré unité du plan complexe

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

$$\sum_{n=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} kn\right) \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} k'n\right) = N \delta_{kk'}, \quad (4.3)$$

on démontre facilement les identités de Plancherel et Parseval

$$\sum_{n=0}^{N-1} x_n y_n^* = \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k \tilde{y}_k^*, \quad \sum_{n=0}^{N-1} |x_n|^2 = \sum_{k=0}^{N-1} |\tilde{x}_k|^2. \quad (4.4)$$

Un exemple est donné sur la Fig. 10.

Une variante est la transformée de Fourier discrète *centrée*

$$\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^N x_n \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} kn\right), \quad k = -N, \dots, N, \quad (4.5)$$

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

$$\sum_{n=-N}^N x_n y_n^* = \sum_{k=-N}^N \tilde{x}_k \tilde{y}_k^*, \quad \sum_{n=-N}^N |x_n|^2 = \sum_{k=-N}^N |\tilde{x}_k|^2. \quad (4.6)$$

### 4.3 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 commode d'analyser son contenu par une sinusoïde de pulsation fondamentale  $\omega$ , complétée par des harmoniques de fréquence  $n\omega$ , où  $n$  est entier.

$$f(t) = \sum_n b_n \sin(n\omega t). \quad (4.7)$$

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

$$\int_{-T/2}^{+T/2} \sin(n\omega t) \sin(m\omega t) dt = \delta_{nm} \pi/\omega = \delta_{nm} T/2. \quad (4.8)$$

on obtient

$$b_n = \frac{\omega}{\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt = \frac{4}{T} \int_0^{+T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt. \quad (4.9)$$

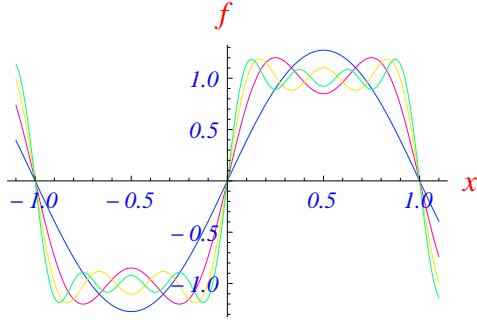


FIGURE 11 – Approximation d'un créneau par séries de Fourier avec un nombre croissant de termes

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 (4.10) en ces points sont

$$f_i = f^{(N)}(x_i) = \sum_{n=1}^N b_n \sin\left(\frac{ni}{N+1}\right), \quad (4.11)$$

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

$$b_n = \frac{2}{N+1} \sum_{i=1}^N f_i \sin\left(\frac{ni}{N+1}\right), \quad (4.12)$$

Pour une série finie, on a donc  $\sum |b_n|^2 = (2/(N+1)) \sum |f_i|^2$ . 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

$$\int_0^{T/2} |f(x)|^2 dx = \frac{4}{T} \sum_{n=0}^{\infty} |b_n|^2. \quad (4.13)$$

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

$$\int_0^{T/2} g^*(x) f(x) dx = \frac{4}{T} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* b_n. \quad (4.14)$$

#### 4.4 Autres séries de Fourier

Pour une fonction paire périodique, de pulsation  $\omega$ , on définit de même

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_n a_n \cos(n\omega t), \quad (4.15)$$

Un exemple est donné sur la Fig. 11, c'est le classique créneau approché par une série trigonométrique. La convergence est évidemment très délicate au voisinage des points anguleux, car on cherche à reproduire une fonction à dérivée discontinue par une somme de fonctions indéfiniment dérivables.

Une propriété intéressante des coefficients  $b_n$ , utilisée par exemple pour la résolution numérique des équations différentielles, est leur relation avec la valeur de la fonction en des points régulièrement espacés. Soit

$$f^{(N)}(t) = \sum_{n=1}^N b_n \sin(n\omega t), \quad (4.10)$$

une série limitée à  $N$  termes, qui peut-être considérée comme une approximation d'une fonction  $f(t)$ .

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

$$a_n = \frac{\omega}{\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(n\omega t) dt, \tag{4.16}$$

soit valable aussi pour  $n = 0$ .

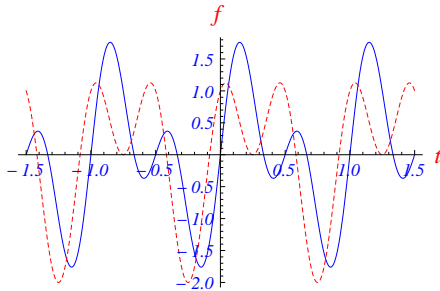


FIGURE 12 – Superposition d’un fondamental et d’une harmonique, en phase ou décalée.

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

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_n [a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)] \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_n c_n \cos(n\omega t + \varphi_n), \end{aligned} \tag{4.17}$$

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

Un exemple est donné sur la Fig. 12, 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 transmission 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,

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n \exp(in\omega t), \quad d_n = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \exp(-in\omega t) dt, \tag{4.18}$$

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

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} |d_n(f)|^2 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt = \frac{1}{T} \int_0^T |f(t)|^2 dt = \|f\|^2. \tag{4.19}$$

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.

### 4.5 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  $B < 0$  permettraient des oscillations dans un domaine limité d’amplitudes. La loi de Newton donne donc

$$\ddot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t)^3 = 0. \tag{4.20}$$

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

$$x(t) = b_1 \sin(\omega t) + b_2 \sin(2\omega t) + b_3 \sin(3\omega t) \cdots \quad (4.21)$$

En utilisant l'identité

$$\sin^3(\alpha) = \frac{3 \sin(\alpha) - \sin(3\alpha)}{4}, \quad (4.22)$$

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,

$$\begin{aligned} -\omega^2 b_1 + A b_1 + (3/4) B b_1^3 + \cdots &= 0 \\ -9\omega^2 b_3 + A b_3 - B b_1^3/4 + \cdots &= 0, \end{aligned} \quad (4.23)$$

ce qui donne les premières corrections

$$\omega = \sqrt{A} \left( 1 + \frac{3 B b_1^2}{8 A} + \cdots \right), \quad b_3 = -\frac{B b_1^3}{32 A} + \cdots, \quad (4.24)$$

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

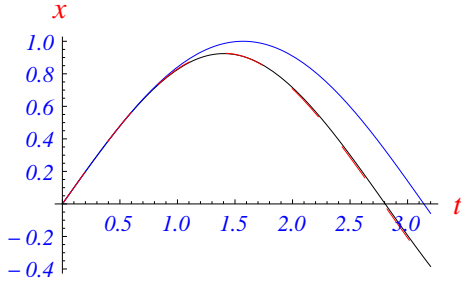


FIGURE 13 – Loi horaire dans la phase montante de l'oscillateur anharmonique  $m = 1$ ,  $f(x) = -x - 0.4 x^3$  à l'approximation harmonique (courbe bleue), avec un développement en série de Fourier au premier ordre dans l'anharmonicité (rouge pointillé) et exacte (noire).

La figure 13 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,

$$\dot{x}^2 + A x^2 + \frac{B}{2} x^4 = 1 = A x_m^2 + \frac{B}{2} x_m^4, \quad (4.25)$$

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

$$\frac{T}{4} = \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^2} \sqrt{1 + B x_m^2 (1+u^2)/(2A)}}, \quad (4.26)$$

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.

Le changement de variable  $u = \sin \theta$  permet de transformer cette intégrale généralisée en intégrale ordinaire, et de développer en puissances de  $B$ , soit

$$\frac{T}{4} = \int_0^{\pi/2} d\theta \left[ 1 + \frac{B}{4A} x_m^2 (1 + \sin^2 \theta) + \cdots \right] = \frac{\pi}{2} \left[ 1 + \frac{3B}{8A} x_m^2 + \cdots \right], \quad (4.27)$$

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

$$\ddot{\vartheta} + (g/\ell) \sin \vartheta = 0, \quad (4.28)$$

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

$$\omega_0 \frac{T}{2} = \int_{-\theta_m}^{+\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{2(\cos \theta - \cos \theta_m)}} = \frac{1}{2} \int_{-\theta_m}^{+\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2(\theta_m/2) - \sin^2(\theta/2)}}, \quad (4.29)$$

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

$$\omega_0 \frac{T}{4} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \sin^2 \phi \sin^2(\theta_m/2)}}, \quad (4.30)$$

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

$$T = T_0 \left[ 1 + \frac{\theta_m^2}{16} + \dots \right], \quad (4.31)$$

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

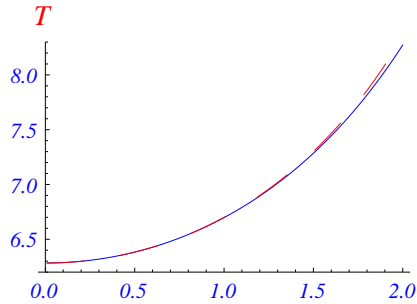
Mais on peut aussi utiliser les séries de Fourier. Pour toute amplitude  $\vartheta_m$ , l'angle  $\vartheta(t)$  est une fonction périodique et on peut chercher

$$\vartheta(t) = b_1 \sin(\omega t) + \dots, \quad (4.32)$$

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

$$-\vartheta_m \omega^2 + \frac{g}{\ell} \frac{\omega}{\pi} \int_{-\pi/\omega}^{+\pi/\omega} \sin[\vartheta_m \sin(\omega t)] \sin(\omega t) dt = 0. \quad (4.33)$$

FIGURE 14 – 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  $\omega$ , et de déduire  $T$ . On voit sur la Fig. 14 que la réponse est très proche du résultat exact, même pour des valeurs grandes (non physiques) de l'amplitude.

## 4.6 Transformée de Fourier d'une fonction

### 4.6.1 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.

#### 4.6.2 Définition et premières propriétés

La TF d'une fonction est définie comme

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-ipx) dx. \quad (4.34)$$

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 paire et réelle,  $\tilde{f}$  aussi. Si  $f$  est impaire,  $\tilde{f}$  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 (4.34), et donc de plus en plus d'annulation entre les parties positives et négatives des intégrales donnant  $\Re \tilde{f}$  et  $\Im \tilde{f}$ .

#### 4.7 Exemples

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

#### 4.8 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.

## 4.9 Transformation inverse

Le résultat est

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(p) \exp(ipx) dp. \quad (4.35)$$

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 (4.35) 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 (4.35) 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

$$\tilde{f}(p) \simeq \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{n=+N} f_n \exp[-in p \sqrt{2\pi/(2N+1)}], \quad f_n = f(n \sqrt{2\pi/(2N+1)}). \quad (4.36)$$

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

$$\tilde{f}_m \simeq g_m = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{n=+N} f_n \exp[-i2\pi n m/(2N+1)], \quad (4.37)$$

ce qui correspond à une TFDC. Donc inversement

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{m=-N}^{m=+N} g_m \exp[+i2\pi n m/(2N+1)], \quad (4.38)$$

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, [1]. Soit

$$f_T(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } |x| < T/2 \\ 0 & \text{si } |x| > T/2, \end{cases} \quad (4.39)$$

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 (4.18),

$$h_T(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n \exp(-in\omega x) \quad (4.40)$$

dont les coefficients sont donnés par

$$d_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} h_T(x) \exp(in\omega x) dx. \quad (4.41)$$

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

#### 4.10 Identités de Plancherel et Parseval

Le résultat est

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(p)|^2 dp, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}^*(p) \tilde{f}(p) dp, \quad (4.42)$$

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,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{2N+1}} \sum_{n=-N}^{+N} |f_n|^2 = \sqrt{\frac{2\pi}{2N+1}} \sum_{n=-N}^{+N} |g_n|^2 \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{f}(p)|^2 dp, \quad (4.43)$$

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 une intégrale simple dont les bornes augmentent indéfiniment ; approximation d'une intégrale simple par une suite de sommes de Riemann.

#### 4.11 Théorèmes sur les écarts quadratiques

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

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \Big/ \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx, \quad (4.44)$$

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

$$\sigma \tilde{\sigma} \geq \frac{1}{2} \quad (4.45)$$

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

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{2a}}, \quad \tilde{\sigma} = \sqrt{\frac{a}{2}}, \quad (4.46)$$

ce qui montre l'égalité.

Dans le cas général, considérons

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{f}(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx \int_{-\infty}^{+\infty} |f'(x)|^2 dx, \quad (4.47)$$

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

$$I \geq \left| \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) f'(x) dx \right|^2 = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \quad (4.48)$$

par intégration par parties. Si  $f$  complexe, l'inégalité est aggravée, car  $|z| \geq |\operatorname{Re} z| = (z + z^*)/2$  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.



### 4.12 Transformée de Fourier multidimensionnelle

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

$$\tilde{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int \dots \int f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}) d^{(n)}\mathbf{r}. \quad (4.49)$$

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

$$\tilde{f}(p) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{1}{p} \int_0^{+\infty} f(r) \sin(pr) r dr. \quad (4.50)$$

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

$$\tilde{v}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{p^2 + \mu^2}, \quad (4.51)$$

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

$$\iiint \exp(-2\mu r) r^{-2} d^{(3)}\mathbf{r} = \frac{2\pi}{\mu} = \frac{2}{\pi} \iiint (p^2 + \mu^2)^{-2} d^{(3)}\mathbf{p}. \quad (4.52)$$

### 4.13 Applications de la transformée de Fourier

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

#### 4.13.1 Théorie du signal

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

#### 4.13.2 Équations différentielles et aux dérivées partielles

On peut reprendre les exemples vus avec la transformée de Laplace. Un autre est fourni par la célèbre *équation du télégraphe*. La transmission du signal correspond à la figure (empruntée à “Wikipedia”) On note  $L$  et  $R$  l’auto-inductance et la résistance par unité de longueur, et  $C$  et  $G$  la capacité et la conductance par unité de longueur entre la ligne et le sol. Pour une ligne parfaite,  $R = 0$  et  $G = 0$ , ce qui correspond aux équations

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} V(x, t) &= -L \frac{\partial}{\partial t} I(x, t), \\ \frac{\partial}{\partial x} I(x, t) &= -C \frac{\partial}{\partial t} V(x, t), \end{aligned} \quad (4.53)$$

qui se combinent dans l’équation de propagation parfaite

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} V = \frac{1}{LC} \frac{\partial^2}{\partial x^2} V. \quad (4.54)$$

qui fait apparaître la vitesse de propagation  $c = 1/\sqrt{LC}$  ds signaux.

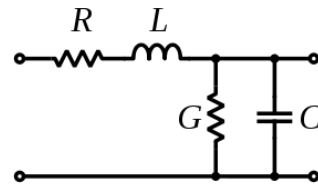


FIGURE 15 – Cellule élémentaire de longueur  $dx$  pour le télégraphe.

Avec une résistance non nulle dans la ligne et une conductance de fuite non nulle, les équations sont modifiées en

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} V(x, t) &= -L \frac{\partial}{\partial t} I(x, t) - RI(x, t), \\ \frac{\partial}{\partial x} I(x, t) &= -C \frac{\partial}{\partial t} V(x, t) - GV(x, t),\end{aligned}\quad (4.55)$$

qui se réduisent par élimination en

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} V = LC \frac{\partial^2}{\partial t^2} V + (RC + GL) \frac{\partial}{\partial t} V + GRV. \quad (4.56)$$

Nous noterons l'équation aux dérivées partielles comme

$$u_{tt} + (\alpha + \beta) u_t + \alpha \beta u = c^2 u_{xx}, \quad (4.57)$$

pour la fonction inconnue  $u(x, t)$ . Une TF partielle  $x \rightarrow k$  donne pour la transformée  $\hat{u}(k, t)$  l'équation différentielle

$$\hat{u}_{tt} + (\alpha + \beta) \hat{u}_t + (k^2 c^2 + \alpha \beta) \hat{u} = 0. \quad (4.58)$$

On retrouve l'équation d'un oscillateur amorti, soit en posant  $\hat{u} = f(t) \exp[-(\alpha + \beta)t/2]$ , l'équation en  $f$

$$f_{tt} + [k^2 c^2 - (\alpha - \beta)^2/4] f = 0, \quad (4.59)$$

qu'il est facile de résoudre. En général, on aura amortissement *et* dispersion.

Le cas particulier remarquable correspond à  $\alpha = \beta$ . Le signal est amorti mais la vitesse de propagation reste indépendante de la fréquence. La solution est du type

$$u(x, t) = \exp(-\alpha t) [F(x - ct) + G(x + ct)]. \quad (4.60)$$

### 4.13.3 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

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp(-i p x/\hbar) dx. \quad (4.61)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x)|^2 dp. \quad (4.62)$$

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

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle, \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle, \quad \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x)|^2 dp. \quad (4.63)$$

### 4.14 Oscillateur harmonique en mécanique quantique

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{K}{2} x^2. \quad (4.64)$$

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{Ka^2}{2} x^2. \tag{4.65}$$

et en choisissant  $mKa^4/\hbar^2 = 1$ ,

$$H = \hbar\sqrt{\frac{K}{m}} \left[ \frac{d^2}{dy^2} + x^2 \right] \equiv \hbar\sqrt{\frac{K}{m}} h. \tag{4.66}$$

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

$$\epsilon_0 = 1, \quad \varphi_0 = \exp(-x^2/2), \tag{4.67}$$

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

$$\epsilon_n = 1 + 2n, \quad \varphi_n = H_n(x) \exp(-x^2/2), \tag{4.68}$$

où  $H_n$  est un polynôme d'Hermite. On pourra le vérifier directement ou bien en utilisant les opérateurs élévateur 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.

#### 4.14.1 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  $\mu$  est la masse réduite et celui de  $x^2$   $K/2$ , où  $K$  est la constante de Hookes équivalente et les énergies sont proportionnelles à  $\sqrt{K/\mu} \propto \sqrt{ab}$ .

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

$$H_1 = p^2/(\mu) + \lambda r, \tag{4.69}$$

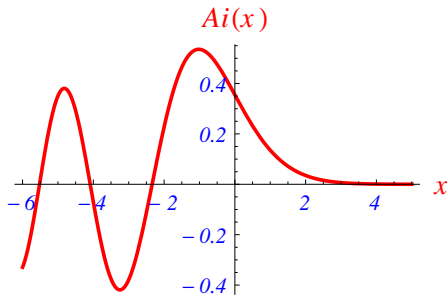


FIGURE 16 – Fonction d'Airy  $Ai(x)$

dont la version unidimensionnelle décrit les niveaux d'énergie des neutrons dans un champ gravitationnel (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  $\mu$  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 optimisant  $a$  pour un maximum de simplicité, on arrive en représentation

de position à

$$H_1 = \lambda^{2/3} (\mu/\hbar^2)^{-1/3} h_1, \quad h_1 = -\Delta_x + x \tag{4.70}$$

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

$$-u''(x) + xu(x) = \epsilon u(x), \quad u(0) = 0, \quad \int_0^\infty |u(x)|^2 dx < \infty, \tag{4.71}$$

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

$$-y''(x) + xy(x) = 0, \quad (4.72)$$

dont la solution régulière à l'infini est (à un facteur près) la fonction d'Airy  $\text{Ai}(x)$ , représentée sur la Fig. 16.

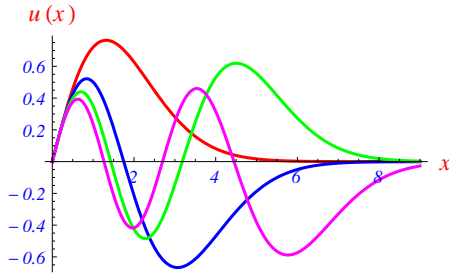


FIGURE 17 – Premiers états  $\ell = 0$  dans un potentiel linéaire. Les fonctions d'onde réduites sont ici normalisées.

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  $\epsilon$  est l'opposé d'un zéro de  $\text{Ai}(x)$ , 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. 17. On pourra démontrer à titre d'exercice que  $u_n(x) = \text{Ai}(x - \epsilon_n) / \text{Ai}'(-\epsilon_n)$  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 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 (4.69) permet celle de

$$H_2 = p + \alpha r^2, \quad (4.73)$$

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.

## 5 Distributions

### 5.1 Historique

 Une 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 un aperçu de la formulation plus rigoureuse.

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

$$I_g(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx, \quad (5.1)$$

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

$$I_\Theta(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f(x) dx = \int_0^{+\infty} f(x) dx, \quad (5.2)$$

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

$$I_\delta(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0), \quad (5.3)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g'(x) f(x) dx, \quad (5.4)$$

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

### 5.2 Lien entre les fonctions de Heaviside et de Dirac

À titre d'exemple, considérons de nouveau la fonction "pas" (5.2) et le pic de Dirac (5.3), 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,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f'(x) dx = -f(0) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx, \quad (5.5)$$

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)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [g(x) f'(x) + g'(x) f(x)] dx = 0, \quad (5.6)$$

incitant à considérer  $\delta$  comme la dérivée de  $\Theta$ , 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  $\Theta$  comme la limite quand  $a \rightarrow 0^+$  de

$$g_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq -a/2, \\ (x + a/2)/a & \text{si } -a/2 < x < a/2, \\ 1 & \text{si } a/2 \leq x, \end{cases} \quad (5.7)$$

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. 18.

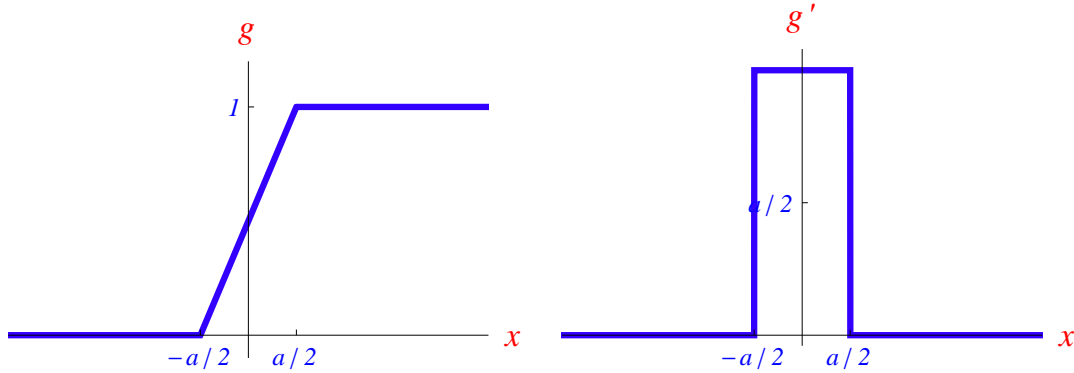


FIGURE 18 – Fonctions qui tendent vers les distributions de Heaviside et Dirac.

### 5.3 Théorie des distributions

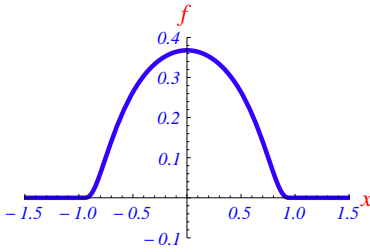


FIGURE 19 – Fonction à support compact et indéfiniment dérivable de l'équation (5.8)

Voici maintenant un exposé un peu plus rigoureux. Il convient d'abord de définir l'ensemble des fonctions test. Un maximum de précautions sont prises, même si, ultérieurement, les distributions seront appliquées à des fonctions moins contraintes. On considère les fonctions  $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$  d'une variable réelle et à valeurs complexes. Elles forment un espace vectoriel, dont on utilise souvent les sous-espaces suivants  $\mathcal{D} \subset \mathcal{S} \subset \mathcal{C}^\infty$ , à savoir du plus grand au plus petit

- l'espace  $\mathcal{C}^\infty$  des fonctions dérivables à n'importe quel ordre (et donc à dérivées continues),
- le sous-espace  $\mathcal{S}$  des fonctions précédentes dont toutes les dérivées décroissent rapidement, soit  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^m f^{(n)}(x) = 0 \forall n \in \mathbb{N}, \forall m \in \mathbb{N}$ ,
- le sous-espace  $\mathcal{D}$  des fonctions précédentes à support borné, i.e.,  $\exists a, b$  tels que  $f(x) = 0$  si  $x \notin [a, b]$ .

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

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{1-x^2}\right) & \text{si } |x| < 1, \\ 0 & \text{si } |x| > 1, \end{cases} \quad (5.8)$$

(voir figure Fig. 19), 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  $\mathcal{C}^\infty$ , soit  $\mathcal{S}$ , soit  $\mathcal{D}$ , soit un autre sous-espace, une distribution  $A$  est une application linéaire et continue

$$A : \mathcal{K} \mapsto \mathbb{C}, \quad (5.9)$$

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

$$(A, f_1 + f_2) = (A, f_1) + (A, f_2) \quad \text{et} \quad (A, \lambda f_1) = \lambda (A, f_1). \quad (5.10)$$

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

$$(g, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x) dx, \quad (5.11)$$

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

$$(\Theta, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(x) f(x) dx = \int_0^{+\infty} f(x) dx, \quad (5.12)$$

- La distribution de Dirac

$$(\delta, f) = f(0), \quad (5.13)$$

notée un peu abusivement

$$(\delta, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx, \quad (5.14)$$

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.

## 5.4 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

$$(A, f) = (A_1, f) + (A_2, f) \quad \forall f \in \mathcal{K}, \quad (5.15)$$

et le produit par un complexe  $\lambda$ ,

$$(\lambda A, f) = (A, \lambda f) \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (5.16)$$

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

$$(\alpha A, f) = (A, \alpha f) \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (5.17)$$

**Distribution translatée** L'idée est de généraliser la règle simple

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x-a) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x+a) dx \quad (5.18)$$

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

$$(A_a, f) = (A, {}^a f) \quad \text{avec} \quad {}^a f(x) = f(x+a), \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (5.19)$$

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,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(ax) f(x) dx = \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f(x/a) dx, \quad (5.20)$$

donc la règle se généralise en

$$(A(ax), f(x)) = \frac{1}{|a|} (A(x), f(x/a)), \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (5.21)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g'(x) f(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) f'(x) dx, \quad (5.22)$$

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

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

$$(X', f) = -(X, f'). \quad (5.23)$$

Par exemple, pour la distribution de Heaviside,

$$(\Theta', f) = -(H, f') = - \int_0^{+\infty} f'(x) dx = f(0) = (\delta, f). \quad (5.24)$$

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

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

$$(A^{(n)}, f) = (-1)^n f^{(n)}(0), \quad \forall f \in \mathcal{K}. \quad (5.25)$$

## 5.5 Distribution associée à une convolution

### 5.5.1 Définition du produit de convolution

La définition est

$$h = g_1 * g_2, \quad h(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(y-x) g_2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) g_2(y-x) dx, \quad (5.26)$$

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.

### 5.5.2 Distribution associée

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

$$(h, f) = \iint_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) g_2(y-x) f(y) dx dy = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(x) dx \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} g_2(u) f(u+x) du \right], \quad (5.27)$$

soit en notation condensée

$$(g_1 * g_2, f) = (g_1(x), (g_2(u), f(x+u))) . \quad (5.28)$$

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



### 5.5.3 Propriétés

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

La distribution  $\delta$  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.

## 5.6 Transformée de Laplace d'une distribution

### 5.6.1 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

$$\mathcal{L}[A](s) = (A, \exp(-st)), \quad (5.29)$$

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.

### 5.6.2 Transformée de Laplace de la distribution de Dirac

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

### 5.6.3 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,

$$\mathcal{L}[\langle f \rangle](s) = \mathcal{L}[f] = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(-st) dt, \quad (5.30)$$

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.

### 5.6.4 Transformée de Laplace d'une dérivée

On montre facilement que

$$\mathcal{L}[A'](s) = s \mathcal{L}[A]. \quad (5.31)$$

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,

$$\mathcal{L}[A^{(n)}](s) = s^n \mathcal{L}[A]. \quad (5.32)$$

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 3, 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  $\mathcal{L}[\delta^{(n)}](s) = s^n$ .

### 5.6.5 Transformée de Laplace d'une convolution

La relation

$$\mathcal{L}[A \star B](s) = \mathcal{L}[A] \mathcal{L}[B], \quad (5.33)$$

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  $s$ .

## 5.7 Transformée de Fourier d'une distribution

### 5.7.1 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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \tilde{f}(x) dx . \quad (5.34)$$

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 définira la TF  $\tilde{A}$  de la distribution  $A$  par

$$(\tilde{A}, f) = (A, \tilde{f}) , \quad \forall f . \quad (5.35)$$

### 5.7.2 Propriétés

Linéarité.

### 5.7.3 Exemple : distribution de Dirac

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

### 5.7.4 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

$$\tilde{\Theta}(p) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{p} + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \delta(p) , \quad (5.36)$$

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

$$\left( \frac{1}{p}, f(p) \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0} \left[ \int_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{f(p)}{p} dp + \int_{\epsilon}^{+\infty} \frac{f(p)}{p} dp \right] . \quad (5.37)$$

## 5.8 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  $\delta_a$  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  $\delta$  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  $\delta$ , 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  $x = \tilde{h}(u)$ ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_n(h(x)) f(x) dx = \int_{h(-\infty)}^{h(+\infty)} g_n(u) f(\tilde{h}(u)) / h'(\tilde{h}(u)) du . \quad (5.38)$$

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

$$(\delta(h), f) = (\delta_a, f(\tilde{h})/h'(\tilde{h})) = f(a)/h'(a) . \quad (5.39)$$

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  $a_1, a_2, \dots$ ,

$$(\delta(h), f) = \sum_n f(a_n)/|h'(a_n)|. \quad (5.40)$$

## 6 Applications des distributions, fonctions de Green

### 6.1 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.

### 6.2 Équations différentielles linéaires du second ordre

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

$$\ddot{x}(t) + 2b(t)\dot{x}(t) + a(t)x(t) = g(t), \quad (6.1)$$

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

#### 6.2.1 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

$$x(t) = x_0(t)y(t), \quad (6.2)$$

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

$$x_0 \ddot{y} + 2(\dot{x}_0 + b)\dot{y} = 0, \quad (6.3)$$

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

$$x(t) = x_p(t) + \alpha_1 x_1(t) + \alpha_2 x_2(t) \quad (6.4)$$

obtenue en ajoutant une solution quelconque de l'équation homogène, décrite ici dans sa base  $\{x_1(t), x_2(t)\}$ . Les constantes  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  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

$$x(t) = \alpha_1(t)x_1(t) + \alpha_2(t)x_2(t), \quad \dot{x}(t) = \alpha_1(t)\dot{x}_1(t) + \alpha_2(t)\dot{x}_2(t), \quad (6.5)$$

ce qui suppose que

$$\dot{\alpha}_1(t)x_1(t) + \dot{\alpha}_2(t)x_2(t) = 0, \quad (6.6)$$

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

$$\dot{\alpha}_1(t) \dot{x}_1(t) + \dot{\alpha}_2(t) \dot{x}_2(t) = g(t) , \tag{6.7}$$

et en combinant (6.6) et (6.7), 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.

### 6.2.2 Exploitation de la linéarité

L'équation (6.1) 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

$$x_p(t) = x_{p,1}(t) + x_{p,2}(t) + \dots \tag{6.8}$$

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 (6.8).

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.

### 6.2.3 Second membre en pic de Dirac

L'idée est alors de résoudre (6.1) avec  $\delta(t - t')$  comme second membre, et d'en déduire la solution pour un second membre quelconque en le réécrivant

$$g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(t') \delta(t - t') dt' . \tag{6.9}$$

On cherche donc une solution de

$$\ddot{x}(t) + 2b(t) \dot{x}(t) + a(t) x(t) = \delta(t - t') , \tag{6.10}$$

qui implique la généralisation au champ des distributions de l'équation différentielle originale (6.1) 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.

### 6.2.4 Exemple avec des conditions limites de type corde vibrante

On veut résoudre

$$y'' + y = \frac{1}{\sin x} , \tag{6.11}$$

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*.

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

$$\frac{\partial^2 G(x, z)}{\partial x^2} + G(x, z) = \delta(x - z) . \tag{6.12}$$

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

$$G(x, z) = \begin{cases} -\cos z \sin x & \text{pour } x < z , \\ -\sin z \cos x & \text{pour } x > z , \end{cases} \tag{6.13}$$

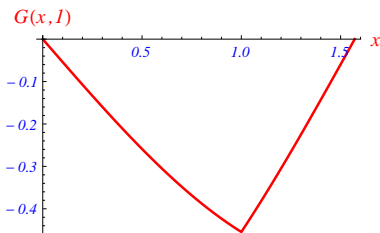


FIGURE 20 – Fonction de Green avec limites de Dirichlet, ici pour  $z = 1$ .

représentée sur la Fig. 20. On en déduit la solution de notre problème

$$y(x) = \int_0^{\pi/2} G(x, z) / \sin z \, dz = -x \cos x + \sin x \ln \sin x, \quad (6.14)$$

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

### 6.2.5 Exemple avec condition causale

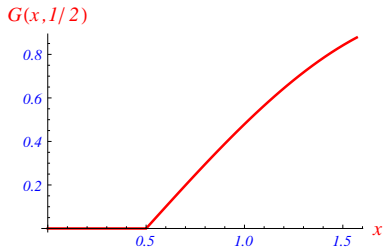


FIGURE 21 – Fonction de Green avec limites causales, ici pour  $z = 1/2$ .

Considérons maintenant une équation similaire

$$y'' + y = f(x), \quad (6.15)$$

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

$$G(x, z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < z, \\ \sin(x - z) & \text{pour } x > z, \end{cases} \quad (6.16)$$

représentée sur la Fig.21.

Finalement la solution de l'équation est

$$y(x) = \int_0^x \sin(x - z) f(z) \, dz, \quad (6.17)$$

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.

### 6.2.6 Cas d'une équation linéaire plus générale

Revenons à l'équation (6.1). 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

$$x(t) = 0 \text{ si } t < t', \quad x(t) = s(t, t') \text{ si } t \geq t', \quad (6.18)$$

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

En résumé, la solution est

$$y(t, t_0) = \Theta(t - t_0) s(t, t_0). \quad (6.19)$$

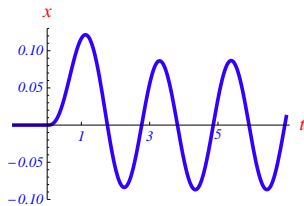


FIGURE 22 – Exemple d'oscillateur excité, résolu ici par la méthode de superposition de pics delta

Maintenant, supposons que l'excitation dans (6.1) 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 (6.9), 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

$$x(t) = \int_{t_0}^{+\infty} g(t') \Theta(t - t') s(t, t') \, dt' = \int_{t_0}^t g(t') s(t, t') \, dt', \quad (6.20)$$

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.

### 6.3 Applications aux équations non linéaires

La dernière partie de (6.20) 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.

#### 6.3.1 Méthode itérative pour l'oscillateur anharmonique

Considérons une fois encore l'oscillateur anharmonique (4.20), soit ( $a > 0$  et  $b > 0$ )

$$\ddot{x}(t) + a^2 x(t) = -b x(t)^3, \quad (6.21)$$

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

$$x(t) = x_0 \cos(at) + v_0/a \sin(at) - b/a \int_0^t x(t_0)^3 \sin[a(t-t_0)] dt_0, \quad (6.22)$$

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

$$x^{(n+1)}(t) = x^{(n)}(t) - b/a \int_0^t x^{(n)}(t_0)^3 \sin[a(t-t_0)] dt_0. \quad (6.23)$$

On voit sur la Fig. 23, 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,  $(a^2 - a_1^2) x + b x^3$  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

$$\ddot{x}(t) + a_1^2 x(t) = (a_1^2 - a^2) x(t) - b x(t)^3 = 0, \quad (6.24)$$

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

$$y^{(0)}(t) = x_0 \cos(a_1 t) + v_0/a_1 \sin(a_1 t),$$

$$y^{(n+1)}(t) = y^{(n)}(t) + \int_0^t [(a_1 - a) y^{(n)}(t_0) - b y^{(n)}(t_0)^3] \sin[a_1(t-t_0)]/a_1 dt_0. \quad (6.25)$$

On voit sur la Fig. 23 (droite) que la convergence est beaucoup plus rapide.

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

$$\ddot{\vartheta}(t) + a^2 \sin \vartheta(t) = 0, \quad a^2 = g/l, \quad (6.26)$$

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

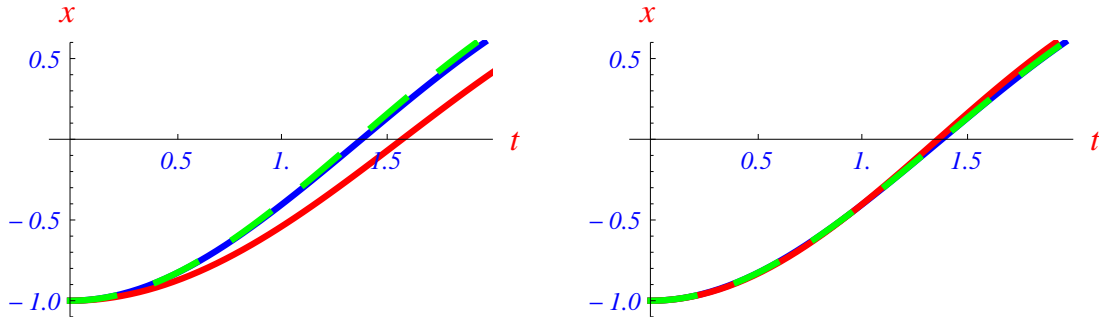


FIGURE 23 – Loi horaire de l’oscillateur anharmonique sur le premier quart de période, avec l’approximation harmonique (rouge), la solution numérique (bleue) et l’itération au premier ordre (pointillé vert). À gauche, on isole simplement le terme anharmonique. À droite, on part d’une solution harmonique optimisée.

### 6.3.2 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  $x$ , discrétisation des pulsations ou énergies correspondant à 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  $\delta x$  et de masse  $\rho(x) \delta x$  s’écrit

$$\rho(x) \delta x \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = T \left. \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right|_{x+\delta x} - T \left. \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right|_x, \quad (6.27)$$

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

$$\rho(x) \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2}. \quad (6.28)$$

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  $\omega$  pourvu que le nombre d’onde lui soit relié 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  $m$ .

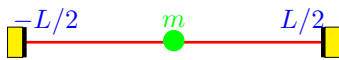


FIGURE 24 – Corde vibrante avec masse ajoutée

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

$$Y(x, t) = y(x) \cos(\omega t), \quad (6.29)$$

avec annulation en  $x = \pm L/2$ , continuité en  $x = 0$ , et solution



sinusoïdale pour  $x \neq 0$ , ce qui est réalisé par

$$y(x) = \begin{cases} a \sin(k(L/2 + x)) & \text{si } x < 0, \\ a \sin(k(L/2 - x)) & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (6.30)$$

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

$$T [y'(0^+) - y'(0^-)] = -m \omega^2 y(0) \quad (6.31)$$

soit

$$\frac{2T}{c} \cos\left(\frac{\omega L}{2c}\right) = -m \omega \sin\left(\frac{\omega L}{2c}\right), \quad (6.32)$$

qui donne les valeurs possibles de la pulsation  $\omega$ .

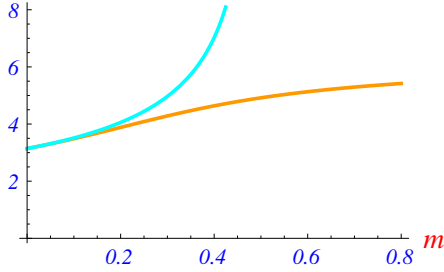


FIGURE 25 – Pulsation fondamentale d'une corde de longueur  $L = 1$  de masse linéique  $a = 1$ , de tension  $T = 1$ , surchargée en son milieu d'une masse  $m$ . Courbe supérieure : calcul au premier ordre. Courbe inférieure : calcul exact.

La variante ci-dessous permet de mettre en œuvre la distribution de Dirac. Si on cherche une solution stationnaire de pulsation  $\omega$  de (6.28), soit  $Y(x, t) = \cos(\omega t + \phi) f(x)$ , la partie spatiale vérifiera

$$T f''(x) + \omega^2 (a + m \delta(x)) f(x) = 0. \quad (6.33)$$

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 unité de la dérivée, ce qui se traduit par un pic delta pour la dérivée seconde. En ajustant les coefficients, on trouve la solution

$$f(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) + \omega^2 m A |\sin(kx)| / (2kT), \quad \omega = ck \quad (6.34)$$

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

$$\cos(kL/2) + (m/T) (k/(2a)) \sin(kL/2) = 0, \quad (6.35)$$

qui permet de calculer  $k$  puis  $\omega$ .

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  $\omega$  doit satisfaire

$$f''(x) + \frac{a(x)\omega^2}{T} f(x) = 0, \quad (6.36)$$

décomposée en

$$f''(x) + \bar{k}^2 f(x) = \bar{k}^2 (1 - a(x)/\bar{a}) f(x), \quad (6.37)$$

qui se transforme en équation intégrale

$$f(x) = A \sin[\bar{k}(x + L/2)] + \bar{k} \int_{-L/2}^x (1 - a(x')/\bar{a}) \sin[\bar{k}(x - x')] f(x') dx' \quad (6.38)$$

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

$$\bar{a} \int_{-L/2}^{+L/2} \sin[\bar{k}(x + L/2)] \sin[\bar{k}(L/2 - x)] dx = \int_{-L/2}^{+L/2} a(x) \sin[\bar{k}(x + L/2)] \sin[\bar{k}(L/2 - x)] dx \quad (6.39)$$

puis la vitesse moyenne  $\bar{c} = \sqrt{T/\bar{a}}$  et enfin la pulsation approchée  $\omega_{\text{app}} = \bar{k} \bar{c}$ . La figure 25 montre la comparaison entre les valeurs exacte et approchée de  $\omega$  quand  $m$  varie.

### 6.3.3 Équation de Schrödinger

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

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (6.40)$$

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

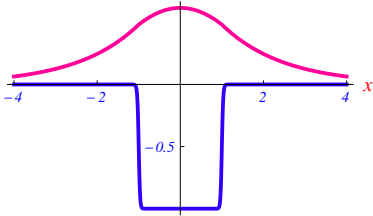


FIGURE 26 – État fondamental dans un puits de largeur 2 et de profondeur 1.

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 26.

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

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } |x| > a, \\ 0 & \text{si } |x| < a, \end{cases} \quad (6.41)$$

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

fondamental.

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

$$v(x) = \alpha x^2. \quad (6.42)$$

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

$$\psi''(x) + (E - \bar{v})\psi(x) = (v(x) - \bar{v})\psi(x), \quad (6.43)$$

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 intégrale équivalente à (6.43) qui donne  $\psi(x)$

$$\psi(x) = A \cos(kx) + \int_{-a}^x \sin[k(x-x')] [v(x') - \bar{v}] \frac{\psi(x')}{k} dx'. \quad (6.44)$$

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

$$E - E_0 = \bar{v} = \frac{\int_{-a}^{+a} \cos^2(kx) v(x) dx}{\int_{-a}^{+a} \cos^2(kx) dx}. \quad (6.45)$$

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.

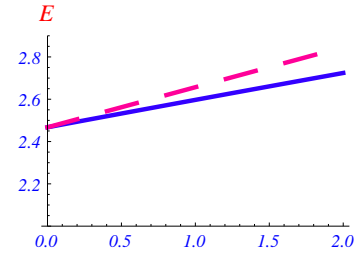


FIGURE 27 – État fondamental dans un puits infini de largeur 2, avec un potentiel résiduel  $\alpha x^2$ . En bleu, solution exacte, en rouge pointillé, traitement au premier ordre de la perturbation.

### 6.3.4 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  $\epsilon$ . 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,

$$(A + \epsilon B)(X_0 + \epsilon X_1 + \dots) = (E_0 + \epsilon E_1 + \dots)(X_0 + \epsilon X_1 + \dots), \quad (6.46)$$

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,

$$(A - E_0) X_1 = (E_1 - B) X_0 \quad (6.47)$$

très semblable à l'équation (6.43). En prenant le produit scalaire avec  $X_0$ , on trouve la correction à l'énergie

$$E_1 = \frac{(X_0, B X_0)}{(X_0, X_0)}, \quad (6.48)$$

comme dans (6.45).

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

$$X_1 = "(E_0 - A)^{-1}" B X_0, \quad (6.49)$$

qui généralise le second terme de (6.44). 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 (6.47) par  $Q_0$ , on peut résoudre exactement dans le sous-espace complémentaire de ce sous-espace propre, et écrire

$$X_1 = Q_0 [Q_0 (E_0 - A) Q_0]^{-1} B X_0, \quad (6.50)$$

et on remarque que l'énergie  $E_1$  est éliminée.

## 7 Équations de Sturm–Liouville

### 7.1 Rappels sur les matrices symétriques ou hermitiennes



FAÇONS 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  $\lambda_i$  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  $\sigma_x$ , avec des notations évidentes

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1, \quad X_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

se transforme en  $\sigma_z$  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

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \rightarrow A' = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{6} \\ \sqrt{6} & 5 \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

et plus généralement de toute matrice  $2 \times 2$  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'analogie 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  $\lambda_i$ , alors

$$0 = (X_i^*, AX_i) - (A^* X_i^*, X_i) = (\lambda_i^* - \lambda_i)(X_i^*, X) \quad (7.3)$$

ce qui démontre la première propriété.

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

$$0 = (X_2, AX_1) - (AX_2, X_1) = (\lambda_1 - \lambda_2)(X_2, X_1) \quad (7.4)$$

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  $\lambda$ . 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  $1 \times 1$  de valeur  $\lambda$  et un bloc  $(n - 1) \times (n - 1)$ . En diagonalisant ce dernier, on a le 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 matrice est diagonalisable par transformation unitaire.

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

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Un autre exemple est

$$A = \begin{pmatrix} 3 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 3 \end{pmatrix}, \quad (7.6)$$

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 reliée à celle des formes quadratiques associées elles-aussi à de telles matrices,

$$\Phi(x_1, \dots, x_n) = a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots = \tilde{X}.A.X, \quad \tilde{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}. \quad (7.7)$$

Par exemple, la diagonalisation de  $\sigma_x$  implique l'identité

$$2xy = \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 - \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2, \quad (7.8)$$

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,

$$\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} \left(\frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\right)^2. \quad (7.9)$$

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  $\epsilon$  est un nombre petit,  $X$  un vecteur propre normé associé à la valeur propre  $\lambda$  et  $Y$  un vecteur orthogonal. Pour  $\epsilon = 0$ , on a  $AX = \lambda X$  et  $\langle X|X \rangle = 1$ , soit une valeur moyenne  $\langle X|A|X \rangle = \lambda$ . 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'opérateur 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.

## 7.2 Wronskien

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

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_1' y_2. \quad (7.10)$$

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,

$$y''(x) + a(x)y(x) = 0, \quad (7.11)$$

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

$$y_1(x) y_2''(x) - y_1''(x) y_2(x) = dW(y_1, y_2)/dx = 0, \quad (7.12)$$

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

$$y''(x) + b(x)y'(x) + a(x)y(x) = 0, \quad (7.13)$$

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)

$$dW(y_1, y_2)/dx + b(x)W(y_1, y_2) = 0, \quad (7.14)$$

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

$$w(x) = w(x_0) \exp \left[ - \int_{x_0}^x b(x') dx' \right], \quad (7.15)$$

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.

### 7.3 Définition d'une équation de Sturm–Liouville

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

$$p(x) y''(x) + r(x) y'(x) + q(x) y(x) + \lambda \rho(x) y(x) = 0, \quad (7.16)$$

$q(x)$  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  $\rho$ .

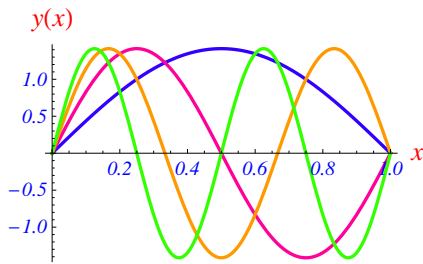
On peut réécrire cette équation comme

$$\mathcal{L} y = \lambda \rho y, \quad \mathcal{L} = - \left[ p(x) \frac{d^2}{dx^2} + r(x) \frac{d}{dx} + q(x) \right], \quad (7.17)$$

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.

### 7.4 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

$$\begin{aligned} y''(x) + \lambda y(x) &= 0, \\ \lambda &= \omega^2, \\ y(0) &= y(1) = 0, \end{aligned} \quad (7.18)$$

FIGURE 28 – 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 28.

On vérifie directement les propriétés suivantes :

1. les valeurs propres sont réelles.
2. elles forment une suite  $\lambda_n$ , 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

$$y_i'' + \lambda_i y_i = 0, \quad \text{et} \quad y_j'' + \lambda_j y_j = 0, \quad (7.19)$$

on obtient

$$dW(y_i^*, y_j)/dx + (\lambda_i^* - \lambda_j) y_i^* y_j = 0, \tag{7.20}$$

et par intégration,

$$(\lambda_i^* - \lambda_j) \int_0^1 y_i^* y_j dx = 0. \tag{7.21}$$

Donc si  $i = j$ , comme l'intégrale est positive, on voit que  $\lambda_i$  est réel. Si  $i \neq j$ , les fonctions sont orthogonales, au sens du produit hermitien défini par cette intégrale. Comme l'équation différentielle (7.18) est réelle, on peut choisir  $y_n$  réel, ce que nous supposons désormais.

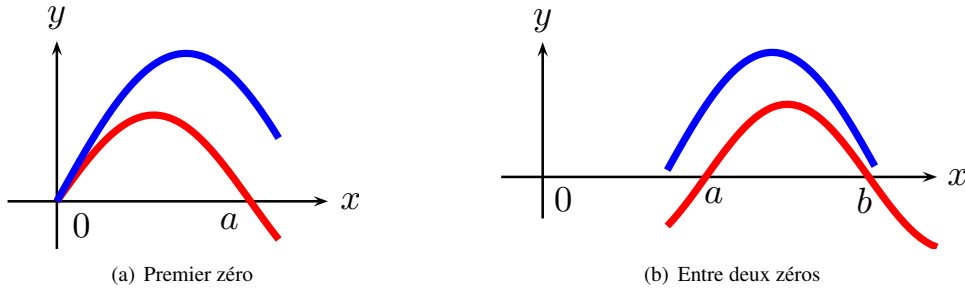


FIGURE 29 – Disposition des zéros de deux solutions de valeurs propres  $\lambda_1$  (rouge) et  $\lambda_2 > \lambda_1$  (bleu).

En exploitant (7.20) entre 0 et  $x$ , on obtient

$$-W(y_2(x), y_1(x)) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^x y_1 y_2 dx = 0. \tag{7.22}$$

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

$$-y_2(a)y_1'(a) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^a y_1 y_2 dx = 0. \tag{7.23}$$

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 (7.23). Voir figure 29(a).

Si l'on recommence entre deux zéros successifs de  $y_1$ , voir figure 29(b) on a

$$-y_2(a)y_1'(a) - y_2(b)y_1'(b) + (\lambda_2 - \lambda_1) \int_0^x y_1 y_2 dx = 0. \tag{7.24}$$

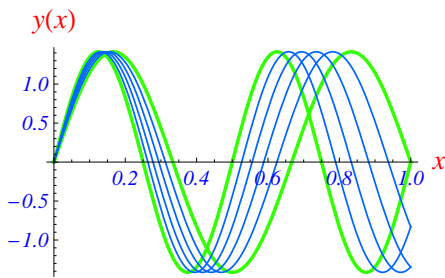


FIGURE 30 – Évolution continue d'un état propre au suivant : les nœuds se déplacent progressivement vers la gauche.

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  $\lambda$ , on peut définir une fonction  $y(\lambda, x)$  qui satisfait à la condition limite à gauche. Et on aura la généralisation de (7.23) suivante

$$-W(y(\lambda, x), y(\lambda', x)) + (\lambda - \lambda') \int_0^x y(\lambda, x) y(\lambda', x) dx = 0, \tag{7.25}$$

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  $\lambda_i$ , 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  $\lambda$  atteint la valeur  $\lambda_{i+1}$ . Voir Fig. 30.

## 7.5 Polynômes de Legendre

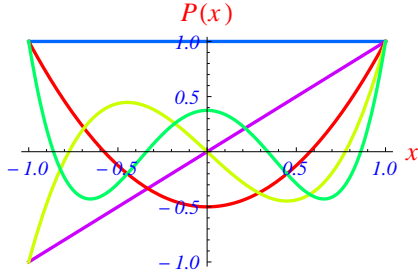


FIGURE 31 – Allure de premiers polynômes de Legendre.

Chacun est solution de l'équation

$$-[(1-x^2)y']' + \frac{m^2}{1-x^2}y = \lambda y = 0, \quad (7.26)$$

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

$$\lambda = \ell(\ell + 1), \quad \ell \in \mathbb{N}, \quad P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell, \quad (7.27)$$

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

$$P_n(x) = \left\{ 1, x, \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \dots \right\}, \quad (7.28)$$

avec l'allure donnée sur la figure 31, 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

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \delta_{n,m} \frac{2}{2n+1}. \quad (7.29)$$

Noter aussi la fonction génératrice

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) z^n. \quad (7.30)$$

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

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

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}, \quad (7.31)$$

et plus généralement

$$Q_n(x) = \frac{1}{2} P_n(x) \ln \frac{1+x}{1-x} - W_{n-1}(x), \quad (7.32)$$

où  $W_n$  est un polynôme de degré  $n$ . L'allure de  $Q_0$  est donnée sur la figure 32. 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  $\beta = 0$ .

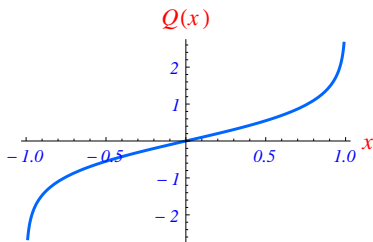


FIGURE 32 – Allure de  $Q_0(x)$ .



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

$$F(x) = \sum_{i=1}^n F(x_i) \frac{(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}, \quad (7.33)$$

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

$$F(x) = \sum_{i=1}^n F(x_i) \frac{P_n(x)}{(x - x_i) P'_n(x_i)}, \quad (7.34)$$

on obtient remarquablement une valeur approchée de l'intégrale

$$\int_{-1}^{+1} F(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n F(x_i) w_i \quad (7.35)$$

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

$$w_i = \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(x)}{(x - x_i) P'_n(x_i)} dx = -\frac{2}{(n + 1) P'_n(x_i) P_{n+1}(x_i)}. \quad (7.36)$$

## 7.6 Polynômes d'Hermite

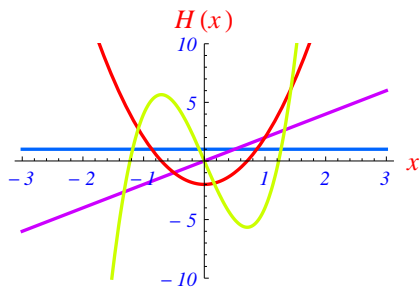


FIGURE 33 – Allure des premiers  $H_n(x)$ .

Une définition possible est

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2/2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2/2). \quad (7.37)$$

qui donne pour les premiers (voir figure 33)

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x \end{aligned} \quad (7.38)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) \exp(-x^2) dx = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{nm}. \quad (7.39)$$

$H_n$  est une des solutions de

$$u'' - 2x u' = -2\lambda u, \quad (7.40)$$

pour  $\lambda = n$ . Pour d'autres valeurs de  $\lambda$ , 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

$$- [\exp(-x^2/2) u]'' + x^2 [\exp(-x^2/2) u] = (2\lambda + 1) [\exp(-x^2/2) u], \quad (7.41)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-x^2) dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i), \quad (7.42)$$

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

$$w_i = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 [H_{n-1}(x_i)]^2}. \quad (7.43)$$

Revenons aux équations différentielles (7.40) et (7.41), 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

$$u(x) = a_0 + a_1 x^2 + \dots + a_i x^{2i} + \dots, \quad (7.44)$$

qui donne la relation de récurrence

$$a_{i+1} = \frac{2(2i - \lambda)}{(2i + 2)(2i + 1)} a_i. \quad (7.45)$$

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 admettrons qu'effectivement  $u(x)$  diverge comme  $\exp(x^2)$  et que les conditions limites imposées ne sont pas satisfaites. Par contre si  $\lambda$  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

$$u(x) = \sum b_i x^{2i-1}, \quad 2i(2i + 1) b_{i+1} = 2[(2i - 1) - \lambda] b_i, \quad (7.46)$$

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  $\lambda$ . Pour les experts, une solution de (7.40) 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  $\Gamma$ , 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.

## 7.7 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

$$g_2(x) y''(x) + g_1(x) y'(x) + a_n y(x) = 0, \quad (7.47)$$

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 (7.47) peut se ramener à une forme de Sturm-Liouville.

## 7.8 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

$$y''(x) + 2b y'(x) + a y(x) = 0, \quad (7.48)$$

qui peut se réécrire

$$y(x) = \exp(-bx) u(x), \quad u''(x) + (a - b^2) u(x) = 0, \quad (7.49)$$

correspondant à un système sans amortissement.

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

$$p(x) y''(x) + r(x) y'(x) + q(x) y(x) + \lambda \rho(x) y(x) = 0, \quad r(x) = p'(x) \quad (7.50)$$

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 :

$$x^2 y'' + x y' + (\lambda^2 x^2 - \nu^2) y = 0, \quad (7.51)$$

peut se réécrire

$$(x y')' + (\lambda^2 x - \nu^2/x) y = 0. \quad (7.52)$$

## 7.9 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  $\lambda$ . 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  $\lambda$  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  $\mathcal{L} y = (p y')' + q y$ , que

$$\int_a^b y_2^* (\mathcal{L} y_1) dx = \left[ \int_a^b y_1^* (\mathcal{L} y_2) dx \right]^*. \quad (7.53)$$

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,

$$\int_a^b [y_2 (\mathcal{L} y_1) - y_1 (\mathcal{L} y_2)] dx = [y_2 p y_1' - y_1 p y_2']_a^b. \quad (7.54)$$

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

$$y(a) \cos \alpha - p(a) y'(a) \sin \alpha = 0, \quad y(b) \cos \beta - p(b) y'(b) \sin \beta = 0. \quad (7.55)$$

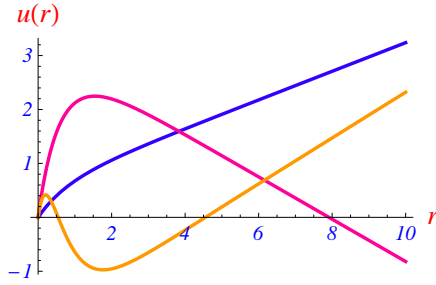


FIGURE 34 – Fonction d’onde radiale à énergie nulle pour  $g = 1, 2$  et  $8$  dans le potentiel de Yukawa  $-g \exp(-r)/r$ .

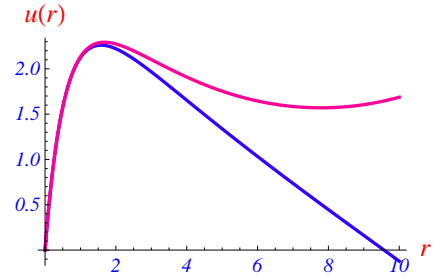


FIGURE 35 – Fonction radiale régulière à l’origine, pour un couplage attractif  $g = 2$  et deux énergies d’essai,  $E = -0.03$  et  $E = -0.01$ .

## 7.10 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.

## 7.11 Application à l’équation radiale de Schrödinger

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

$$V(r) = -g \frac{\exp(-ar)}{r}, \quad (7.56)$$

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  $E$ )

$$-u''(r) - g \frac{\exp(-ar)}{r} u(r) = E u(r), \quad (7.57)$$

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

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) :

$$-u''(r) - g \frac{\exp(-r)}{r} u(r) = 0, \quad u(0) = 0, \quad (7.58)$$

On le voit sur la figure 34, 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 35.

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.

### 7.12 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

$$y_1(x) = \begin{cases} \sin(k_1(1/2 - x))/\sin(k_1/2) & \text{si } x > 0, \\ \sin(k_1(1/2 + x))/\sin(k_1/2) & \text{si } x < 0, \end{cases} \quad (7.59)$$

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

$$y''(x) + \lambda y(x) - \epsilon \delta(x) y(x) = 0. \quad (7.60)$$

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 36 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  $k = 3\pi$ .

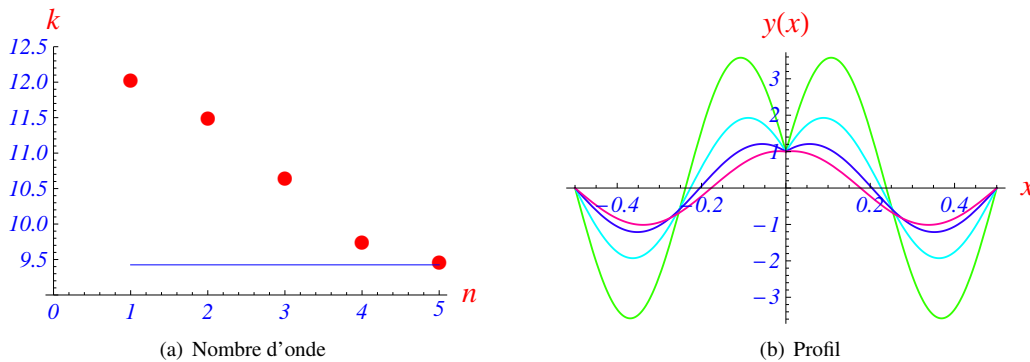


FIGURE 36 – Corrections itératives de raccordement pour une corde vibrante,

On voit sur la figure 36 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, [6].

### 7.13 Factorisation des équations différentielles et des équations de SL

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

$$D^2 + a^2 = (D + ia)(D - ia) = (D - ia)(D + ia) \quad (7.61)$$

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

$$D^n + \alpha_{n-1} D^{n-1} + \cdots + \alpha_1 D + \alpha_0 = \prod_{i=1}^n (D - r_i), \quad (7.62)$$

revient à chercher les solutions  $r_i$  de l'équation polynomiale

$$r^n + \alpha_{n-1} r^{n-1} + \cdots + \alpha_1 r + \alpha_0 = 0, \quad (7.63)$$

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 [7]

$$[D \mp \alpha(x)][D \pm \alpha(x)] = D^2 + \alpha^2(x) \pm \alpha'(x), \quad (7.64)$$

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

$$\alpha^2(x) \mp \alpha'(x) + a(x) = 0. \quad (7.65)$$

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

$$(D \pm x)(D \mp x) = D^2 - x^2 \mp 1, \quad (7.66)$$

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

Un exemple plus compliqué est [7]

$$y'' - \left( x^2 - 2x + 3 + \frac{1}{x} + \frac{7}{4x^2} - \frac{5}{x^3} + \frac{1}{x^4} \right) y = 0, \quad (7.67)$$

qui s'écrit

$$(D + \alpha)(D - \alpha)y = 0, \quad \alpha = \frac{1}{x+1} + \frac{1}{x-1} - \frac{3}{2x} + \frac{1}{x^2} + x - 1, \quad (7.68)$$

et permet d'identifier la solution particulière

$$y = (x^2 - 1)x^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{x} + \frac{x^2}{2} - x\right). \quad (7.69)$$

Revenons à l'oscillateur harmonique. L'identité

$$-(D - x)(D + x) = -D^2 + x^2 - 1, \quad (7.70)$$

montre que l'annulation de  $D+x$ , réalisée 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  $\phi_0$  comme vecteur propre associé.

On généralise assez facilement à

$$-\left(D - x + \frac{\ell+1}{x}\right)\left(D + x - \frac{\ell+1}{x}\right) = -D^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + x^2 - 3 + 2\ell, \quad (7.71)$$

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

$$u_\ell(x) = x^{\ell+1} \exp(-x^2/2). \quad (7.72)$$

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

$$(-D^2 + x^2)(D - x) = (D - x)(-D^2 + x^2) + 2(D - x), \quad (7.73)$$

montre qu'en partant de  $\phi_0$  et de sa valeur propre  $\lambda_0 = 1$ , on construit de proche en proche

$$\phi_n = (D - x) \phi_{n-1}, \quad (7.74)$$

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,

$$\pm D \pm \frac{\ell + 1}{x} + x, \quad (7.75)$$

qui permet de progresser de  $\pm 1$  unité en moment angulaire et de  $\pm 1$  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

$$(-D^2 + \ell(\ell + 1)/r^2 + r^2 - (2\ell + 3))B = B(-D^2 + (\ell + 1)(\ell + 2)/r^2 + r^2 - (2\ell + 5)), \quad (7.76)$$

ce qui démontre (voir les flèches vertes sur la figure 37) 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.

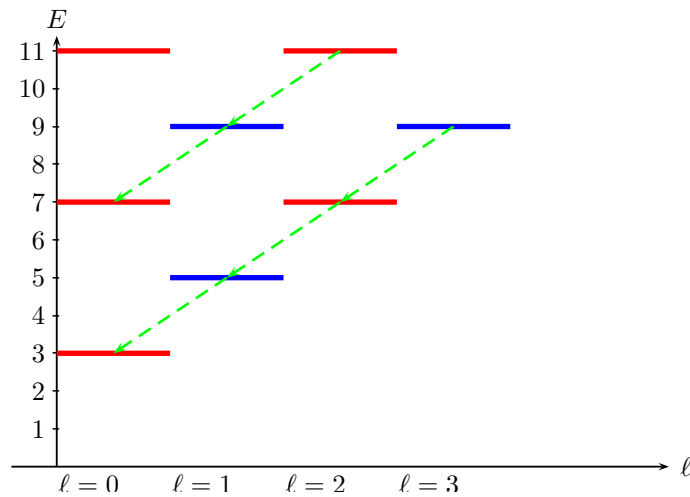


FIGURE 37 – Spectre de l'oscillateur spatial et action d'un des opérateurs de transition.

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

$$h_\ell = -D^2 + \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - \frac{1}{r}, \quad (7.77)$$

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

$$u_{\ell,n} = r^{\ell+1} \exp(-kr) v(r), \quad (7.78)$$

où  $v(r)$  satisfait

$$\frac{v(r)}{r} [-1 + 2k(\ell + 1)] + 2k v'(r) - 2(\ell + 1) \frac{v'(r)}{r} - v''(r) = 0, \quad (7.79)$$

et si on cherche un développement en séries

$$v(r) = \sum_i a_i r^i, \quad (7.80)$$

on obtient la relation de récurrence

$$a_n [-1 + 2k(1 + n + 2l)] = a_{n+1} (n + 1) (n + 2l + 2), \quad (7.81)$$

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  $\ell$  à  $n' = n + \ell + 1$  donné ( $n'$  est appelé le nombre quantique principal), soit de modifier  $n$  à  $\ell$  donné. L'une d'eux est

$$A_\ell^\pm = \frac{\ell}{r} - \frac{1}{2\ell} \pm D. \quad (7.82)$$

Par exemple, l'identité

$$h_\ell A_{l+1}^+ = A_{l+1}^+ h_{l+1}, \quad (7.83)$$

montre comment passer d'un état  $(n', \ell + 1)$  à un état  $(n', \ell)$  de même nombre quantique principal et donc de même énergie. Voir la figure 38.

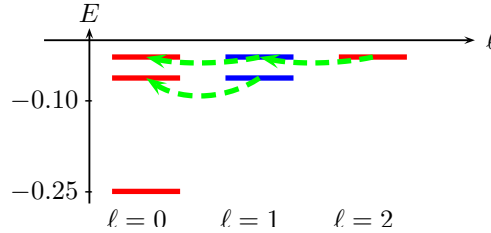


FIGURE 38 – Spectre dans le potentiel de Coulomb attractif. Les flèches indiquent la transformation étudiée. L'autre opérateur permet une progression verticale.

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

$$\epsilon = -\frac{1}{4(\ell + 1)^2}, \quad u(r) = r^{\ell+1} \exp[-r/(2(\ell + 1))]. \quad (7.84)$$

Les spectres des figs. 37 et 38 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  $\Delta V$  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  $\Delta V$  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

$$U(x) = -\frac{U_0}{\text{ch}^2(\alpha x)} \quad (7.85)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) - \frac{U_0}{\text{ch}^2(\alpha x)} \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (7.86)$$

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

$$h_g[y(x)] = -y''(x) - \frac{g(g+1)}{\text{ch}^2(x)} y(x) = \epsilon y(x). \quad (7.87)$$

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

$$a_{\pm} = g \operatorname{th} x \pm D, \quad (7.88)$$

avec des identités comme

$$a_- a_+ = h_g + g^2, \quad (7.89)$$

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

$$a_- h_{g-1} = h_g a_-, \quad (7.90)$$

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.

## 8 Récapitulation pour une équation

**P**OUR terminer ce cours, récapitulons les propriétés mathématiques d'une équation importante de la physique, et choisissons, pour cette année 2012–13, l'équation de Schrödinger stationnaire, soit à une dimension, soit à trois dimensions avec un potentiel central.

Des livres entiers ont été écrits sur les propriétés mathématiques des opérateurs de Schrödinger ; Nous ne donnerons qu'un aperçu très sommaire et très partiel.

### 8.1 Notations

On supposera que le facteur  $\hbar^2/(2m)$  a été absorbé dans le potentiel et dans l'énergie, pour écrire l'équation comme

$$-\Delta\psi + V\psi = E\psi, \quad (8.91)$$

et on cherche les solutions correspondant aux états de diffusion ou aux états liés.

À un dimension, on a  $-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ , et à trois dimensions, un état  $S$  pour lequel on pose  $\psi(\mathbf{r}) = u(r)/r$  donne une équation  $-u''(r) + V(r)u(r) = Eu(r)$ , à première vue très similaires, mais avec des conditions limites assez différentes.

Par exemple, du fait que  $u(0) = 0$ , on ne peut prendre que les états impairs du problème à une dimension avec le potentiel  $V_{1D}(x) = V_{1D}(r = |x|)$ . C'est ce qui fait qu'un oscillateur linéaire  $h = -d/dx^2 + x^2$  a un état fondamental  $\epsilon = 1$  tandis que le premier état  $S$  gouverné par l'équation radiale  $-u''(r) + r^2 u(r) = Eu(r)$  a pour énergie la plus basse  $E = 3$ . (ce qu'on pourrait évidemment trouver en opérant non en coordonnées sphériques, mais en coordonnées cartésiennes, auquel cas, on ajouterait tout simplement les énergies de trois oscillateurs indépendants).

### 8.2 Linéarité

Une équation du second ordre dépend de deux paramètres. Pour une équation linéaire comme l'équation de Schrödinger 1D ou l'équation radiale dans un potentiel isotrope, les solutions forment un espace vectoriel de dimension 2. Mais le fait de pouvoir écrire la solution comme  $\psi(x) = \alpha_1 \psi_1(x) + \alpha_2 \psi_2(x)$  ou  $u(r) = \alpha_1 u_1(r) + \alpha_2 u_2(r)$  ne doit pas induire en erreur. En acoustique, une corde d'amplitude double a quatre fois plus d'énergie, mais les mêmes nœuds et ventres de vibration, le même contenu en harmoniques. En MQ, la fonction d'onde est définie à un facteur près. La solution ne donne en fait qu'un seul paramètre, le rapport de  $\alpha_1$  à  $\alpha_2$ . Il est donc en général impossible de satisfaire deux conditions limites comme  $\psi(x_1) = \psi(x_2) = 0$  ou  $u'(r_i)/u(r_i) = t_i$ ,  $i = 1, 2$ .

### 8.3 Diffusion

Dans un expérience de diffusion 1D, on recherche typiquement, pour  $E = k^2 > 0$  dans un potentiel qui tend vers 0 quand  $|x| \rightarrow \pm\infty$ ,

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + \dots & \text{si } x \rightarrow +\infty \\ a \exp(ikx) + b \exp(-ikx) \dots & \text{si } x \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (8.92)$$

et on dira que  $1/a$  est l'amplitude transmise et  $b/a$  l'amplitude réfléchi. On peut calculer ces coefficients pour toute valeur de  $k > 0$  correspondant à une énergie  $E = k^2$ .

De même pour tout  $k$ , on peut trouver une solution pour la fonction d'onde radiale réduite  $u(r)$  telle que  $u(0) = 0$ , et identifier le déphasage dans le comportement asymptotique pour  $r \rightarrow +\infty$  de  $u(r) = A \sin(kr + \delta) + \dots$  que l'on obtiendra si  $V(r)$  décroît suffisamment vite (plus vite en  $1/r$  en particulier).

## 8.4 Quantification

Il y a plus de contraintes pour la recherche de solutions normalisables. C'est le cas en particulier pour des potentiels attractifs qui tendent vers 0 à l'infini dans lequel on étudie le cas des énergies négatives. C'est aussi le cas pour des énergies de tout signe dans des potentiels de confinement comme  $V(r) = -a/r + br$  avec  $b > 0$  utilisés pour décrire les mésons.

À une dimension, on ne peut en général satisfaire  $\psi(x) \rightarrow 0$  pour  $x \rightarrow -\infty$  et  $x \rightarrow +\infty$ . On peut réaliser une des conditions à toute énergie  $E < 0$ , mais pas la seconde, en général : il faut des valeurs particulières de l'énergie, c'est l'origine de la *quantification*.

Pour une équation radiale 3D, les deux conditions que  $u(0) = 0$  et  $u(r) \propto \exp(-kr)$  ne sont en général pas compatibles.

## 8.5 Rôle de la dimension

Il existe des potentiels simples qui permettent une résolution rapide, par exemple les puits carrés comme

$$V(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{si } x < R, \\ 0 & \text{si } x \geq R. \end{cases} \quad (8.93)$$

avec  $U_0 > 0$ . On constate qu'à une ou deux dimensions, un  $U_0$  très petit, voire infinitésimal, suffit pour créer un état lié, tandis que pour trois dimensions ou plus, il faut une intensité minimale pour ce puits carré, et plus généralement pour un potentiel de courte portée.

## 8.6 Exemples analytiquement solubles

Les plus connus sont le potentiel coulombien et le potentiel harmonique.

## 8.7 Principe variationnel

De même que les lois de l'optique sont interprétées par le caractère stationnaire du chemin optique, que les lois de la mécanique résulte du principe de moindre action, l'équation de Schrödinger peut se déduire de la stationnarité de la fonctionnelle d'énergie

$$E[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (8.94)$$

avec la condition supplémentaire que  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ .

L'état fondamental est le minimum sur tout l'espace de Hilbert. Il est approché par excès par toute valeur moyenne  $\langle \varphi | H | \varphi \rangle$  avec une fonction d'essai ou par un minimum partiel  $\min_{\alpha, \dots} \langle \varphi(\alpha, \dots) | H | \varphi(\alpha, \dots) \rangle$  sur une famille de fonctions d'ondes d'essai.

Par exemple, cherchons le fondamental de  $h = -\frac{d^2}{dx^2} + x^4$  au moyen de  $\varphi_\alpha(x) = \exp(-\alpha x^2/2)$ . On calcule facilement les intégrales correspondant à la normalisation, l'énergie potentielle et l'énergie cinétique

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \{ \varphi_\alpha(x)^2, x^2 \varphi_\alpha(x)^2, \varphi_\alpha'(x)^2 \} = \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}, \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}}, \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{\alpha}}{2} \right\} \quad (8.95)$$

d'où l'énergie d'essai

$$\epsilon(\alpha) = \frac{3}{4\alpha^2} + \frac{\alpha}{2} \quad (8.96)$$

Le minimum,  $3^{3/4}/4 = 1,08\dots$  est très proche du résultat exact  $1,06\dots$ . De plus, il respecte le théorème du viriel, à savoir que la part de l'énergie cinétique et celle de l'énergie potentielle sont  $2/3$  et  $1/3$  comme pour l'énergie exacte, ce que l'on démontre facilement.

Le niveau suivant est impair, il sera donc approché en minimisant la valeur moyenne sur des fonctions impaires, par exemple  $\exp(-\alpha x^2/2)$ .

Le plus intéressant est de chercher une méthode variationnelle pour le deuxième niveau pair. On constate sur cet exemple qu'une fonction d'onde d'essai  $\tilde{\varphi}_\alpha \propto (1 - 2\alpha x^2) \exp(-\alpha x^2/2)$ , empruntée à l'oscillateur harmonique donne après optimisation de  $\alpha$  une approximation assez bonne. Mais c'est ici une approximation par défaut.

Si on cherche une approximation par excès comme pour le fondamental, on peut utiliser le principe du "minimax", ou de Hylleraas-Undheim et McDonald (HUM). Le principe variationnel dit que le fondamental est le minimum de  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ , c'est à dire le minimum de la valeur propre (unique) de la restriction de  $H$  sur un sous-espace de dimension 1 quand on fait varier ce sous-espace.

La généralisation s'obtient en prenant un sous-espace de dimension 2. Nous ne démontrerons pas le résultat. On pourra se convaincre en commençant par des matrices symétriques de dimension finie. Si  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots$  est le spectre de  $H$ , la deuxième valeur est le minimum quand  $\mathcal{H}_2$  varie de la plus grande valeur propre de la restriction de  $H$  au sous-espace  $\mathcal{H}_2$  de dimension 2.

Pour les calculs pratiques, on prend deux fonctions d'onde d'essai indépendantes, on diagonalise la restriction de  $H$  au sous-espace qu'elles engendrent, et on fait varier ces fonctions d'onde. On pourrait prendre  $\{\varphi_\alpha, \varphi_\beta\}$ , ce qu'on appelle une base d'oscillateur, assez en vogue en physique nucléaire, mais qui tend à disparaître, car son développement systématique ne donne pas toujours une convergence uniforme de la fonction d'onde vers la solution exacte. la chimie théorique a privilégiée les bases non orthogonales comme  $\{\exp(-\alpha x^2/2), \exp(-\beta x^2/2)\}$  avec  $\alpha \neq \beta$ .

## 8.8 Résolution approchée

Des méthodes numériques très raffinées ont été développées pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension, et les équations couplées qui la généralise.

Une classe d'algorithmes repose sur l'exposé historique de Hartree. Soit

$$-y''(x) + V(x)y(x) = E y(x). \quad (8.97)$$

Pour une valeur  $\epsilon_0 = -k_0^2$  attribuée à  $E$ , on calcule, par un procédé standard de discrétisation de l'opérateur différentiel, une solution  $y_1(x)$  ayant le bon comportement asymptotique  $y_1(x) \propto \exp(+k_0 x)$  à gauche. Et une autre solution  $y_2(x) \propto \exp(-k_0 x)$  avec le bon comportement à droite. Si ces solutions se raccordaient continument, ainsi que leur dérivées, on aurait un état lié. Ce n'est pas en général le cas si  $\epsilon_0$  a été choisie un peu au hasard. Avec les ordinateurs modernes, on calcule le wronskien  $W(\epsilon_0) = y_1(a)y_2'(a) - y_1'(a)y_2(a)$  en un point  $x = a$  et on cherche les zéros de  $W(\epsilon_0)$ , qui sont en principe indépendants de  $a$ .

Du temps de Hartree, on était plus économe de ses calculs. La solution

$$y(x) = \begin{cases} y_1(x)/y_1(a) & \text{si } x \leq a, \\ y_2(x)/y_2(a) & \text{si } x > a, \end{cases} \quad (8.98)$$

est une bonne solution, mais pour un potentiel  $\tilde{V}(x) = V(x) + \delta(x - a)[y_2'(a)/y_2(a) - y_1'(a)/y_1(a)]$ . On peut calculer la correction d'énergie au premier ordre, recommencer avec la nouvelle énergie  $\epsilon_1$  et itérer. Au préalable, on compte les zéros de  $y(x)$  pour voir dans quelle partie du spectre  $\epsilon_0$  se situe.

La Fig. 39 montre la convergence des énergies successives dans le potentiel  $V(x) = -\exp(-x^2)(1 + 3 \operatorname{th}(x)/4)$  en partant de  $\epsilon_0 = -0.0625$ . La Fig. 40 compare les fonctions d'onde successives. Au raccordement, ici en  $x = 0$ , la fonction d'onde devient de plus en plus régulière et s'approche de la solution exacte.

## 8.9 Structure nodale

C'est une propriété très générale que les états propres correspondant à des énergies différentes sont orthogonaux. Pour des fonctions d'onde à une dimension, le produit scalaire se traduit par des intégrales sur des produits de fonction d'onde. L'orthogonalité impose que l'intégrand soit alternativement positif et négatif.

La théorie générale des opérateurs de Sturm-Liouville dit que le nombre de nœuds croît d'une unité quand on passe d'une valeur propre à la valeur propre supérieure. On le voit explicitement sur les solutions

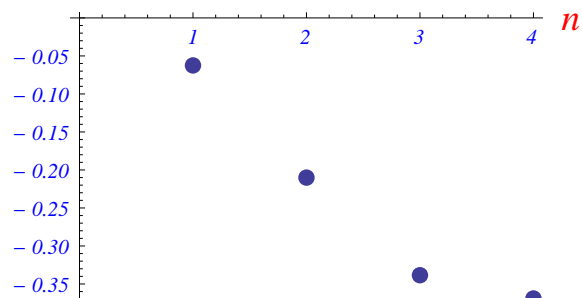


FIGURE 39 – Valeurs successives de l'énergie par raccordement et corrections en fonction du saut de la dérivée au point de raccordement. La suite converge très vite vers l'énergie exacte.

$\sin(n \pi x/L)$  d'un puits infini entre  $x = 0$  et  $x = L$ . On peut se convaincre, sans chercher la rigueur, que la présence d'un zéro augmente l'énergie. Considérons la fonction d'onde de la Fig. 41. La courbe en pointillée est obtenue en prenant la valeur absolue et en adoucissant la pointe. L'énergie potentielle est pratiquement inchangée, mais l'énergie cinétique, intégrale de  $\phi'(x)^2$ , diminue car la pente est plus faible. Donc la courbe pointillée, qui a un zéro en moins, correspond à une énergie plus basse. En particulier, le fondamental n'a pas de zéro.

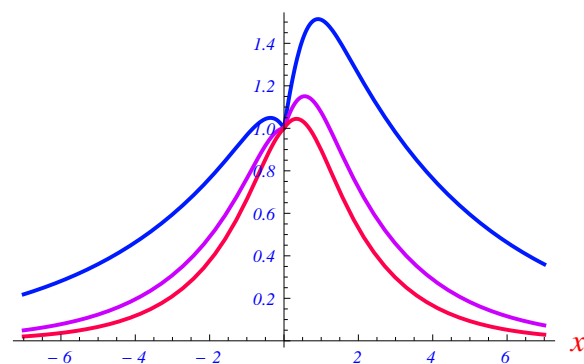


FIGURE 40 – Itérations successive de la fonction d'onde dans la méthode de raccordement avec correction d'énergie estimée d'après le saut de la dérivée.

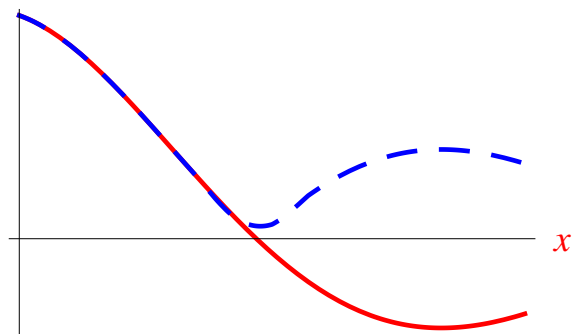


FIGURE 41 – Fonction d'onde avec annulation et fonction d'onde donnant une énergie plus basse.

## A Calcul d'intégrales

**I**OUS calculons ici la transformée de Laplace de la réponse à un échelon unité ( $u_0 = 1$ ) dans l'équation de la chaleur unidimensionnelle, pour vérifier la cohérence des deux méthodes présentées.

Comme préliminaire, calculons 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.

Soit  $\tilde{G}(p)$  la transformée de Laplace de

$$u(x, t) = \Theta(t) \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{at}} \right), \quad (\text{A.3})$$

dont la dérivée est

$$g(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{X}{t^{3/2}} \exp(-X^2/t), \quad (\text{A.4})$$

si  $X = x/(2\sqrt{a})$ . La TL de  $g$  est

$$\begin{aligned} \tilde{g}(p) &= \frac{X}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left[ -\frac{X^2}{t} - pt \right] \\ &= \frac{X}{\sqrt{\pi}} \exp(-2X\sqrt{p}) \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^{3/2}} \exp \left[ -\left( \sqrt{pt} - \frac{X}{\sqrt{t}} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

On pose

$$u = \sqrt{pt} - \frac{X}{\sqrt{t}}, \quad (\text{A.6})$$

la transformation est monotone, et peut s'inverser en  $1/\sqrt{t}$ , soit se

$$\frac{1}{\sqrt{t}} = \frac{1}{2X} \left( -u + \sqrt{u^2 + 4X\sqrt{p}} \right), \quad (\text{A.7})$$

qu'on peut différentier pour obtenir le facteur  $dt/t^{3/2}$  de l'intégrale, dont on ne retient que la partie *paire*, car l'intégrale en  $u$  va de  $-\infty$  à  $+\infty$ ,

$$\frac{dt}{t^{3/2}} = \frac{du}{X} + \dots \quad (\text{A.8})$$

on obtient

$$\tilde{g}(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-2X\sqrt{p}) \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp(-u^2) = \exp(-2X\sqrt{p}). \quad (\text{A.9})$$

Donc pour l'intégrale qui s'annule en  $t = 0$ , la TL est bien

$$\tilde{G}(p) = \frac{\tilde{g}(p)}{p} = \frac{1}{p} \exp(-x\sqrt{p}/\sqrt{a}), \quad (\text{A.10})$$

ce qui est bien l'expression obtenue par résolution de la TL de l'équation de propagation.

## Références

- [1] Maurice 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.
- [2] Kenneth Franklin Riley, Michael Paul Hobson, and Stephen John Bence. *Mathematical methods for physics and engineering. 3rd ed.* Cambridge : Cambridge University Press. xxvii, 1333 p., 2006.
- [3] C. Itzykson and J.B. Zuber. *Quantum field theory*. Dover books on physics. Dover Publications, 2006.
- [4] Albert 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. *N*, 415 :297–299, January 2002.
- [6] Douglas Rayner Hartree. *The calculation of atomic structures*. Wiley, New York, NY, 1957.
- [7] Lev M. Berkovich. Method of factorization of ordinary differential operators and some of its applications. *Appl. Anal. Discrete Math.*, 1(1) :122–149, 2007.