Tutorat 2 de Mathématiques (1ère année)

17/11/2010

Relations de Kramers–Kronig et transformée de Fourrier

Compte-rendu à déposer svp dans l'enveloppe sur la porte de mon bureau F.3.14 la veille du tutorat au plus tard.

Florent Krzakala
Laboratoire Physico-Chimie Théorique, ESPCI
Bât. F, 3ème étage, bureau F 3.14
fk@espci.fr, http://www.pct.espci.fr/∼florent/

Résumé

Le but du tutorat est de introduire la méthode de « réponse linéaire », parmi les propriétés de cette réponse comme la causalité, les relations de Kramers–Kronig. Cela sera explicité au cas d'un oscillateur amorti.

I Notes et rappels de cours

Dans ce tutorat, nous utiliserons la convention symétrique de la transformation de Fourier. La transformée de Fourier d'une fonction $f(t) \in \mathrm{L}^1(\mathbb{R})$ s'écrit

$$\hat{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dt f(t) e^{i\omega t}. \tag{1}$$

Avec cette convention, on obtient la transformée d'un produit comme une convolution, avec le préfacteur suivant :

$$\sqrt{2\pi}\,\widehat{(fg)} = \hat{f} * \hat{g}. \tag{2}$$

La transformation répété donne

$$\hat{\hat{f}}(t) = f(-t). \tag{3}$$

Le conjugué d'une transformée de Fourier s'écrit comme la transformée du conjugué, avec un changement du signe de l'argument,

$$\bar{\hat{f}}(\omega) = \hat{\bar{f}}(-\omega). \tag{4}$$

Sous l'intégrale, on peut échanger la transformation de Fourier,

$$\int_{\mathbb{R}} dt\, \hat{f}(t)\, g(t) = \int_{\mathbb{R}} dt\, f(t)\, \hat{g}(t). \tag{5}$$

Cela conduit à un autre résultat,

$$\int_{\mathbb{R}} d\omega\, \bar{\hat{f}}(\omega)\, \hat{g}(\omega) = \int_{\mathbb{R}} dt\, \bar{f}(t)\, g(t), \tag{6}$$

qui donne immédiatement le théorème de Plancherel (cours p. 45).

II Exemple : l'oscillateur harmonique amorti en 1D

On considère un oscillateur harmonique amorti $x(t)$, dont l'équation du mouvement s'écrit :

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f(t). \tag{7}$$

Nous allons successivement calculer sa réponse à une stimulation harmonique, puis sa réponse à une stimulation quelconque en introduisant sa fonction de Green.

II.1 Réponse à une stimulation harmonique

Nous supposons l'oscillateur excité par une stimulation harmonique de la forme :

$$f(t) = F_\omega e^{-i\omega t}. \tag{8}$$

On cherche une solution de la forme :

$$x(t) = X_\omega e^{-i\omega t}. \tag{9}$$

Montrer que :

$$X_\omega = \hat{g}(\omega) F_\omega, \tag{10}$$

avec

$$\hat{g}(\omega) = -\frac{1}{(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)} \tag{11}$$

Expliciter les pôles que l'on note ω_1 et ω_2.

II.2 Stimulation générale

On considère maintenant une excitation représentée par $f(t)$, dont la transformée de Fourier est $\hat{f}(\omega)$.

(A) Comment s'exprime $x(t)$ en fonction de $\hat{g}(\omega)$ et $\hat{f}(\omega)$?

(B) Montrer alors que

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' g(t-t') f(t') \tag{12}$$

avec $g(t)$ la fonction dont $\hat{g}$ est la transformée de Fourier. L'équation (12) n'est rien d'autre que le produit de convolution de $x(t) = (g * f)(t)$.

II.3 Holomorphisme de la réponse et conséquences

(A) Montrer que $g(t)/\sqrt{2\pi}$ est la réponse du système à une excitation impulsionnelle, $f(t) = \delta(t)$. Quelle influence une perturbation $f(s)$ au temps s a-t-elle sur la solution au temps $t > s$?

(B) Nous avons défini $\hat{g}(\omega)$ pour $\omega \in \mathbb{R}$, donc sur l'axe réel. Remarquez que son extension sur le plan complexe est holomorphe partout (sauf aux pôles). En utilisant l'expression (11), calculer explicitement $g(t)$. On distinguera le cas où le temps est positif du cas où le temps est négatif. Utilisez le théorème des résidus.

(C) En déduire l'expression de la réponse

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')} \frac{\sin\left[\left(\omega_0^2 - \gamma^2\right)^{1/2}(t-t')\right]}{\left(\omega_0^2 - \gamma^2\right)^{1/2}} f(t') dt'. \tag{13}$$

Il s'agit de la fonction de Green du système. Remarquer que la réponse du système est causale.

Il faut bien noter l'importance de l'holomorphisme dans cette démonstration. On a bien vu aussi qu'il fallait appliquer le lemme de Jordan, donc avoir une décroissance à l'infini relativement rapide de la fonction réponse, i.e. un système qui ne diverge pas.

On remarque aussi que si γ était négatif, on n'aurait plus de causalité : On devine une relation entre causalité et dissipation d'énergie par un système passif.

III Propriétés générales de la réponse linéaire

Nous cherchons à généraliser les propriétés que nous avons vues dans l'exemple ci-dessus. Nous discutons une équation de mouvement (ou une autre équation physique),

$$\mathcal{L}x(t) = f(t), \tag{14}$$

avec un opérateur $\mathcal{L}$ (de dérivées, de multiplication, intégration, etc.) qui est linéaire, et avec une inhomogénéité $f(t)$ (stimulation de l'extérieur, perturbation, etc.). La solution générale est inconnue comme l'opérateur n'est pas spécifié. Nous savons quand même qu'elle doit posséder plusieurs propriétés physiques :

– Linéarité : x est une fonction ou une fonctionnelle linéaire de f. Cela s'écrit

$$x(t) = \int_{\mathbb{R}} ds\, g(t-s) f(s). \tag{15}$$

– Causalité au sens que l'effet ne peut pas précéder la cause :

$$g(t) = 0 \quad \text{pour} \quad t < 0. \tag{16}$$

– La totalité de réponse à une stimulation finie doit être finie.
– Pour une stimulation réelle, $f(t) \in \mathbb{R}$, la réponse doit être aussi réelle, $x(t) \in \mathbb{R}$. (Au moins si nous ne parlons pas de mécanique quantique).

III.1 Lien entre pair/impair et réel/imaginaire

(A) Montrer les propriétés suivantes de la transformation de Fourier :

$$g \in \mathbb{R} \quad \text{une fonction impaire} \quad \Longrightarrow \quad \hat{g} \in i\mathbb{R} \quad \text{impaire} \tag{17}$$
$$g \in i\mathbb{R} \quad \text{une fonction impaire} \quad \Longrightarrow \quad \hat{g} \in \mathbb{R} \quad \text{impaire} \tag{18}$$
$$g \in \mathbb{R} \quad \text{une fonction paire} \quad \Longrightarrow \quad \hat{g} \in \mathbb{R} \quad \text{paire} \tag{19}$$
$$g \in i\mathbb{R} \quad \text{une fonction paire} \quad \Longrightarrow \quad \hat{g} \in i\mathbb{R} \quad \text{paire} \tag{20}$$

(B) Conclure que si g est réelle, la transformée s'écrit de façon

$$\hat{g} = \hat{g}' + i\hat{g}'', \qquad \text{avec } \hat{g}' \text{ paire et } \hat{g}'' \text{ impaire.} \tag{21}$$

(C) Retrouvez cette propriété dans l'exemple de l'oscillateur.

III.2 Préliminaires

Un petit rappel avant : On définit la fonction « signe »par

$$S(t) = \begin{cases} -1 & \text{si } t < 0 \\ 1 & \text{si } t \geq 0 \end{cases} \tag{22}$$

et on veut montrer que sa transformée de Fourier est

$$\hat{S}(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{i}{\omega} \tag{23}$$

Comme S n'est pas sommable, on doit utiliser une fonction auxiliaire $S_\varepsilon(t) := e^{-\varepsilon|t|} S(t)$.

(A) Montrer que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \hat{S}_\varepsilon(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{i}{\omega} \tag{24}$$

(B) Discuter la possibilité d'utiliser $\hat{S}$ au lieu de $\hat{S}_\varepsilon$ dans un calcul (dans le calcul ci-dessous).

III.3 Causalité et relations de Kramers–Kronig

(A) Montrer la propriété suivante de la transformation de Fourier, en utilisant la formule de la transformée d'une convolution (2) et la fonction de signe ci-dessus,

$$g(t) = 0 \quad \forall t < 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{g}(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathrm{vp} \int_{\mathbb{R}} \frac{\hat{g}(\xi)}{\xi - \omega}\, d\xi \tag{25}$$

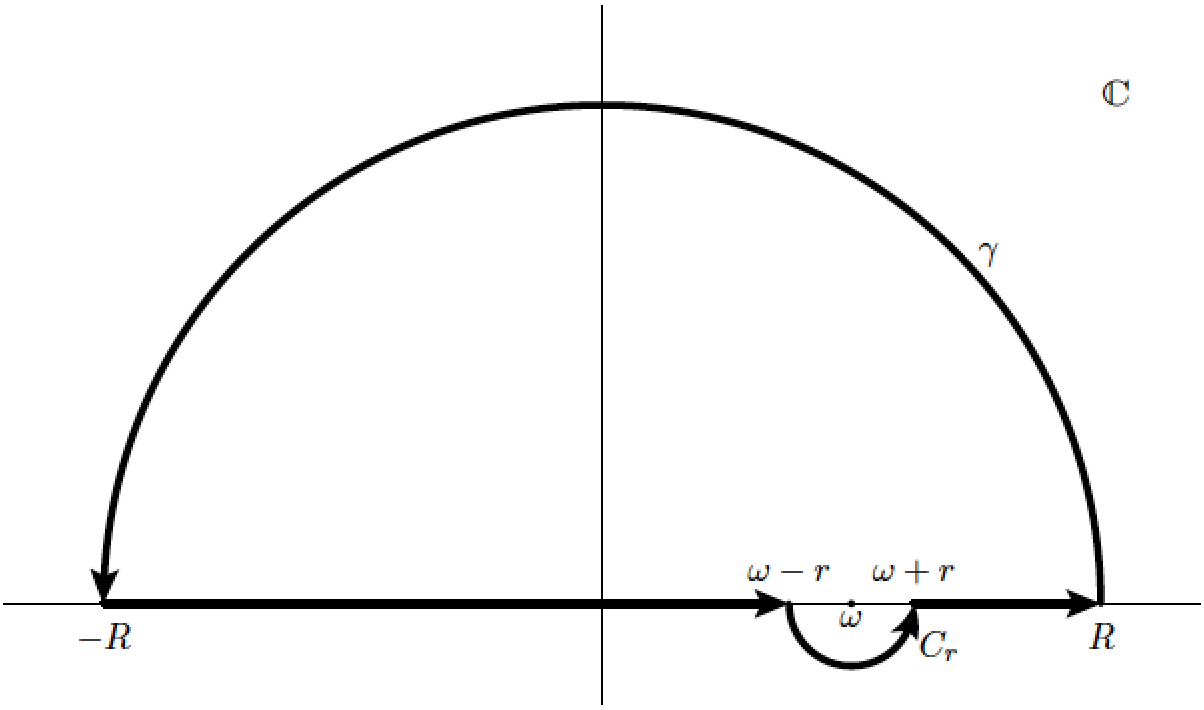

Fig. 1 – Schéma du contour γ.

En séparant les parties imaginaire et réelle de cette équation, on obtient les relations de Kramers–Kronig :

$$\mathrm{Re}\,\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathrm{vp}\int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{Im}\,\hat{g}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \tag{26}$$

$$\mathrm{Im}\,\hat{g}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{vp}\int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{Re}\,\hat{g}(\xi)}{\xi - \omega} d\xi \tag{27}$$

(B) Nous allons nous convaincre que les relations de Kramers–Kronig expriment le fait que l'extension $\hat{g}(\omega + i\nu)$ de $\hat{g}(\omega)$ sur le demi-plan complexe supérieur ($\nu > 0$) est holomorphe dans ce demi-plan, sans pôles, et qu'elle décroit suffisamment vite pour $|\omega + i\nu| \to \infty$. Nous commençons par un résultat plus faible :

Montrer que la relation Kramers–Kronig (25) est valide pour toute fonction $\hat{g}(\omega + i\nu)$ avec les propriétés mentionnées. Utilisez le théorème de résidus avec le chemin d'intégration donné en Fig. 1. Intégrez la fonction $\hat{g}(z)/(z - \omega)$ sur ce chemin. Calculez la contribution du petit demi-cercle C_r dans la limite $r \to 0$ en utilisant son développement de Taylor au voisinage de ω et effectuez un changement de variable $z' = \omega + re^{i\theta}$.

Ce dernier calcul suggère qu'il existe en fait une relation avec la causalité au terme $g(t) = 0 \quad \forall t < 0$ et le fait que $\hat{g}$ est holomorphe sans pôles dans le demi-plan supérieur. Il a été précisé dans le théorème de Titchmarsch.

IV Dissipation

Nous continuons avec une propriété importante de la fonction de réponse, c'est le lien entre la partie imaginaire de $\hat{g}$ et l'énergie dissipée par un système. Regardons une force externe $f(t)$ qui est zéro pour les temps très petits et très grands, tel que la source extérieur fait un travail fini au système décrit par l'équation de mouvement (14). Le travail total est

$$W = \int_{\mathbb{R}} dt\, \dot{x}(t) f(t) < \infty. \tag{28}$$

Pour un système passif, ce travail doit être forcement positif. L'énergie ajoutée par ce travail sera dissipée et conduira à une température élevée (qui n'est pas décrit par l'équation de mouvement).

(A) En utilisant les relations (4)–(6), montrez que le travail total s'écrit par

$$W = i \int_{\mathbb{R}} d\omega\, \omega\, \overline{\hat{x}}(\omega)\, \hat{f}(\omega) = \int_{\mathbb{R}} d\omega\, |\hat{f}(\omega)|^2 \omega \hat{g}''(\omega). \tag{29}$$

On voit donc que le travail fait au système de l'extérieur, qui égale l'énergie dissipée, est donné par la partie imaginaire de la fonction de réponse. Comme ce travail doit être positif, aussi $\omega\hat{g}''(\omega)$ doit être positif. Nous avons vu cela dans le cas de l'oscillateur, où le signe de $\hat{g}''$ est contrôlé par le facteur d'amortissement γ.