Distributions et intégrales: premiers pas

G. Marcou *

Strasbourg,31 octobre 2006

*Université Louis-Pasteur, Faculté de Chimie de Strasbourg, Laboratoire de Pharmacochimie de la Communication Cellulaire (UMR7081).

Introduction

- △ Mesure
- △ Intégrale de Riemann
- △ Intégrale de Lebesgue
- △ Base de fonctions orthogonales
- △ Transformée de Fourier
- △ Transformée de Laplace
- △ Transformée en ondelettes
- △ Relations intégrales

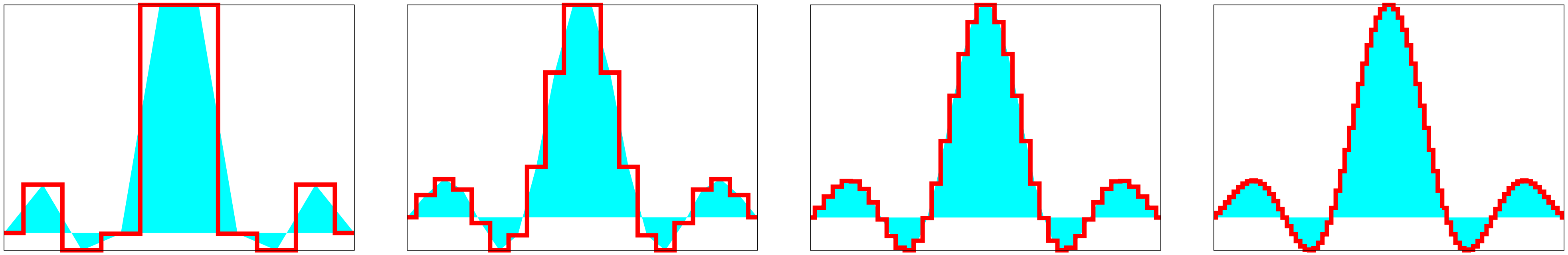
Intégrale de Riemann

Une **série numérique** est composée d'une suite de nombre a_n et des sommes partielles $S_n = \sum_k a_k$.

Une **intégrale** est une généralisation de la somme de séries numériques aux fonctions continues. Le symbole de l'intégrale $\int$ rappel ce fait.

$$\int f(x)dx = \lim_{\delta x \to 0} \sum_{\{x_i | (x_{i+1} - x_i) = \delta x\}} f(x_i)\delta x$$

D'un point de vue géométrique, cette intégrale s'interprète comme l'aire sous le graphe représentatif de la fonction.



Mesure

La **mesure** sur un ensemble est une fonction qui associe un réel positif ou l'infinie à toute partie de l'ensemble. Ce nombre doit être compris comme une longueur ou un volume.

Les propriétées de la mesure μ sont :

- $\mu(\emptyset) = 0$
- $E_1 \cap E_2 = \emptyset \Rightarrow \mu(E_1 \cup E_2) = \mu(E_1) + \mu(E_2)$
- $E_1 \subset E_2 \Rightarrow \mu(E_1) \leq \mu(E_2)$

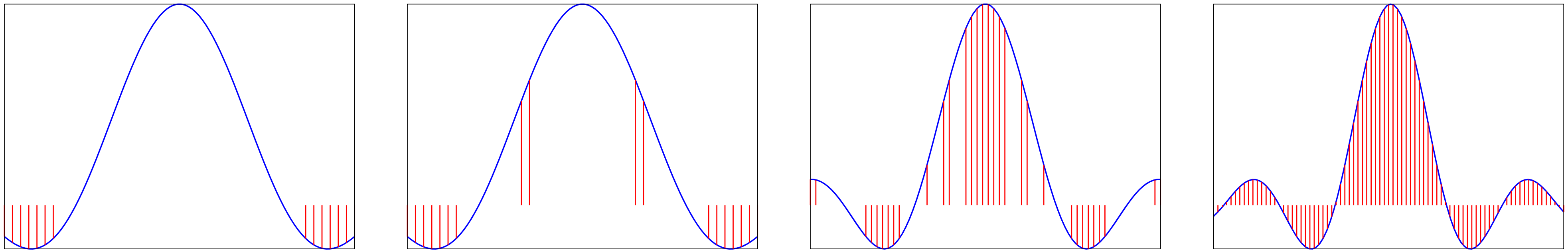
Un ensemble munie d'une mesure est dit **mesuré**.

La mesure d'un espace vectoriel est évidemment reliée à la métrique.

Intégrale de Lebesgue

L'intégrale de Lebesgue considère une mesure de l'espace de départ de la fonction intégrée. Cette mesure est le volume occupée par les points de l'espace de départ qui ont même image par la fonction.

L'interprétation géométrique est que l'intégrale de Lebesgue estime la surface par bande horizontales.



La mesure linéaire, dx, est la plus commune. Le physique et la chimie font ample usage d'autres mesures telles que la densité de masse $m(x)dx$ ou la densité de charge, $\rho(x)dx$.

Calcul d'intégrales

Une **primitive**, $F(x)$, d'une fonction, $f(x)$, est une fonction dont la dérivée est égale à la fonction : $\frac{dF}{dx}(x) = f(x)$.

Le **théorème fondemmental de l'analyse** stipule qu'intégrer une fonction sur un interval revient à trouver sa primitive. L'intégration est alors l'opération inverse de la dérivation dans l'espace des fonctions.

$$F(x) = \int^{x} f(t)dt$$

L'opération de **changement de variable** consiste à réécrire une fonction sous forme de fonction composée et d'intégrer vis-à-vis de la nouvelle variable ainsi définis.

L'**intégration par partie** consiste à considérer un fonction comme le produit de fonctions plus simple et de profiter des propriétées de distribition de la dérivation.

Produit scalaire de fonctions

Les espaces de fonctions constituent des espaces vectoriels que l'on peut munir d'un produit scalaire associée à la mesure $d\mu(x)$:

$$\langle f|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^{\dagger}(x)g(x)d\mu(x)$$

Une famille de fonction est dite orthogonale si pour tout couple de fonctions de cette famille (f_i, f_j), $\langle f_i|f_j\rangle = 0$ si $i \neq j$.

Un espace de fonction munie de la norme $\|f(x)\|^2 = \langle f|f\rangle$ est un espace de Hilbert. A ce titre les familles de fonction orthogonales sont très utiles pour définir une base : la métrique associée est très simple.

Exemples de familles de fonction orthogonales :

- Ondes planes
- Harmoniques sphériques
- Polynômes de Legendre
- Polynômes de Chebishev
- Polynômes d'Hermite

Transformée de Fourier

Une **onde plane**, $h_\omega(x) = e^{i\omega x}$ est indexée par un réel ω.

Les ondes planes constituent une base othrogonale d'un espace de fonction. Les fonctions de cet espace résultent de la somme pondérée d'ondes planes.

On peut calculer la composante contravariante d'une fonction sur cette base. Ces composantes sont appelées **transformée de Fourier** de la fonction :

$$f^\omega = \widetilde{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} [h^\omega]^\dagger(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} f(x) dx$$

L'écriture de la fonction sur cette base est appelée la **transformée inverse** :

$$f(x) = \frac{1}{\|h_\omega\|} \int_{-\infty}^{\infty} h_\omega \widetilde{F}(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \widetilde{F}(\omega) d\omega$$

Propriétées de la Transformée de Fourier

La transformée de Fourier $\widetilde{F'}$ de la dérivée d'une fonction f, la transformée de Fourier de f étant $\widetilde{F}$, est :

$$\widetilde{F'}(\omega) = i\omega\widetilde{F}(\omega)$$

Si la convolution de deux fonctions f et g est :

$$(f \star g)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(t-t')f(t')dt'$$

alors la convolution de ces fonctions est reliée aux transformées de Fourrier respectives de ces fonctions :

$$\widetilde{(f \star g)}(\omega) = \widetilde{F}(\omega)\widetilde{G}(\omega)$$

Applications de la Transformée de Fourier

- Analyse en fréquence - FFT
- Soltion des equations linéaires symetriques par translation
- Transport du signal
- Base de fonctions pour la mécanique quantique
- Sommation d'Ewald pour le calcul des interactions non-liées.
- Résonnance Magnétique Nucléaire
- Diffraction

Transformée de Laplace

Une autre base de fonction est : $h_s(x) = e^{-sx}$. Elle est indexée par un complexe s. Elles ne sont définies que pour $x \geq 0$.

On peut calculer la composante contravariante d'une fonction sur cette base. Ces composantes sont appelées **transformée de Laplace** de la fonction :

$$f^s = F(s) = \int_0^\infty [h^s](x) f(x) dx = \int_0^\infty e^{-sx} f(x) dx$$

L'écriture de la fonction sur cette base est appelée la **transformée de Laplace inverse** :

$$f(x) = \frac{1}{\|h_s\|} \int_{-\infty}^\infty h_s F(s) ds = \frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^\infty e^{(\mathcal{R}e(s)+i\mathcal{I}m(s))x} F(\mathcal{R}e(s)+i\mathcal{I}m(s)) d\mathcal{I}m(s)$$

Propriétées de la Transformée de Laplace

La transformée de Laplace $\mathcal{L}(f')$ de la dérivée d'une fonction f, la transformée de Laplace de f étant $\mathcal{L}(f)$, est :

$$\mathcal{L}(f')(s) = s\mathcal{L}(f)(s) - f(0+)$$

Si la convolution de deux fonctions f et g est :

$$(f \star g)(t) = \int_0^\infty g(t-t')f(t')dt'$$

alors la convolution de ces fonctions est reliée aux transformées de Laplace respectives de ces fonctions :

$$\mathcal{L}(f \star g)(s) = \mathcal{L}(f)(s)\mathcal{L}(g)(s)$$

Applications de la transformée de Laplace

- Signaux causaux
- Mouvement brownien : équation de Legendre généralisée
- Solutions d'équations linéaires

Transformée en Ondelettes

La fonction servant de base est : $\Psi_{u,s}(t) = \frac{1}{\sqrt{s}}\Psi(\frac{t-u}{s})$.

Cette fonction doit être d'intégrale finie pour chaque valeur de u et s.

La **transformée en ondelette** est définis par la relation suivante :

$$\langle \Psi_{u,s}, f \rangle (u, s) = \int_{\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s}} \Psi \left(\frac{t-u}{s} \right) f^{\dagger}(t) dt$$

La transformée inverse est toujours définie, mais son écriture dépend de la forme exacte de la fonction de base.

Applications de la transformée en Ondelettes

La transformée en Ondelette est souvent interprétée comme un microscope mathématique.

Elle est sensible aux invariances d'échelle (homothéties). Elle permet de filtrer les détails ou les grandes échelles.

- Compression du signal
- Transitions de phases
- Caractérisation de la turbulence
- Soltions de la DFT
- Descripteurs moléculaires lisses
- Correlations a grande distance dans le génome

Relations intégrales

On considère un champs vectoriel, une surface fermée Σ de normale $\vec{n}$, de volume V, un circuit fermé Γ et une surface S délimitée par le circuit.

Théorême de Gauss :

$$\oint\oint_{\Sigma} \vec{E}(\vec{x}).\vec{n} dA = \int\int\int_{V} \vec{\nabla}\vec{E}(\vec{x}) d^3\vec{x}$$

Théroême de Stokes :

$$\oint_{\Gamma} \vec{E}(\vec{x}).d\vec{x} = \int\int_{S} \vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{x})\vec{n} dA$$

Conclusion

Son considérés comme acquis :

- △ la mesure
- △ l'intégrale
- △ les bases de fonctions
- △ le produit scalaire dans un espace de fonctions
- △ les principales transformations
- △ les relations intégrales