

Prérequis mathématiques pour la physique calculatoire

Analyse, algèbre, asymptotique et géométrie
pour utiliser `pysic-rs` en connaissance de cause

HFThot Research Lab

26 septembre 2026

Résumé

Ce cours rassemble les prérequis mathématiques nécessaires pour utiliser une bibliothèque de physique mathématique — ici `pysic-rs` — sans la traiter comme une boîte noire. L'objectif n'est pas d'apprendre à appeler des fonctions, mais de savoir *ce qu'il faut vérifier* quand on les appelle : quelle quantité doit être conservée, quel ordre de convergence est attendu, quelle forme close permet de noter un résultat.

Huit chapitres, chacun avec des exercices intégralement corrigés. Le fil conducteur est une seule question, posée à chaque étape : *comment saurais-je que ce résultat est faux ?*

Idée-clé

Ce cours est né d'un incident. En préparant un article pédagogique, nous avons noté chaque résultat numérique contre une forme close — et découvert **huit routines fausses** dans notre propre bibliothèque. Chaque chapitre se termine donc sur l'invariant qui aurait permis de détecter la faute.

Table des matières

1	Introduction : noter plutôt que regarder	3
1.1	Le problème du graphique plausible	3
1.2	Trois familles d'invariants gratuits	3
2	Analyse complexe et fonctions spéciales	4
2.1	Prolongement analytique : la fonction Γ	4
2.2	Stirling : la première série asymptotique	5
2.3	La fonction Beta	5
2.4	Le vrai piège : séries contre développements asymptotiques	6
3	Arithmétique flottante et annulation	7
3.1	Ce que garantit la double précision	7
3.2	Choisir une tolérance	8
4	Algèbre linéaire pour méthodes spectrales	9
4.1	Le problème aux valeurs propres tridiagonal	9
4.2	Conditionnement et localisation du spectre	10
4.3	Pourquoi Jacobi ne suffit pas	10

5 Équations différentielles : stabilité et ordre	11
5.1 Consistance, stabilité, convergence	11
5.2 Runge–Kutta emboîté et contrôle du pas	11
5.3 Raideur et A-stabilité	12
5.4 Symplecticité	13
6 Quadrature et interpolation	13
6.1 Newton–Cotes et ses limites	13
6.2 Pourquoi les nœuds de Chebyshev	14
7 Analyse de Fourier et méthodes spectrales	15
7.1 Dérivation spectrale	15
7.2 Découpage de Strang	15
7.3 Repliement et théorème de Nyquist	16
7.4 Mesurer une fréquence	17
8 Analyse asymptotique	18
8.1 WKB et points tournants	18
8.2 Méthode du col	19
8.3 Séries asymptotiques et troncature optimale	19
9 Opérateurs, unitarité et algèbre de Clifford	20
9.1 Traces de matrices gamma	20
9.2 Hermiticité et conservation	20
9.3 L’algèbre de Clifford	20
10 Géométrie différentielle minimale	22
10.1 Métrique, Christoffel, courbure	22
10.2 Géodésiques	22
11 Systèmes contraints et invariants topologiques	23
11.1 La décomposition ADM	23
11.2 Invariants topologiques	24
12 Étude de cas : noter Wheeler–DeWitt de bout en bout	25
12.1 Le problème	25
12.2 Étape 1 — chercher la référence	26
12.3 Étape 2 — vérifier les invariants analytiques d’abord	26
12.4 Étape 3 — intégrer, puis noter	26
12.5 Étape 4 — publier la mesure avec son domaine de validité	27
13 Synthèse : une liste de contrôle	27
A Annexe : valeurs de référence	28
A.1 Fonctions spéciales	28
A.2 Invariants physiques	29
A.3 Ordres de convergence attendus	29

Pour aller plus loin

29

1 Introduction : noter plutôt que regarder

1.1 Le problème du graphique plausible

Un graphique de physique numérique est presque toujours plausible. Une onde qui oscille, une densité qui s'étale, un spectre qui décroît : l'œil ne distingue pas une solution correcte d'une solution fautive d'un facteur deux, encore moins d'un facteur 1,0003.

Piège

La fonction de Bessel J_0 est bornée par 1. Une implémentation que nous avons utilisée pendant des mois renvoyait $J_0(7,98) = +50,6$. Personne ne l'avait remarqué, parce que personne ne l'avait tracée au-delà de $x = 5$ ni comparée à une table.

La parade est de ne jamais afficher un nombre sans l'afficher à côté d'une quantité connue indépendamment. On appelle cela **noter** un résultat (par opposition à l'*illustrer*).

Définition 1.1 (Quantité de référence). Une quantité de référence pour une routine R est une valeur connue sans utiliser R : forme close, valeur tabulée, invariant conservé, ou résultat d'une bibliothèque externe indépendante.

1.2 Trois familles d'invariants gratuits

La physique fournit trois familles de références qui ne coûtent presque rien.

1. **Unitarité.** Tout propagateur construit comme produit d'exponentielles d'opérateurs hermitiens conserve exactement $\int |\psi|^2$. Test binaire, sans tolérance à régler.
2. **Annulation sur une solution connue.** Schwarzschild est une solution du vide : son scalaire de Ricci est identiquement nul.
3. **Intégralité.** Les invariants topologiques sont entiers. Un enroulement qui vaut 2,9997 n'est pas imprécis : il est faux.

Idée-clé

Ces trois propriétés partagent un trait décisif : elles sont *falsifiables sans connaître la réponse*. Nul besoin de savoir ce que vaut $\psi(x, t)$ pour savoir que sa norme ne doit pas bouger.

Exercice 1 — calibrer son scepticisme

Une routine calcule l'énergie fondamentale d'un puits infini de largeur $L = 1$ ($\hbar = m = 1$) et renvoie 4,9348. Une autre renvoie 32771. Sans calculatrice, laquelle est manifestement fautive, et pourquoi la seconde valeur est-elle *diagnostique* plutôt que simplement fautive ?

Corrigé

La valeur exacte est $E_1 = \pi^2/2 \approx 4,9348$, donc la première est correcte. La seconde n'est pas « un peu fautive » : elle est fautive de quatre ordres de grandeur. Or $32771 \approx 2/\Delta x^2$ pour $\Delta x = 1/401$. C'est exactement le terme diagonal $2\hbar^2/(2m\Delta x^2)$ du hamiltonien discrétisé.

Diagnostic : la routine renvoie la diagonale de la matrice au lieu de son spectre. Le diagonaliseur ne tourne pas. L'ordre de grandeur ne dit pas seulement « faux », il dit *où* regarder — c'est pourquoi il faut toujours comparer à l'échelle naturelle du problème ($1/\Delta x^2$ ici) avant de conclure.

2 Analyse complexe et fonctions spéciales

2.1 Prolongement analytique : la fonction Γ

Définition 2.1 (Intégrale d'Euler). Pour $\operatorname{Re}(z) > 0$,

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt.$$

Théorème 2.2 (Équation fonctionnelle). $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$.

Démonstration. Intégration par parties :

$$\Gamma(z+1) = \int_0^\infty t^z e^{-t} dt = [-t^z e^{-t}]_0^\infty + z \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt = z\Gamma(z),$$

le terme tout intégré s'annulant aux deux bornes pour $\operatorname{Re}(z) > 0$. □

Cette relation *définit* Γ hors du demi-plan de convergence : on pose $\Gamma(z) = \Gamma(z+1)/z$, ce qui prolonge à $\operatorname{Re}(z) > -1$ sauf en $z = 0$, puis par récurrence à tout $\mathbb{C}$ privé de $\{0, -1, -2, \dots\}$ où Γ a des pôles simples.

Intuition

Les pôles ne sont pas un accident : Γ interpole la factorielle, et $(-1)!$ « vaut l'infini » au sens où $0! = 1!/1$, $(-1)! = 0!/0$. Chaque division par zéro dans la récurrence crée un pôle.

Théorème 2.3 (Réflexion d'Euler). Pour $z \notin \mathbb{Z}$: $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}$.

Exercice 1 — $\Gamma(1/2)$ et l'intégrale gaussienne

(a) Dédurre $\Gamma(1/2)$ de la formule de réflexion. (b) Le retrouver directement depuis l'intégrale d'Euler. (c) En déduire $\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} dx$.

Corrigé

(a) En $z = 1/2$: $\Gamma(1/2)^2 = \pi / \sin(\pi/2) = \pi$. Comme $\Gamma > 0$ sur $\mathbb{R}_+$, $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

(b) Poser $t = u^2$, $dt = 2u du$:

$$\Gamma(1/2) = \int_0^\infty t^{-1/2} e^{-t} dt = \int_0^\infty u^{-1} e^{-u^2} 2u du = 2 \int_0^\infty e^{-u^2} du.$$

(c) La fonction e^{-x^2} étant paire, $\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} dx = 2 \int_0^\infty e^{-u^2} du = \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Vérification numérique. `ps.gamma(0.5)` doit rendre 1,7724538509... ; tout écart au-delà de 10^{-13} signale un problème d'implémentation, l'approximation de Lanczos étant

de précision machine sur cet intervalle.

2.2 Stirling : la première série asymptotique

Théorème 2.4 (Stirling). Pour $|z| \rightarrow \infty$, $|\arg z| < \pi$:

$$\ln \Gamma(z) \sim \left(z - \frac{1}{2}\right) \ln z - z + \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \sum_{n \geq 1} \frac{B_{2n}}{2n(2n-1)z^{2n-1}}.$$

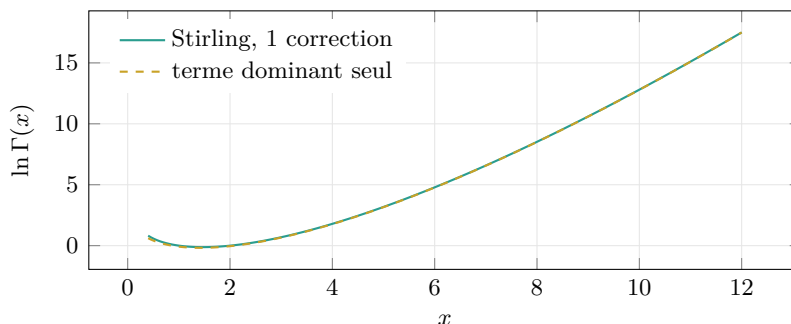


FIGURE 1 – La correction $1/12z$ referme l'essentiel de l'écart dès $x \approx 2$. C'est le comportement typique d'une série asymptotique : très efficace loin de l'origine, inutilisable près d'elle.

Exercice 2 — estimer $100!$ de tête

Utiliser Stirling au terme dominant pour estimer $\log_{10}(100!)$, puis comparer à la valeur exacte 157,97.

Corrigé

$\ln \Gamma(101) \approx (100,5) \ln(101) - 101 + \frac{1}{2} \ln(2\pi)$. Avec $\ln 101 \approx 4,6151$: $(100,5)(4,6151) = 463,82$, puis $463,82 - 101 + 0,9189 = 363,74$. Enfin $\log_{10}(100!) = 363,74 / \ln 10 = 363,74 / 2,3026 \approx 157,97$.

L'accord est au centième près *sans aucune correction* : à $z = 100$, le terme $1/(12z) \approx 8 \times 10^{-4}$ est déjà négligeable devant 363.

Usage pratique. C'est pourquoi `ln_gamma` existe séparément de `gamma` : $\Gamma(171)$ déborde en double précision, alors que $\ln \Gamma$ reste parfaitement fini jusqu'à des arguments énormes.

2.3 La fonction Beta

Définition 2.5. $B(a, b) = \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt$ pour $a, b > 0$.

Théorème 2.6. $B(a, b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}$.

Exercice 3 — symétrie et récurrence

(a) Montrer $B(a, b) = B(b, a)$ directement sur l'intégrale. (b) Établir $B(a+1, b) = \frac{a}{a+b} B(a, b)$. (c) Calculer $B(3, 5)$.

Corrigé

(a) Substituer $u = 1 - t$: l'intégrale devient $\int_0^1 u^{b-1}(1-u)^{a-1} du = B(b, a)$.

(b) Par la forme en Γ :

$$B(a+1, b) = \frac{\Gamma(a+1)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b+1)} = \frac{a\Gamma(a)\Gamma(b)}{(a+b)\Gamma(a+b)} = \frac{a}{a+b} B(a, b).$$

(c) $B(3, 5) = \frac{\Gamma(3)\Gamma(5)}{\Gamma(8)} = \frac{2!4!}{7!} = \frac{2 \times 24}{5040} = \frac{48}{5040} = \frac{1}{105} \approx 0,0095238$.

Test. La symétrie est un invariant parfait : `ps.beta(a,b)` et `ps.beta(b,a)` doivent coïncider bit à bit, ou du moins à l'arrondi de Γ . C'est gratuit et attrape toute erreur d'indice.

2.4 Le vrai piège : séries contre développements asymptotiques**Idée-clé**

Une série de Taylor converge dans un disque ; un développement asymptotique diverge partout mais approche bien pour $|x|$ grand. Utiliser l'un hors de son domaine est la faute numérique la plus commune en fonctions spéciales.

Piège

$J_0(x) = 1 - \frac{x^2}{4} + \frac{x^4}{64} - \frac{x^6}{2304} + \dots$ converge pour tout x , *mathématiquement*. Mais tronquée à quatre termes et évaluée en $x = 8$, elle donne $\approx +50$ au lieu de 0,17 : le terme $x^6/2304 = 114$ écrase tout, et les termes qui devraient le compenser ont été jetés. C'est exactement le bug mentionné en introduction.

Exercice 4 — rayon de fiabilité d'une troncature

Soit $S_n(x)$ la série de J_0 tronquée après le terme en x^{2n} . Estimer le x maximal pour lequel S_3 (termes jusqu'à x^6) garde une erreur $< 10^{-3}$.

Corrigé

Pour une série alternée à termes décroissants, l'erreur est majorée par le premier terme négligé, ici $|x|^8/147456$.

Condition : $x^8 < 147456 \times 10^{-3} = 147,456$, soit $x < 147,456^{1/8} \approx 1,86$.

Conclusion. Une troncature à quatre termes n'est fiable que jusqu'à $x \approx 1,9$. L'utiliser jusqu'à $x = 8$, comme le faisait notre code, sort du domaine d'un facteur quatre — d'où l'explosion. Au-delà, il faut basculer sur le développement asymptotique

$$J_0(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right),$$

et c'est précisément le *point de bascule* entre les deux régimes qu'il faut tester : on y vérifie que les deux branches se raccordent.

Dans pycs

pycs bascule à $|x| = 8$ pour Bessel et à $|x| = 9$ pour Airy, avec une branche de Taylor exacte sous $|x| < 10^{-3}$ pour garantir $J_0(0) = 1$ à la précision machine. Les tests vérifient la continuité à *travers* chaque bascule — une discontinuité y est le symptôme typique d'un raccord raté.

3 Arithmétique flottante et annulation

3.1 Ce que garantit la double précision

Un f64 code 53 bits de mantisse, soit un epsilon machine $\varepsilon = 2^{-52} \approx 2,22 \times 10^{-16}$. Chaque opération élémentaire est correctement arrondie : $\text{fl}(a \circ b) = (a \circ b)(1 + \delta)$ avec $|\delta| \leq \varepsilon/2$.

Idée-clé

L'erreur d'une *opération* est minuscule. Le danger vient de leur *composition*, et surtout de la soustraction de quantités voisines, qui amplifie une erreur relative déjà présente.

Définition 3.1 (Annulation catastrophique). Soustraire a et b proches détruit les chiffres significatifs communs : l'erreur relative du résultat est multipliée par $|a|/|a - b|$.

Exercice 1 — résoudre une équation du second degré

Résoudre $x^2 + 10^8 x + 1 = 0$ avec la formule usuelle en double précision. Que vaut la plus petite racine ? Proposer une formule stable.

Corrigé

La formule donne $x_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ avec $b = 10^8$. Or $\sqrt{b^2 - 4} \approx b(1 - 2 \times 10^{-16})$, indiscernable de b en double précision. Donc $-b + \sqrt{b^2 - 4}$ est calculé comme 0, et la petite racine ressort à 0 au lieu de -10^{-8} : *tous* les chiffres sont perdus.

Formule stable. Calculer d'abord la grande racine, qui n'implique aucune annulation :

$$x_- = \frac{-b - \text{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad x_+ = \frac{c}{a x_-} \quad (\text{par } x_+ x_- = c/a).$$

On obtient $x_- = -10^8$ et $x_+ = -10^{-8}$, tous deux exacts.

Le même piège en physique. La série de Ai pour $|x|$ grand a des termes culminant à e^{ξ} alors que le résultat vaut $\sim 10^{-1}$: c'est exactement de l'annulation catastrophique, et c'est ce qui impose la bascule vers l'asymptotique.

Exercice 2 — sommation compensée

On somme 10^7 termes valant 0,1. La somme naïve en f64 donne 999999,9998 au lieu de 10^6 . Pourquoi, et comment corriger ?

Corrigé

0,1 n'est pas représentable en binaire, et surtout l'accumulateur croît : quand il vaut $\sim 10^6$, son ulp est $\sim 10^{-10}$, et chaque ajout de 0,1 perd les bits en-dessous. L'erreur s'accumule linéairement, $\mathcal{O}(n\varepsilon)$.

Sommation de Kahan. Conserver la partie perdue dans une variable de compensation :

```
s = c = 0.0
for x in data:
    y = x - c           # reinjecte l'erreur precedente
    t = s + y
    c = (t - s) - y     # ce que l'addition a perdu
    s = t
```

L'erreur devient $\mathcal{O}(\varepsilon)$, indépendante de n .

Où cela compte ici. Dans une somme de Euler–Maclaurin pour $\zeta(s)$, ou dans un produit scalaire sur une grille fine. Si un résultat dépend du *nombre* de points bien au-delà de l'ordre de convergence attendu, soupçonner l'accumulation.

3.2 Choisir une tolérance**Idée-clé**

Une tolérance doit être *dérivée*, pas choisie. Trois sources légitimes : (i) le terme d'erreur de la méthode ($\mathcal{O}(\Delta x^2)$, etc.) ; (ii) l'épsilon machine multiplié par le conditionnement ; (iii) la précision annoncée de la formule employée. Un nombre rond commode n'en est pas une.

Exercice 3 — une tolérance qui masque un bug

La documentation annonçait pour erf une erreur $< 10^{-14}$, et le test passait. Or l'implémentation utilise la formule 7.1.26 d'Abramowitz & Stegun. Où est le problème ?

Corrigé

La formule 7.1.26 est une approximation rationnelle dont la précision est $1,5 \times 10^{-7}$ **par construction** : c'est une propriété de la formule, pas de son implémentation. Annoncer 10^{-14} est donc faux de sept ordres de grandeur.

Si le test passait, c'est qu'il ne testait pas ce qu'il prétendait — par exemple en ne vérifiant que $\text{erf}(0) = 0$ et $\text{erf}(\infty) = 1$, valeurs exactes par symétrie.

Correctif honnête. Mesurer sur une grille dense contre une référence indépendante, publier le chiffre obtenu ($1,4 \times 10^{-7}$ ici), et indiquer que la limite vient de la formule. Si la précision machine est requise, il faut changer de formule — fraction continue pour erfc à grand x — et non resserrer la tolérance.

4 Algèbre linéaire pour méthodes spectrales

4.1 Le problème aux valeurs propres tridiagonal

Discretiser $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi$ par différences finies centrées donne une matrice symétrique tridiagonale :

$$H_{ii} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_i, \quad H_{i,i\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}.$$

Théorème 4.1 (Spectre exact du laplacien discret). *Pour $V \equiv 0$ et conditions de Dirichlet sur N nœuds intérieurs,*

$$E_k = \frac{2\hbar^2}{m\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right), \quad k = 1, \dots, N.$$

Démonstration (esquisse). Chercher $\psi_j^{(k)} = \sin(jk\pi/(N+1))$. L'action de H donne, via $\sin(a-b) + \sin(a+b) = 2\sin a \cos b$, le facteur $2 - 2\cos(k\pi/(N+1)) = 4\sin^2(k\pi/2(N+1))$. Les conditions $\psi_0 = \psi_{N+1} = 0$ sont automatiquement satisfaites. $\square$

Idée-clé

Ce théorème est une *mine* pour les tests : il donne le spectre exact de la matrice qu'on diagonalise réellement, sans erreur de discrétisation entre les deux. Un diagonaliseur qui échoue ici est cassé, pas imprécis.

Exercice 1 — limite continue et largeur effective

(a) Montrer que $E_k \rightarrow k^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$ quand $\Delta x \rightarrow 0$, et identifier L . (b) Un utilisateur prend $N = 400$, $\Delta x = L/N$ avec $L = 10$, et trouve $E_1 = 0,049102$ contre $\pi^2/(2 \cdot 100) = 0,049348$ attendu, soit 0,5 % d'écart. Est-ce une erreur de discrétisation ?

Corrigé

(a) Pour k fixe et $N \rightarrow \infty$, l'argument du sinus tend vers 0 : $\sin^2(u) \simeq u^2$. Donc

$$E_k \simeq \frac{2\hbar^2}{m\Delta x^2} \cdot \frac{k^2\pi^2}{4(N+1)^2} = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2m[(N+1)\Delta x]^2}.$$

On lit $L = (N+1)\Delta x$: les murs sont un nœud *au-delà* de chaque extrémité de la grille intérieure.

(b) Non — ou pas seulement. Avec $\Delta x = 10/400$, la largeur effective est $L_{\text{eff}} = (401)(0,025) = 10,025$, pas 10. L'énergie exacte correspondante est

$$\frac{\pi^2}{2 \times 10,025^2} = 0,049102,$$

ce qui reproduit la valeur mesurée à 5×10^{-6} près. L'écart de 0,5 % était donc une **erreur de convention**, pas de méthode.

Piège

Cette confusion L contre $(N+1)\Delta x$ a fait conclure à un « bug de normalisation des valeurs propres » dans une version antérieure de nos notebooks. Avant d'accuser le solveur, vérifier que le problème posé est bien celui qu'on croit poser.

4.2 Conditionnement et localisation du spectre

Théorème 4.2 (Gershgorin). *Toute valeur propre de A appartient à la réunion des disques $D_i = \{z : |z - A_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |A_{ij}|\}$.*

Exercice 2 — encadrer le spectre avant de le calculer

Pour le hamiltonien du puits infini ($V \equiv 0$), avec $\kappa = \hbar^2/(2m\Delta x^2)$, donner l'encadrement de Gershgorin et le comparer au spectre exact.

Corrigé

Les termes diagonaux valent 2κ et chaque ligne intérieure a deux hors-diagonaux valant $-\kappa$. Les disques sont donc centrés en 2κ de rayon 2κ : toutes les valeurs propres sont dans $[0, 4\kappa]$.

Le spectre exact est $E_k = 4\kappa \sin^2(\frac{k\pi}{2(N+1)})$, qui balaie bien $(0, 4\kappa)$: l'encadrement est atteint asymptotiquement aux deux bouts.

Idée-clé

Gershgorin coûte $\mathcal{O}(n)$ et donne immédiatement l'ordre de grandeur attendu. Si le solveur renvoie 32771 alors que $4\kappa = 2/\Delta x^2$ vaut 32768 pour $\Delta x = 1/181$, on voit du premier coup d'œil qu'il rend le haut de bande, pas le bas. Un encadrement grossier est un test à part entière.

4.3 Pourquoi Jacobi ne suffit pas

L'algorithme de Jacobi annule les éléments hors-diagonaux par rotations successives. Sur une matrice *tridiagonale*, chaque rotation recrée des éléments hors des trois diagonales (*fill-in*), qu'il faut suivre.

Piège

Notre implémentation fautive écrivait la mise à jour hors-diagonale sous la forme `h_off[p-1] = c*h_off[p-1] - s*h_off[p-1]`, expression auto-référentielle qui ne suit aucun remplissage, et plafonnait à 200 itérations quelle que soit la taille. Résultat : la matrice restait quasi inchangée et la routine renvoyait sa diagonale.

La méthode correcte pour une matrice symétrique tridiagonale est l'algorithme **QL implicite à décalages de Wilkinson**, qui exploite la structure au lieu de la détruire, en $\mathcal{O}(n^2)$ pour les valeurs propres seules.

Exercice 3 — compter les nœuds sans se faire piéger

Le n -ième état propre d'un potentiel 1D possède exactement n nœuds intérieurs (théorème de Sturm). Sur l'oscillateur harmonique discrétisé, un étudiant compte les changements de signe et trouve $[90, 68, 51, 56, 49]$ pour les cinq premiers états, au lieu de $[0, 1, 2, 3, 4]$. Le solveur est-il faux ?

Corrigé

Non. Dans la région classiquement interdite, $|\psi|$ décroît comme $e^{-x^2/2}$ et atteint 10^{-300} : à ce niveau, le signe est du pur bruit d'arrondi, et chaque oscillation parasite compte comme un nœud.

Remède. Ne compter que là où l'amplitude est significative :

```
v = np.asarray(psi)
sig = v[np.abs(v) > 1e-8 * np.abs(v).max()]
nodes = int(np.sum(sig[:-1] * sig[1:] < 0))
```

Avec ce seuil on retrouve $[0, 1, 2, 3, 4]$, et le recouvrement avec les fonctions de Hermite exactes vaut 1 à 10^{-9} près.

Morale. Un test doit être robuste au bruit qu'il va rencontrer. Un critère binaire (le signe) appliqué à des nombres dénormalisés ne mesure rien.

5 Équations différentielles : stabilité et ordre

5.1 Consistance, stabilité, convergence

Théorème 5.1 (Lax, version informelle). *Pour un problème bien posé et un schéma consistant : stabilité $\iff$ convergence.*

Intuition

Consistance = le schéma approche la bonne équation quand le pas tend vers zéro. Stabilité = les erreurs ne sont pas amplifiées. Les deux sont nécessaires : un schéma consistant mais instable diverge, un schéma stable mais inconsistant converge vers la mauvaise solution.

5.2 Runge–Kutta emboîté et contrôle du pas

La paire Dormand–Prince évalue deux solutions, d'ordres 4 et 5, partageant les mêmes évaluations de f . Leur différence estime l'erreur locale :

$$\varepsilon_i = \Delta t \sum_j (b_j - b_j^*) k_{j,i}, \quad \text{err} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i \left(\frac{\varepsilon_i}{\text{atol} + \text{rtol} |y_i|} \right)^2}.$$

On accepte si $\text{err} \leq 1$ et on ajuste $\Delta t \leftarrow \Delta t \cdot \text{clamp}(0,9 \text{err}^{-1/5}, 0,2, 5)$.

Exercice 1 — diagnostiquer un intégrateur qui n'avance pas

Un RK45 adaptatif sur $y' = -2y$, $y(0) = 1$, $t \in [0, 1]$ avec $\text{rtol} = 10^{-10}$ épuise ses 10^5 pas et renvoie $y \approx 0,9996$. Que s'est-il passé, et pourquoi l'oscillateur harmonique « passait-il » le test de conservation de l'énergie ?

Corrigé

$y(1) = e^{-2} \approx 0,1353$. Obtenir 0,9996 signifie que t n'a progressé que de $\approx 2 \times 10^{-4}$: le contrôleur a effondré Δt à $\sim 10^{-9}$ et l'a maintenu là.

Cause. L'estimateur d'erreur utilisait de mauvais coefficients (pas ceux de Dormand–Prince) et appliquait la composante [0] d'une évaluation supplémentaire à *toutes* les composantes. L'erreur estimée était donc systématiquement énorme, quel que soit le pas, et le contrôleur réagissait en réduisant Δt indéfiniment.

Pourquoi l'oscillateur passait. Le test vérifiait $E = (y^2 + v^2)/2 = \text{cste}$. Or si le schéma n'avance pratiquement pas, y et v ne bougent pas, et l'énergie est trivialement conservée !

Idée-clé

Un invariant conservé n'est une preuve de correction que si le système *évolue*. Toujours associer au test de conservation un test de progression : ici, vérifier que `times[-1]` atteint bien t_{fin} .

5.3 Raideur et A-stabilité

Définition 5.2. Un problème est *raide* lorsque son jacobien possède des valeurs propres d'échelles très séparées, forçant un pas explicite à suivre la dynamique la plus rapide même une fois celle-ci éteinte.

Exercice 2 — le pas imposé par le mode mort

Pour $y' = -\lambda y$ avec $\lambda = 10^6$, quelle contrainte Euler explicite impose-t-il sur Δt ? Combien de pas pour intégrer jusqu'à $t = 1$?

Corrigé

Euler explicite donne $y_{n+1} = (1 - \lambda \Delta t)y_n$. La stabilité exige $|1 - \lambda \Delta t| \leq 1$, soit $\Delta t \leq 2/\lambda = 2 \times 10^{-6}$.

Pour $t = 1$: au moins 5×10^5 pas — alors que la solution $e^{-10^6 t}$ est numériquement nulle dès $t \approx 10^{-5}$. On paie un demi-million de pas pour suivre un mode éteint depuis longtemps.

Remède. Euler implicite donne $y_{n+1} = y_n/(1 + \lambda \Delta t)$, stable pour tout $\Delta t > 0$ (A-stable). On peut prendre $\Delta t = 0,01$ et terminer en cent pas.

Dans pysic-rs. `backward_euler` et `crank_nicolson` couvrent ce régime ; `rk45_solve` est explicite et s'effondrera sur un problème raide — en réduisant le pas, exactement comme le ferait un estimateur d'erreur cassé. D'où l'utilité du balayage en Δt pour distinguer les deux causes.

5.4 Symplecticité

Pour un système hamiltonien, un intégrateur symplectique préserve exactement la forme $\omega = dq \wedge dp$. L'énergie n'est alors pas conservée exactement, mais elle *oscille sans dérive séculaire*, ce qui est le comportement voulu sur des temps longs.

Exercice 3 — reconnaître un intégrateur à sa dérive

Trois intégrateurs sur l'oscillateur harmonique sur 10^5 périodes donnent : (A) énergie croissant linéairement ; (B) énergie oscillant dans une bande constante ; (C) énergie décroissant exponentiellement. Identifier Euler explicite, Euler implicite, et Verlet.

Corrigé

(A) Euler explicite. Son multiplicateur d'amplification a un module > 1 pour ce problème : il injecte de l'énergie.

(B) Verlet. Symplectique : l'énergie calculée oscille autour de la vraie valeur dans une bande bornée, sans dérive. C'est le comportement recherché.

(C) Euler implicite. Inconditionnellement stable mais dissipatif : il amortit le système. Utile pour des problèmes raides, désastreux pour de la dynamique conservative.

Test pratique. Tracer $E(t)$ sur 10^4 périodes : une droite indique (A) ou (C), une bande indique (B). C'est plus discriminant que n'importe quelle mesure sur une seule période.

6 Quadrature et interpolation

6.1 Newton–Cotes et ses limites

Théorème 6.1 (Erreur de Simpson). Pour $f \in C^4$,

$$\int_a^b f = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \cdots + f_n) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Exercice 1 — vérifier l'ordre quatre

Intégrer $\int_0^1 e^x dx = e - 1$ par Simpson avec $n = 4, 8, 16$. Quel facteur de réduction d'erreur attendre, et que conclure s'il vaut 4 ?

Corrigé

L'erreur est $\mathcal{O}(h^4)$, donc doubler n doit la diviser par 16.

Pour $n = 4$: erreur $\approx 5,8 \times 10^{-6}$; $n = 8$: $3,6 \times 10^{-7}$; $n = 16$: $2,3 \times 10^{-8}$. Les rapports valent 16,1 et 15,9 : l'ordre quatre est confirmé.

Si le facteur vaut 4, la méthode est en réalité d'ordre deux. Cause la plus fréquente : le traitement des extrémités (poids 1, 4, 2, ..., 4, 1 mal appliqué), ou un n impair silencieusement arrondi — Simpson exige n pair.

Idée-clé

Le test d'ordre est plus informatif que le test de valeur. Une méthode peut donner une bonne valeur sur un cas et être d'ordre faux ; l'ordre, lui, révèle la structure de l'erreur.

Piège

Phénomène de Runge. Interpolier $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ sur $[-1, 1]$ par un polynôme de degré élevé en nœuds *équidistants* diverge aux bords : l'erreur croît avec le degré. Plus de points donne un résultat pire.

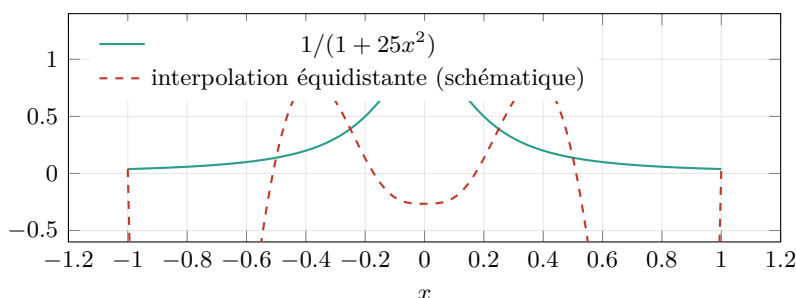


FIGURE 2 – Phénomène de Runge : l'interpolation polynomiale en nœuds équidistants oscille violemment près des bords, et c'est pire à degré élevé.

6.2 Pourquoi les nœuds de Chebyshev

Les zéros de T_n ,

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right), \quad k = 1, \dots, n,$$

se concentrent près des bords et minimisent la norme sup du polynôme nodal.

Théorème 6.2. Parmi les polynômes unitaires de degré n sur $[-1, 1]$, $2^{1-n}T_n$ minimise $\|\cdot\|_\infty$, avec pour valeur 2^{1-n} .

Exercice 2 — l'équioscillation

Montrer que $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ atteint ± 1 en exactement $n + 1$ points de $[-1, 1]$, alternativement. Pourquoi est-ce la propriété clé ?

Corrigé

Poser $x = \cos \theta$, $\theta \in [0, \pi]$: $T_n = \cos(n\theta)$ vaut ± 1 quand $n\theta = k\pi$, soit $\theta_k = k\pi/n$ pour $k = 0, \dots, n$ — exactement $n + 1$ points, avec des signes alternés $(-1)^k$.

Pourquoi c'est la propriété clé. Le théorème d'équioscillation de Chebyshev dit qu'un polynôme est la meilleure approximation uniforme si et seulement si son erreur équi oscille en au moins $n + 2$ points. La forme de T_n est donc la signature de l'optimalité, et c'est ce qui fait des nœuds de Chebyshev le choix par défaut.

Comme test. $|T_n(x)| \leq 1$ sur $[-1, 1]$ est un invariant à coût nul : toute sortie hors de $[-1, 1]$ signale une récurrence instable.

Exercice 3 — quadrature de Gauss–Legendre

Combien de points faut-il pour intégrer exactement un polynôme de degré 7 ? Pourquoi les nœuds sont-ils les zéros de P_n ?

Corrigé

Une règle de Gauss à n points est exacte jusqu'au degré $2n-1$. Pour le degré 7 : $2n-1 \geq 7$, soit $n \geq 4$. Quatre points suffisent.

Pourquoi les zéros de P_n . On dispose de $2n$ degrés de liberté (n nœuds et n poids). Imposer l'exactitude jusqu'au degré $2n-1$ donne $2n$ équations. La solution existe parce que P_n est orthogonal à tout polynôme de degré $< n$: en écrivant $f = qP_n + r$ avec $\deg r < n$, le terme qP_n a une intégrale nulle et s'annule aussi aux nœuds, de sorte que la règle n'a besoin d'être exacte que sur r .

Test naturel. Intégrer x^k pour $k = 0, \dots, 2n-1$: le résultat doit être exact à l'arrondi. C'est $2n$ tests pour le prix d'une boucle, et ils sont indépendants les uns des autres.

7 Analyse de Fourier et méthodes spectrales

7.1 Dérivation spectrale

Pour une fonction périodique, $\widehat{f}'(k) = ik\widehat{f}(k)$. La dérivée spectrale est donc : FFT, multiplication par ik , FFT inverse. Elle est *exacte* pour les polynômes trigonométriques, et converge plus vite que toute puissance de Δx pour f analytique — convergence dite spectrale.

Piège

Cette précision suppose la périodicité. Appliquée à une fonction non périodique, la dérivée spectrale produit des oscillations de Gibbs aux bords qui contaminent tout le domaine.

7.2 Découpage de Strang

Théorème 7.1 (Strang). *Pour A, B bornés,*

$$e^{(A+B)\Delta t} = e^{A\Delta t/2} e^{B\Delta t} e^{A\Delta t/2} + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Démonstration (esquisse). Développer les deux membres par Baker–Campbell–Hausdorff. Les termes d'ordre 1 coïncident. À l'ordre 2, la disposition symétrique annule le commutateur $[A, B]$ qui subsiste dans le produit naïf $e^{A\Delta t} e^{B\Delta t}$. Le premier écart est un double commutateur d'ordre 3. □

Dans pysics-rs

C'est le schéma de `schrodinger_split_step_1d` : $\hat{T}$ diagonal en k , $\hat{V}$ diagonal en x . Chaque facteur étant l'exponentielle d'un opérateur hermitien, il est unitaire — et la norme est un invariant *exact* du schéma discret, pas seulement à l'ordre de troncature.

Exercice 1 — l'invariant qui ne dépend pas du pas

On observe qu'un propagateur voit sa norme passer de 1,77 à $3,6 \times 10^{57}$ en 100 pas. On réduit Δt d'un facteur 100 : la norme finale est *identique*. Qu'en conclure ?

Corrigé

Qu'il ne s'agit pas d'une instabilité.

Une instabilité numérique est une propriété du *pas de temps* : le facteur d'amplification dépend de Δt , et réduire le pas améliore (ou du moins change) le résultat. Ici, l'indépendance en Δt signifie que l'erreur est dans l'**opérateur** lui-même : la matrice de pas n'est pas unitaire.

Le cas réel. La rotation de masse $e^{-i\sigma_x\theta/2} = \cos\frac{\theta}{2}\mathbb{I} - i\sin\frac{\theta}{2}\sigma_x$ avait été codée avec $\exp(i\sin\frac{\theta}{2})$ — de module 1 — au lieu de $i\sin\frac{\theta}{2}$. La matrice de pas devenait $\approx \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, de valeurs singulières 2 et 0 : chaque pas multipliait la norme par un facteur fixe.

Idée-clé

Réflexe de diagnostic : balayer Δt avant de conclure à une instabilité. Si l'erreur est invariante sous ce balayage, la faute est algébrique et aucun contrôle de pas ne la corrigera.

7.3 Repliement et théorème de Nyquist

Théorème 7.2 (Nyquist–Shannon). *Un signal de bande limitée à $f_{\max}$ est entièrement déterminé par ses échantillons pris à $f_s > 2f_{\max}$. Au-delà, les fréquences f et $f_s - f$ deviennent indiscernables (repliement).*

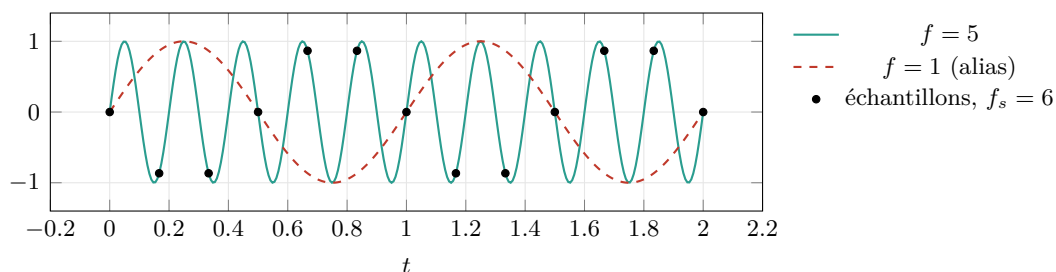


FIGURE 3 – Échantillonné à $f_s = 6$, un signal à $f = 5$ est indiscernable d'un signal à $f_s - f = 1$. Les points noirs tombent exactement sur les deux courbes.

Exercice 2 — grille trop grossière

Un paquet d'onde a $k_0 = 30$ et on le discrétise sur $[-10, 10]$ avec $N = 128$. Y a-t-il repliement ?

Corrigé

$\Delta x = 20/128 = 0,15625$, donc $k_{\max} = \pi/\Delta x \approx 20,1$.

Comme $k_0 = 30 > k_{\max}$, oui : la composante principale est repliée et apparaîtra à $k_0 - 2k_{\max} \approx -10,1$. Le paquet semblera se propager *dans le mauvais sens*.

Remède. Exiger $N > k_0 L/\pi = 30 \times 20/\pi \approx 191$, donc $N = 256$ en pratique.

Piège

Ce symptôme — un paquet qui part à l'envers — est facilement pris pour un bug de signe dans le propagateur. Vérifier d'abord $k_{\max} = \pi/\Delta x$.

7.4 Mesurer une fréquence

Théorème 7.3 (Résolution spectrale). *Sur une fenêtre de durée T , la résolution en pulsation d'une FFT est $\Delta\omega = 2\pi/T$. Deux fréquences séparées de moins de $\Delta\omega$ sont indiscernables.*

Exercice 3 — Zitterbewegung mal mesuré

On veut mesurer $\omega_{\text{zb}} = 2mc^2/\hbar = 2$ (unités naturelles). On intègre jusqu'à $t = 1,2$ et la FFT annonce $\omega = 5,19$, soit 160 % d'erreur. Où est la faute, et quelle durée faut-il ?

Corrigé

La période vaut $T_{\text{zb}} = 2\pi/\omega_{\text{zb}} = \pi \approx 3,14$. Intégrer jusqu'à $t = 1,2$, c'est observer $1,2/3,14 \approx 0,38$ période : moins d'un demi-cycle.

La résolution est alors $\Delta\omega = 2\pi/1,2 \approx 5,2$ — du même ordre que la valeur cherchée. Le « pic » mesuré n'a aucun sens : il est entièrement dans le premier bin.

Remède. Intégrer sur $\gtrsim 3$ périodes, soit $t \gtrsim 10$. Avec $T = 8$ on obtient $\Delta\omega = 0,785$ et un pic à 2,34, soit 0,44 bin de la prédiction — compatible.

Idée-clé

Toujours publier une estimation de fréquence à côté de sa résolution $2\pi/T$. Un écart de 0,34 n'est interprétable que si l'on sait que le bin vaut 0,785. Un solveur correct ne protège pas d'un protocole de mesure faux.

8 Analyse asymptotique

8.1 WKB et points tournants

Pour $\psi'' = Q(x)\psi$ avec Q lentement variable,

$$\psi(x) \approx \frac{1}{Q^{1/4}} \exp\left(\pm \int^x \sqrt{Q} dx'\right),$$

approximation qui *diverge* là où $Q = 0$: les points tournants. C'est précisément là qu'il faut une solution exacte de raccordement.

Théorème 8.1 (Raccordement d'Airy). *Au voisinage d'un point tournant simple x_t où $Q(x) \simeq Q'(x_t)(x - x_t)$, le changement de variable $z = [Q'(x_t)]^{1/3}(x - x_t)$ ramène l'équation à $\psi_{zz} = z\psi$, dont les solutions sont $\text{Ai}(z)$ et $\text{Bi}(z)$.*

Note historique

Airy introduit ces fonctions en 1838 pour expliquer l'intensité lumineuse près d'une caustique — le bord brillant d'un arc-en-ciel. La même fonction décrit le raccordement quantique à un point tournant, et, comme on le verra, la fonction d'onde de l'univers près de sa barrière tunnel.

Exercice 1 — point tournant de Wheeler–DeWitt

L'équation de Wheeler–DeWitt en minisuperspace s'écrit $\Psi'' = U(a)\Psi$ avec $U(a) = a^2 - \frac{\Lambda}{3}a^4$. (a) Trouver le point tournant $a_t > 0$. (b) Calculer $U'(a_t)$. (c) Donner le changement de variable ramenant à l'équation d'Airy.

Corrigé

(a) $U(a) = 0$ avec $a \neq 0$ donne $a^2 = \frac{\Lambda}{3}a^4$, soit $a_t = \sqrt{3/\Lambda}$.

(b) $U'(a) = 2a - \frac{4\Lambda}{3}a^3$. En a_t :

$$U'(a_t) = 2\sqrt{\frac{3}{\Lambda}} - \frac{4\Lambda}{3}\left(\frac{3}{\Lambda}\right)^{3/2} = 2\sqrt{\frac{3}{\Lambda}} - 4\sqrt{\frac{3}{\Lambda}} = -2\sqrt{\frac{3}{\Lambda}}.$$

(c) Près de a_t , $U \simeq U'(a_t)(a - a_t)$, donc $\Psi'' \simeq -2\sqrt{3/\Lambda}(a - a_t)\Psi$. Poser

$$z = -\left[2\sqrt{3/\Lambda}\right]^{1/3}(a - a_t) \implies \frac{d^2\Psi}{dz^2} = z\Psi.$$

Pourquoi ce calcul compte. Il transforme un problème sans solution analytique en un problème *notable* : on intègre numériquement l'ODE complète et on compare à Ai dans la fenêtre où la linéarisation est valable. L'écart doit croître en s'éloignant de a_t — signature de la linéarisation qui se dégrade, et non de l'intégrateur qui dérive.

8.2 Méthode du col

Théorème 8.2 (Laplace). Pour $I(\lambda) = \int g(x)e^{\lambda f(x)}dx$ avec f maximal en x_0 intérieur et $f''(x_0) < 0$:

$$I(\lambda) \sim g(x_0)e^{\lambda f(x_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_0)|}}, \quad \lambda \rightarrow \infty.$$

Exercice 2 — retrouver Stirling par la méthode de Laplace

Appliquer le théorème à $\Gamma(z+1) = \int_0^\infty t^z e^{-t} dt$.

Corrigé

Écrire l'intégrande $e^{z \ln t - t}$ et poser $t = zu$:

$$\Gamma(z+1) = z^{z+1} \int_0^\infty e^{z(\ln u - u)} du.$$

Ici $f(u) = \ln u - u$, maximal en $u_0 = 1$ avec $f(1) = -1$ et $f''(1) = -1$. Le théorème donne

$$\Gamma(z+1) \sim z^{z+1} e^{-z} \sqrt{\frac{2\pi}{z}} = \sqrt{2\pi z} z^z e^{-z},$$

qui est exactement Stirling.

Idée-clé

La méthode du col explique *pourquoi* les développements asymptotiques sont ce qu'ils sont : ils viennent du voisinage d'un point stationnaire, et leur qualité se dégrade quand plusieurs cols se rapprochent — ce qui est précisément ce qui arrive à un point tournant, d'où la nécessité d'Airy.

8.3 Séries asymptotiques et troncature optimale

Une série asymptotique $f(x) \sim \sum_n a_n x^{-n}$ diverge, mais tronquée au terme le plus petit elle donne la meilleure approximation possible.

Exercice 3 — où basculer pour Airy ?

Le développement de Ai utilise $\xi = \frac{2}{3}x^{3/2}$ et des coefficients $u_1 = 5/72 \approx 0,069$, $u_2 \approx 0,037$, $u_3 \approx 0,038$. À $|x| = 9$, faut-il la série de Maclaurin ou l'asymptotique ?

Corrigé

Côté asymptotique. $\xi = \frac{2}{3} \cdot 9^{3/2} = 18$. Le premier terme négligé après u_3 est d'ordre $u_4/\xi^4 \sim 10^{-5}$, donc l'asymptotique à quatre termes vaut $\sim 10^{-7}$ en relatif — acceptable, pas excellent.

Côté série. Ai est entière, la série converge. Mais les termes culminent à $\sim e^\xi = e^{18} \approx 6,6 \times 10^7$ alors que le résultat vaut $\sim 10^{-1}$: on perd ≈ 9 chiffres par compensation, soit une erreur $\sim 10^{-7}$ également.

Conclusion. $|x| = 9$ est proche du *point de croisement optimal* : les deux méthodes y sont équivalentes, et c'est pourquoi **physic-rs** y place sa bascule. Plus bas, la série gagne (précision machine) ; plus haut, l'asymptotique gagne.

Piège

Une version antérieure appliquait l'asymptotique pour *tout* $x \geq -1$, $\xi = 0$ compris. En $x = 0$ cela divise par zéro : $\text{Ai}(0)$ renvoyait **NaN** au lieu de 0,3550. Toujours tester une fonction spéciale *en zéro* et *de part et d'autre de chaque bascule*.

9 Opérateurs, unitarité et algèbre de Clifford

9.1 Traces de matrices gamma

Les calculs de sections efficaces se réduisent presque toujours à des traces.

Proposition 9.1. $\text{tr}(\gamma^\mu) = 0$, $\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) = 4\eta^{\mu\nu}$, et la trace d'un produit d'un nombre impair de γ est nulle.

Exercice 1 — démontrer $\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) = 4\eta^{\mu\nu}$

Corrigé

Partir de l'algèbre : $\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \mathbb{K}$. Prendre la trace :

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) + \text{tr}(\gamma^\nu \gamma^\mu) = 2\eta^{\mu\nu} \text{tr}(\mathbb{K}) = 8\eta^{\mu\nu}.$$

La trace étant cyclique, les deux termes de gauche sont égaux, d'où $2 \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) = 8\eta^{\mu\nu}$ et le résultat.

Remarque. La démonstration n'utilise que l'algèbre de Clifford et la dimension 4 de la représentation — jamais une réalisation explicite. C'est ce qui la rend valable dans toute représentation, et c'est un bon test : une implémentation de matrices gamma doit vérifier ces traces quelle que soit la base choisie.

9.2 Hermiticité et conservation

Théorème 9.2. Si $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, alors $U = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ est unitaire et $\|\psi(t)\| = \|\psi(0)\|$.

Démonstration. $U^\dagger U = e^{+i\hat{H}^\dagger t/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{+i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \mathbb{K}$, les deux exponentielles commutent puisqu'elles sont fonctions du même opérateur. $\square$

9.3 L'algèbre de Clifford

Dirac cherche une équation du premier ordre en t et en $\mathbf{x}$: $i\hbar \partial_t \psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)\psi$. En itérant, la relation $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ impose

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbb{K}, \quad \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0.$$

Idée-clé

Des nombres commutent. Aucun ensemble de nombres ne peut satisfaire ces relations : les coefficients doivent être des **matrices**, et ψ un **spineur**. Le spin 1/2 et l'antimatière en découlent comme conséquences, non comme postulats.

Exercice 2 — vérifier une réalisation

Montrer que $\alpha = \sigma_z$, $\beta = \sigma_x$ conviennent en 1+1 D, et qu'aucun choix de *deux* matrices 2×2 ne peut réaliser l'algèbre en 3+1 D.

Corrigé

Réalisation 1+1 D. $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 = \mathbb{I}$, et

$$\{\sigma_z, \sigma_x\} = \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

Les trois conditions sont satisfaites.

Impossibilité en 3+1 D. Il faudrait quatre matrices $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ anticommutant deux à deux, de carré $\mathbb{I}$, et hermitiennes. Or l'espace des matrices 2×2 hermitiennes de trace nulle est de dimension 3 (engendré par $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$). On ne peut y loger quatre éléments mutuellement anticommutants : toute matrice anticommutant avec les trois σ_i commuterait avec tout, donc serait scalaire, donc ne pourrait être de carré $\mathbb{I}$ et de trace nulle. Il faut passer en 4×4 — d'où le spineur à quatre composantes.

Exercice 3 — battement matière/antimatière

À $p = 0$, $\hat{H} = mc^2 \sigma_x$. Partant de $\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, calculer $\psi(t)$ et la population de la composante basse. Quelle pulsation ?

Corrigé

$e^{-i\sigma_x \tau} = \cos \tau \mathbb{I} - i \sin \tau \sigma_x$ avec $\tau = mc^2 t / \hbar$. Donc

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \cos \tau \\ -i \sin \tau \end{pmatrix}, \quad |\psi_R|^2 = \sin^2 \tau = \frac{1 - \cos(2\tau)}{2}.$$

La population bat à $\omega_{zb} = 2mc^2/\hbar$: c'est le *Zitterbewegung*, interférence entre les branches d'énergie positive et négative. Pour l'électron, $\omega_{zb} \approx 1,6 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$.

Usage comme test. C'est une forme close : on peut noter le solveur contre $\sin^2(mc^2 t/\hbar)$, et non simplement admirer une courbe qui oscille.

10 Géométrie différentielle minimale

10.1 Métrique, Christoffel, courbure

Définition 10.1. Les symboles de Christoffel de la connexion de Levi-Civita :

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda} = \frac{1}{2}g^{\lambda\rho}(\partial_{\mu}g_{\rho\nu} + \partial_{\nu}g_{\rho\mu} - \partial_{\rho}g_{\mu\nu}).$$

Le tenseur de Riemann en dérive, puis $R_{\mu\nu} = R^{\lambda}_{\mu\lambda\nu}$ et $R = g^{\mu\nu}R_{\mu\nu}$.

Idée-clé

Chaque étape *dérive* la métrique. Une métrique dont on a gelé une variable n'est plus dérivable par rapport à cette variable — et le résultat sera faux sans le moindre avertissement.

Exercice 1 — l'erreur du θ gelé

La métrique de Schwarzschild s'écrit

$$ds^2 = -f dt^2 + f^{-1} dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2, \quad f = 1 - \frac{2M}{r}.$$

Une implémentation pose $g_{\varphi\varphi} = r^2$ « en supposant $\theta = \pi/2$ ». Le scalaire de Ricci calculé vaut alors $-2/r^2$ au lieu de 0. (a) Pourquoi R doit-il être nul ? (b) D'où vient $-2/r^2$?

Corrigé

(a) Schwarzschild est une solution du vide : $R_{\mu\nu} = 0$, donc $R = g^{\mu\nu}R_{\mu\nu} = 0$ *identiquement*, à tout rayon et tout angle. Ce n'est pas une approximation.

(b) En posant $g_{\varphi\varphi} = r^2$ au lieu de $r^2 \sin^2 \theta$, on impose $\partial_{\theta}g_{\varphi\varphi} = 0$ alors que la vraie valeur est $2r^2 \sin \theta \cos \theta$. Les symboles $\Gamma_{\varphi\varphi}^{\theta}$ et $\Gamma_{\theta\varphi}^{\varphi}$ sont donc faux.

Ces termes sont exactement ceux qui compensent la courbure de la 2-sphère de rayon r , dont le scalaire de Ricci intrinsèque vaut $2/r^2$. En les supprimant, il subsiste $-2/r^2$ — la courbure sphérique non compensée, au signe près.

Remède. Utiliser une métrique fonction de (r, θ) dès qu'elle sera dérivée. *physic-rs* fournit `schwarzschild_metric_full(r, theta, M)` à cet usage ; R retombe alors à $\sim 10^{-8}$, le résidu de différences finies.

10.2 Géodésiques

Définition 10.2. Une géodésique vérifie $\ddot{x}^{\lambda} + \Gamma_{\mu\nu}^{\lambda}\dot{x}^{\mu}\dot{x}^{\nu} = 0$.

Exercice 2 — quantités conservées comme test d'intégrateur

Pour Schwarzschild, la métrique ne dépend ni de t ni de φ . Quelles quantités sont conservées, et comment s'en servir pour tester un intégrateur de géodésiques ?

Corrigé

Par le théorème de Noether, l'indépendance en t et φ donne deux constantes du mouvement :

$$E = \left(1 - \frac{2M}{r}\right)\dot{t} \quad (\text{énergie}), \quad L = r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \quad (\text{moment cinétique}).$$

S'ajoute la normalisation $g_{\mu\nu}\dot{x}^\mu\dot{x}^\nu = -1$ (temps propre) ou 0 (photon).

Protocole de test. Intégrer une orbite et tracer $E(\tau)$, $L(\tau)$ et la norme. Trois invariants pour le prix d'un, aucun ne nécessitant de connaître la trajectoire exacte — exactement le type de référence que l'on recherche.

Idée-clé

Toute symétrie de la métrique fournit gratuitement une quantité conservée, donc un test. Avant d'intégrer un système, inventorier ses symétries : c'est la source de références la plus rentable qui soit.

Piège

Le test qui ne pouvait pas échouer. Un test de platitude de Ricci existait :

```
let rs = |_c: &[f64]| schwarzschild_metric(10.0, 1.0); // ignore _c
assert!(ricci_scalar(&rs, &coords, 1e-4).abs() < 0.1);
```

La clôture ignore ses coordonnées : la métrique est *constante*, toutes ses dérivées sont nulles, R s'annule trivialement. Ce test passe pour n'importe quelle implémentation, y compris une qui renverrait zéro sans rien calculer. Et sa tolérance de 0,1 aurait de toute façon accepté l'artefact $-0,02$.

Idée-clé

Question à se poser devant toute assertion : que devrait faire la routine pour la violer ? Si la réponse est « rien de plausible », le test mesure le harnais, pas le code.

11 Systèmes contraints et invariants topologiques

11.1 La décomposition ADM

Le découpage 3+1 de l'espace-temps donne

$$ds^2 = -N^2 dt^2 + \gamma_{ij}(dx^i + N^i dt)(dx^j + N^j dt),$$

avec N le *lapse*, N^i le *shift*, γ_{ij} la métrique spatiale induite, et la courbure extrinsèque $K_{ij} = \frac{1}{2N}(\partial_t \gamma_{ij} - D_i N_j - D_j N_i)$.

Les équations d'Einstein se scindent en six équations d'évolution et quatre **contraintes** sans dérivée temporelle :

$$\mathcal{H} = {}^{(3)}R + K^2 - K_{ij}K^{ij} - 16\pi\rho = 0, \quad \mathcal{M}^i = D_j(K^{ij} - \gamma^{ij}K) - 8\pi j^i = 0.$$

Idée-clé

Le hamiltonien total de la relativité générale est une contrainte, $\mathcal{H} \approx 0$. Il n'engendre pas d'évolution dans un temps extérieur, car il n'y a pas de temps extérieur. C'est l'origine du « problème du temps » en gravité quantique : quantifier $\mathcal{H} \approx 0$ donne $\hat{\mathcal{H}}\Psi = 0$, équation sans ∂_t .

Exercice 1 — contrainte hamiltonienne sur tranche plate

Sur une tranche plate (${}^{(3)}R = 0$), calculer $\mathcal{H}$ pour $K_{ij} = c\delta_{ij}$ et $\rho = 0$.

Corrigé

$K = \gamma^{ij}K_{ij} = \delta^{ij}c\delta_{ij} = 3c$, donc $K^2 = 9c^2$. Ensuite $K_{ij}K^{ij} = c^2\delta_{ij}\delta^{ij} = 3c^2$. D'où

$$\mathcal{H} = 0 + 9c^2 - 3c^2 - 0 = 6c^2.$$

Usage. Forme close exacte, sans discrétisation : la routine doit la reproduire avec un écart *rigoureusement nul*. C'est l'un des rares tests où l'on peut exiger l'égalité bit à bit plutôt qu'une tolérance.

11.2 Invariants topologiques

Définition 11.1 (Phase de Berry). $\gamma = i \oint \langle \psi | \nabla_R \psi \rangle \cdot d\mathbf{R}$, dépendant uniquement de la géométrie du circuit, pas de la vitesse de parcours.

Pour un spin 1/2 transporté le long d'un cône d'angle solide Ω , $\gamma = -\Omega/2$.

Exercice 2 — le signe qui change

Calculer la phase de Berry d'une boucle équatoriale pour un spin 1/2. Interpréter.

Corrigé

Une boucle équatoriale sous-tend $\Omega = 2\pi$, donc $\gamma = -\pi$ et $e^{i\gamma} = -1$: l'état revient *changé de signe*.

C'est la manifestation géométrique du fait qu'un spineur nécessite 4π de rotation pour revenir à lui-même. Numériquement, la valeur doit être $-\pi$ à la précision machine.

Lien avec Aharonov–Bohm. Le même mécanisme, avec le flux magnétique enlacé au lieu de l'angle solide : $\Delta\varphi = q\Phi/\hbar$, alors même que $\mathbf{B} = 0$ tout le long du trajet. Le potentiel porte une information que les champs locaux ne contiennent pas.

Exercice 3 — nombre de Chern et quantification de Hall

La conductance de Hall vaut $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}C$ avec $C \in \mathbb{Z}$ le nombre de Chern. Pourquoi les plateaux expérimentaux sont-ils si plats ?

Corrigé

Parce que C est un **invariant topologique** : il compte l'enroulement de la fonction d'onde sur la zone de Brillouin et ne peut changer que par une transition où le gap se referme.

Le désordre, la température, la forme de l'échantillon déforment continûment le hamiltonien. Un invariant entier ne peut pas varier continûment : il reste rigoureusement constant tant que le gap subsiste. D'où des plateaux plats à 10^{-9} près, au point de servir d'étalon de résistance.

Idée-clé

La même logique vaut pour les tests numériques. Un invariant entier est *rigide* : il ne peut pas être « à peu près » correct. C'est pourquoi `winding_number` et `chern_number` sont parmi les routines les plus faciles à valider — et les fautes s'y voient immédiatement.

Exercice 4 — pourquoi l'intégralité est le meilleur des tests

Une routine de nombre d'enroulement renvoie 2,9997 pour $e^{3i\theta}$. Peut-on parler d'imprécision ?

Corrigé

Non. Le nombre d'enroulement est un **entier** par construction : c'est le degré d'une application $S^1 \rightarrow S^1$, un invariant d'homotopie. Il ne peut pas prendre la valeur 2,9997. Une sortie non entière prouve que la discrétisation du contour est insuffisante (sauts de phase mal déroulés), ou que l'algorithme est faux. Dans les deux cas, c'est un échec, pas une tolérance.

Idée-clé

Les tests les plus puissants sont ceux dont la valeur attendue appartient à un ensemble *discret*. Il n'y a pas de « presque entier » : soit le résultat tombe sur l'entier à la précision machine, soit quelque chose ne va pas.

12 Étude de cas : noter Wheeler–DeWitt de bout en bout

Ce chapitre assemble tout ce qui précède sur un seul problème, du papier au chiffre.

12.1 Le problème

On veut résoudre

$$\frac{d^2\Psi}{da^2} = U(a)\Psi, \quad U(a) = a^2 - \frac{\Lambda}{3}a^4, \quad \Lambda = 1,$$

et *savoir* si le résultat est correct.

12.2 Étape 1 — chercher la référence

Il n'existe pas de solution close de l'équation complète. Mais on a montré (chapitre 6) qu'au voisinage du point tournant $a_t = \sqrt{3}$ elle se réduit à l'équation d'Airy. On dispose donc d'une référence *locale*, valable dans une fenêtre autour de a_t — et Ai est fourni par une bibliothèque indépendante.

Idée-clé

Une référence locale suffit. Il n'est pas nécessaire de connaître la solution partout : il suffit d'une région où l'on sait ce qui doit sortir.

12.3 Étape 2 — vérifier les invariants analytiques d'abord

Avant d'intégrer, on teste ce que l'on peut calculer à la main :

$$U(a_t) = 0, \quad U'(a_t) = -2\sqrt{3/\Lambda} = -3,464102.$$

Ces deux valeurs sont vérifiables en une ligne et attrapent une erreur de signe ou de facteur dans le potentiel — avant que l'intégrateur n'entre en jeu.

12.4 Étape 3 — intégrer, puis noter

On intègre avec un RK45 adaptatif depuis a_t vers les petits a , en partant des conditions initiales d'Airy. Puis on compare à $\text{Ai}(z)$ avec $z = -[2\sqrt{3/\Lambda}]^{1/3}(a - a_t)$.

Exercice 1 — interpréter le profil d'erreur

L'écart relatif vaut $9,2 \times 10^{-3}$ au maximum, mais il est $\sim 10^{-9}$ près de a_t et croît de façon monotone en s'en éloignant. L'intégrateur dérive-t-il ?

Corrigé

Non, et le profil le prouve.

Une dérive d'intégrateur s'accumule avec le *nombre de pas*, donc croîtrait de façon monotone *le long du chemin d'intégration*. Ici l'erreur est minimale au point de départ (a_t) et croît en s'en éloignant — ce qui est aussi la direction d'intégration, donc les deux explications sont a priori compatibles.

Le discriminant : resserrer `rtol` de 10^{-10} à 10^{-12} . Si l'erreur ne bouge pas, elle ne vient pas de l'intégration. C'est le cas ici : l'écart est dû à la **linéarisation** $U \simeq U'(a_t)(a - a_t)$, dont la validité se dégrade précisément quand $|a - a_t|$ grandit.

Idée-clé

Même réflexe qu'au chapitre 5 : faire varier le paramètre de discrétisation. Erreur insensible $\Rightarrow$ la faute est ailleurs que dans la discrétisation. Ici « ailleurs » n'est même pas un bug : c'est une approximation que l'on a choisie en connaissance de cause.

12.5 Étape 4 — publier la mesure avec son domaine de validité

Le bon énoncé n'est pas « l'intégration reproduit Airy à 10^{-2} », mais :

dans la fenêtre $|a - a_t| < 0,45$ où la linéarisation est valable, l'écart relatif maximal à A_i est $9,2 \times 10^{-3}$, et il croît en s'éloignant du point tournant conformément au terme négligé $\mathcal{O}((a - a_t)^2)$.

Exercice 2 — récapitulatif

Pour chacun des cinq solveurs suivants, nommer l'invariant qui le note : propagateur de Schrödinger ; solveur aux valeurs propres ; propagateur de Dirac ; scalaire de Ricci ; nombre d'enroulement.

Corrigé

- **Schrödinger (split-step)** — unitarité : $\int |\psi|^2$ constante à l'arrondi, pour tout Δt . En complément, la forme close du paquet gaussien libre.
- **Valeurs propres** — spectre exact du laplacien discret $E_k = \frac{2\hbar^2}{m\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\pi}{2(N+1)}$, sans erreur de discrétisation interposée ; puis $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ pour l'oscillateur, et le comptage de nœuds (au-dessus du seuil de bruit).
- **Dirac** — unitarité de nouveau, plus la forme close $\sin^2(mc^2t/\hbar)$ de la population basse à $p = 0$.
- **Ricci** — annulation sur une solution du vide, à tout r et tout θ ; la métrique passée doit être une vraie fonction des coordonnées.
- **Enroulement** — intégralité : le résultat doit être un entier à la précision machine, sans tolérance.

Dans les cinq cas la référence est disponible *avant* d'écrire le solveur. C'est le point de tout ce cours : l'invariant se détermine au moment où l'on pose le problème, pas au moment où l'on débogue.

13 Synthèse : une liste de contrôle

Avant de publier un résultat numérique, parcourir cette liste.

1. **Quelle est la quantité de référence ?** Forme close, valeur tabulée, invariant, ou bibliothèque indépendante. S'il n'y en a aucune, le résultat est une illustration, pas une mesure.
2. **Le test peut-il échouer ?** Que devrait faire la routine pour violer l'assertion ? Si rien de plausible, le test est vacuous.
3. **La tolérance est-elle dérivée ?** Elle doit venir du terme d'erreur de la méthode, pas d'un nombre rond commode.
4. **Le système évolue-t-il ?** Un invariant conservé par un solveur qui n'avance pas ne prouve rien. Associer un test de progression.
5. **Ai-je balayé le paramètre de discrétisation ?** Erreur invariante sous le balayage $\Rightarrow$ faute algébrique, pas instabilité.

6. **Ai-je testé aux bascules ?** Zéro, bornes du domaine, et de part et d'autre de chaque changement de branche interne.
7. **L'invariant est-il bien impliqué par la physique ?** Une part notable des « bugs » sont des attentes fausses.
8. **La mesure est-elle publiée avec sa résolution ?** Une fréquence sans $2\pi/T$, une moyenne sans intervalle de confiance, ne sont pas interprétables.

Idée-clé

Le point 2 est le plus rentable. Sur les huit routines fausses que ce travail a révélées, plusieurs disposaient d'un test — qui ne pouvait structurellement pas échouer. Un test qui ne peut pas échouer est pire que pas de test : il transforme une absence de preuve en apparence de preuve.

A Annexe : valeurs de référence

Table de contrôle rapide. Toute implémentation doit reproduire ces valeurs ; un écart significatif est un défaut, pas une imprécision.

A.1 Fonctions spéciales

Quantité	Valeur	Origine
$\Gamma(1/2)$	1,772453850905516	$\sqrt{\pi}$
$\Gamma(5)$	24	$4!$
$B(3, 5)$	0,009523809523810	$1/105$
$\text{erf}(1)$	0,842700792949715	table A&S 7.1
$J_0(1)$	0,765197686557967	table A&S 9.1
$J_0(2,404825558)$	0	premier zéro de J_0
$J_1(3,831705970)$	0	premier zéro de J_1
$Y_0(1)$	0,088256964215677	table A&S 9.1
$\text{Ai}(0)$	0,355028053887817	$3^{-2/3}/\Gamma(2/3)$
$\text{Ai}(-2,338107410)$	0	premier zéro de Ai
$E_1(1)$	0,219383934395520	table A&S 5.1
$E_n(0)$	$1/(n-1)$	pour $n > 1$
$\zeta(2)$	1,644934066848226	$\pi^2/6$ (Bâle)
$\zeta(4)$	1,082323233711138	$\pi^4/90$
$\zeta(-1)$	$-1/12$	équation fonctionnelle
$\zeta(-3)$	$1/120$	équation fonctionnelle

A.2 Invariants physiques

Situation	Invariant	Valeur
Propagateur unitaire	$\int \psi ^2$	constante, à l'arrondi
Puits infini, largeur L	E_n	$n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
Oscillateur harmonique	E_n	$(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$
Paquet gaussien libre	$\sigma(t)$	$\sigma_0 \sqrt{1 + (\hbar t / m \sigma_0^2)^2}$
Dirac à $p = 0$	$ \psi_R ^2$	$\sin^2(mc^2 t / \hbar)$
Spin 1/2, boucle équatoriale	phase de Berry	$-\pi$
$e^{in\theta}$	enroulement	n exactement
Tranche plate, $K_{ij} = c\delta_{ij}$	$\mathcal{H}$	$6c^2$
Tranche plate, $K = 0$	$\mathcal{H}$	$-16\pi\rho$
Schwarzschild (vide)	R	0 partout
Schwarzschild	E, L	conservés le long des géodésiques

A.3 Ordres de convergence attendus

Méthode	Ordre	Diagnostic
Différences finies centrées	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	erreur $\div 4$ si $\Delta x \div 2$
Simpson	$\mathcal{O}(h^4)$	erreur $\div 16$
RK4	$\mathcal{O}(\Delta t^4)$	erreur $\div 16$
Dormand–Prince (RK45)	$\mathcal{O}(\Delta t^5)$	pas adaptatif
Découpage de Strang	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	erreur $\div 4$
Méthodes spectrales (f analytique)	plus vite que toute puissance	décroissance exponentielle

Idée-clé

Le tableau ci-dessus se lit comme un protocole : diviser le pas par deux et vérifier que l'erreur est divisée par le facteur annoncé. Si le facteur observé est 2 là où 4 est attendu, l'implémentation est d'ordre inférieur à ce qu'elle prétend — souvent parce qu'un terme de bord est traité à l'ordre un.

Pour aller plus loin

- Abramowitz & Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* — les tables contre lesquelles noter les fonctions spéciales.
- Press et al., *Numerical Recipes*, 3^e éd. — Dormand–Prince, fractions continues de Lentz, QL implicite.
- Misner, Thorne & Wheeler, *Gravitation* — décomposition ADM.
- Documentation **physic-rs** : <https://physic-rs.readthedocs.io/>, en particulier la page *From Quantisation to Quantum Gravity*.
- Notebook compagnon `14_dirac_adm_wheeler_dewitt.ipynb` : chaque exercice de ce cours y est vérifié numériquement.