

1 Convolution et corrélation.

Deux concepts abondamment utilisés en physique (et bien d'autres endroits) sont les convolutions et les corrélations. Les TF nous permettent de calculer ces choses de façon assez simple.

1.1 Les convolutions.

Le produit de convolution $f * g$ de deux fonctions f et g est définie par

$$h(x) = (f * g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(s)g(x-s)ds$$

Exercice : démontrer que le produit est commutatif : $f * g = g * f$.

L'endroit où l'on rencontre fréquemment ce produit est quand on mesure un signal. Supposons que le signal qu'on mesure est l'intensité lumineuse sur un écran, $f(x)$. Pour mesurer ce signal, l'expérimentateur doit positionner son détecteur à un point x , et mesurer son intensité. Bien sûr, il va effectuer cette mesure en plusieurs points. Le détecteur est cependant un instrument réel, de taille finie, disons 2ℓ (et non infinitésimal). Quand l'instrument est positionnée en x , toute la lumière dans l'intervalle $[x-\ell, x+\ell]$ rentre dans le détecteur, et l'expérimentateur mesure donc en faite la moyenne de l'intensité sur une intervalle autour du point x , et non la valeur exacte de l'intensité en ce point. Évidemment, plus ℓ est petit, meilleure est la précision de l'appareil. En terme mathématique, l'expérimentateur enregistre le signal $h(x)$:

$$\begin{aligned} h(x) &= \int_{x-\ell}^{x+\ell} f(s)ds \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(s)\Pi\left(\frac{x-s}{\ell}\right)ds \\ &= (f * \Pi_\ell)(x) \end{aligned}$$

Ici, $\Pi_\ell(x) = \Pi(x/\ell)$ est la *fonction de l'appareil*. Les fonctions d'appareil peuvent avoir des formes plus compliquées, comme par exemple une gaussienne. Le facteur limitant la précision du signal est le pouvoir de résolution ℓ de l'appareil qui lisse et rend flou le signal original. Par exemple, un objectif de microscope est un appareil de mesure dont le signal mesuré est l'image formée. Ernst Abbe, physicien de la compagnie Carl Zeiss dans les années 1890, a développé la théorie de la formation d'image et démontré que le pouvoir de résolution des objectifs et, au mieux, $\ell = \lambda/2NA$, où λ est la longueur d'onde utilisée et NA est l'ouverture de l'objectif (le sinus de l'angle maximum de capture de

1 Convolution et corrélation.

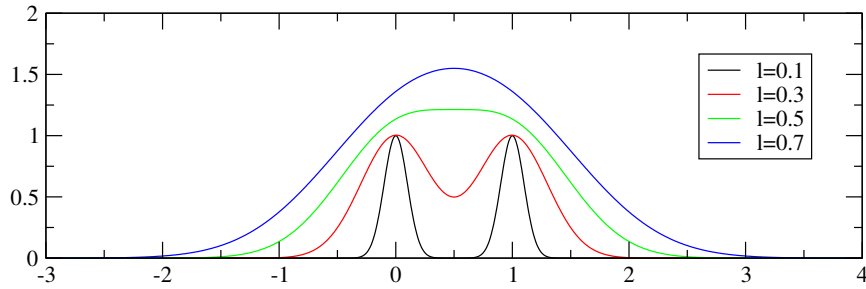


FIGURE 1.1 – La convolution du signal $\delta(x) + \delta(x-1)$ par des gaussiennes G_l de différente largeur.

la lumière). Les microscopes optiques ne peuvent donc pas “voir” les échelles plus petites que 0.2 micron.

Exercice : soit le signal $f(x) = \delta(x) + \delta(x - x_0)$, c’est à dire deux piques de Dirac distant de x_0 . Calculer et tracer le signal mesuré si la fonction de l’appareil est (i) Π_l ; (ii) $G_l = \exp(-x^2/2\ell^2)$. Traiter particulièrement les cas $x_0 \ll \ell$, $x_0 \gg \ell$ et $x_0 \approx \ell$ (voir figure 1.1). Pouvez vous déterminer, pour la Gaussienne, à partir de quelle ℓ , nous ne pouvons plus distinguer deux piques séparées ?

Les transformées de Fourier nous permettent de calculer facilement les produits de convolution :

$$\text{TF}[f * g] = \text{TF}[f] \cdot \text{TF}[g]$$

La transformée de Fourier du produit de convolution de deux fonctions est le produit (normal) de leurs transformée de Fourier. Soit $h(x) = (f * g)(x)$, alors

$$\begin{aligned} \tilde{h}(q) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-iqx} \int_{-\infty}^{+\infty} ds f(s)g(x-s) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds f(s) \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-iqx} g(x-s) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds f(s)e^{-iqs} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-iqx} g(x) \\ &= \tilde{f}(q)\tilde{g}(q) \end{aligned}$$

Calculer numériquement le produit de convolution dans l’espace direct est de l’ordre de N^2 , où N est le nombre de points d’échantillonnage des fonctions. Par contre, prendre la TFR, effectuer une multiplication entre les TF et prendre une TFR inverse ne coûtera que $N \log N$ opérations.

Un autre endroit où l’on rencontre fréquemment les convolutions est la théorie des probabilités et le théorème central limite. Soit deux variables aléatoires continues X_1 et X_2 indépendantes de densité $f(x)$ et $g(x)$. Cela veut dire que la probabilité pour qu’une réalisation de X_1 “tombe” entre x et $x + dx$ est égale à $f(x)dx$: $\Pr(x < X_1 < x + dx) = f(x)dx$. Nous nous demandons maintenant si nous pouvons déterminer la densité de

1 Convolution et corrélation.

probabilité $h(z)$ de la variable $Z = X_1 + X_2$.

$$\begin{aligned}h(z)dz &= \Pr(z < X_1 + X_2 < z + dz) \\&= \int_{x_1=-\infty}^{x_1=+\infty} \Pr(z - x_1 < X_2 < z - x_1 + dz) \Pr(x_1 < X_1 < x_1 + dx_1) \\&= dz \int_{-\infty}^{+\infty} g(z - x_1) f(x_1) dx_1\end{aligned}$$

Nous voyons donc que $h(z) = (f * g)(z)$.

Exercice 1 : Démontrer que la densité de probabilité de la *moyenne* de deux variables aléatoires est donnée par $h(z) = 2(f * g)(2z)$.

Exercice 2 : Démontrer que le produit de convolution de deux gaussiennes de largeur l et p est encore une gaussienne

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{l^2 + p^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2(l^2 + p^2)}\right)$$

pour vraiment apprécier les TF, faire le calcul d'abord dans l'espace direct, et ensuite à l'aide des TF. Une gaussienne de largeur l est la fonction

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}l} \exp(-x^2/2l^2)$$

Les résultats ci-dessus sont importants. Supposons que nous ayons deux variables aléatoires gaussiennes de largeur l . Leur moyenne est alors également une variable aléatoire gaussienne, mais de largeur $l/\sqrt{2}$. Ce résultat se généralise à N variables aléatoires : la moyenne est alors une gaussienne de largeur l/\sqrt{N} . La moyenne de N variables aléatoires est également une variable aléatoire, mais qui fluctue \sqrt{N} fois *moins* que les variables originales. C'est pour cette raison par exemple qu'un expérimentateur, pour caractériser un phénomène physique, prend plusieurs mesures et calcule leur moyenne (voir les problèmes avancés).

Exercices :

1. Calculer $\Lambda(x) = (\Pi * \Pi)(x)$, et représenter le graphiquement.
2. Démontrer que la distribution δ est l'unité pour la convolution : $f * \delta = f$
3. Que vaut $f * \delta'$?
4. Démontrer que la translation $T_a[f(x)] = f(x - a)$ est la convolution de $\delta(x - a)$ avec la fonction f .
5. Le Graal de l'expérimentateur est de déconvoluer son signal, c'est à dire connaissant le signal enregistré $h(t) = (f * A)(t)$ et la fonction d'appareil $A(t)$, déterminer $f(t)$. On pourrait se dire que pour connaître $f(t)$ il suffit de diviser la TF de h par la TF de A et de prendre la TF inverse du résultat. En pratique, ceci n'est pas une bonne solution, puisqu'on ne peut jamais enregistrer un signal pendant un temps

1 Convolution et corrélation.

infiniment long. Soit $H(t)$ le signal enregistré de $-T$ à $+T$. Mathématiquement parlant, $H(t) = h(t) \cdot \Pi(t/T)$. Montrer alors que

$$\tilde{H}(\omega) = 2T \int_{\omega-1/T}^{\omega+1/T} \tilde{f}(\nu) \tilde{A}(\nu) d\nu$$

On voit donc que l'intervalle de temps fini *mélange* les fréquences. Que trouve t'on à la limite $T \rightarrow \infty$?

1.2 Auto-corrélation.

Un outil indispensable en physique est le concept d'auto-corrélation. Cela joue un rôle important dans les processus stochastiques, la diffraction, ... Supposons que nous ayons une fonction $x(t)$. Pour plus de simplicité, nous considérons notre signal de moyenne nulle, c'est à dire

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} x(t) dt = 0$$

Nous désirons savoir combien d'information nous pouvons avoir sur $x(t + \tau)$ si nous connaissons le signal en t . Cette quantité est contenu dans la fonction d'auto-corrélation

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^*(t) x(t + \tau) dt$$

Le complexe conjugué est nécessaire si l'on veut que pour $\tau = 0$, $G(\tau)$ soit réelle. Dans beaucoup de cas, le signal est réel et le complexe conjugué dans l'espace réel n'a pas d'importance. Concrètement, nous prenons notre signal au temps t , nous le multiplions par le signal au temps $t + \tau$, nous répétons cette opération pour tous les temps t et ajoutons le résultat. Nous donnerons plus loin quelques exemples de la façon dont cette mesure est utilisée pour déterminer les caractéristiques de certains systèmes physiques. Que vaut la TF de la fonction d'auto-corrélation ?

$$\tilde{G}(\omega) = \int d\tau \int dt x^*(t) x(t + \tau) \exp(-i\omega\tau) \quad (1.1)$$

$$= \int dt x^*(t) \int d\tau x(t + \tau) \exp(-i\omega\tau) \quad (1.2)$$

$$= \int dt x^*(t) \exp(+i\omega t) \int d\tau x(\tau) \exp(-i\omega\tau) \quad (1.3)$$

$$= \tilde{x}^*(\omega) \tilde{x}(\omega) = |\tilde{x}(\omega)|^2 \quad (1.4)$$

Le résultat est d'une grande beauté : la TF de la fonction d'auto-corrélation est égale au module de la TF du signal au *carré*. Rappelons simplement que pour passer de (1.1) à (1.2), nous avons échangé l'ordre d'intégration ; pour passer de (1.2) à (1.3) nous avons effectué le changement de variable $\tau \rightarrow \tau - t$.

La fonction d'auto-corrélation reçoit des interprétations différentes dans différents contextes. Par exemple en probabilités, soit X_1 la valeur d'une fonction aléatoire au temps t , et X_2

la valeur de même fonction au temps $t + \tau$. En suivant la discussion sur les convolutions, on peut alors démontrer que l'autocorrélation $G(\tau)$ est la densité de probabilité de la variable aléatoire $X_2 - X_1$.

En physique de la matière condensée, on a coutume d'imager autrement la fonction d'auto-corrélation. Supposez que vous ayez des particules distribuées dans l'espace. Quelle est la distribution des distances entre les particules ? Prenez n'importe quelles deux particules i, j et calculez la distance r_{ij} entre les deux. Faites maintenant un histogramme de toutes les distances, et vous avez une fonction d'autocorrélation des concentrations. Nous avons vu, dans le chapitre sur les TF, que le champ $E(\mathbf{q})$ de lumière diffusé dans une direction \mathbf{q} est la TF de la fonction de transmission local. En utilisant des rayons γ ou neutron à très petite longueur d'onde, la fonction de transmission devient proportionnelle à la concentration des molécules qui diffusent ces longueurs d'onde efficacement, c'est à dire : $E(\mathbf{q}) \sim TF[c(\mathbf{x})]$. Or, les plaques photographiques ou les senseurs de nos caméras ne mesurent pas le champ, mais l'intensité, c'est à dire $I(\mathbf{q}) = E(\mathbf{q})E^*(\mathbf{q})$. Les clichés de diffusion des Rayons γ sont donc une mesure directe de la fonction d'auto-corrélation des concentrations moléculaires.

Exercice : le démontrer.

1.3 Approfondissement : Relation entre l'équation de diffusion et les convolutions.

Montrer que la solution de l'équation de la chaleur est juste un lissage (une convolution) de la condition initiale. Introduire la notion de "mollifying function" et faire le lien avec la fonction de Green.

Problèmes avancés.

1. Diffusion des corrélations.

Soit une fonction (représentant par exemple une concentration ou une probabilité, ...) obéissant à l'équation de diffusion

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Et soit la fonction d'auto-corrélation spatiale

$$G(y; t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x; t)c(x + y; t)dx$$

Démontrer que G obéit également à une équation de diffusion, mais avec un coefficient de diffusion de $2D$. [indication : il suffit d'échanger soigneusement les dérivations et les intégrations]

1 Convolution et corrélation.

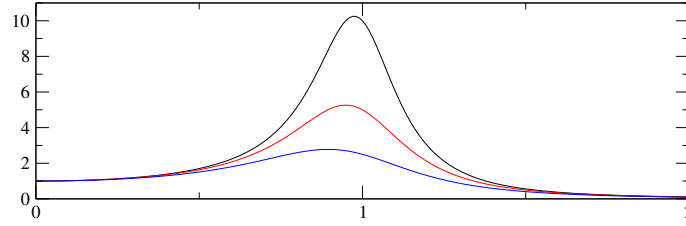


FIGURE 1.2 – $|\tilde{x}(\omega)|^2$ en fonction de ω pour $\omega_0 = 1$ et $\nu = 0.1, 0.2, 0.4$.

2. Ressort soumis au bruit thermique.

(Discuter ergodicité). Supposons une particule dans un puits harmonique, soumis au bruit thermique. Son équation du mouvement s'écrit :

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + \nu \frac{dx}{dt} + kx = f\xi(t) \quad (1.5)$$

m est la masse de la particule, ν est la force visqueuse et k la constante du ressort. Ceci constitue une équation différentielle stochastique, et le formalisme a été développé par Langevin vers 1910. La partie gauche de l'équation est celle du mouvement classique d'une particule attachée à un ressort. La partie droite tient compte des chocs aléatoires des molécules du fluide qui entourent la particule et qui font subir à cette dernière une force. La fonction ξ est une fonction aléatoire, c'est à dire qu'on ne connaît pas vraiment la valeur qu'elle peut prendre, mais seulement la *probabilité* qu'elle prenne une certaine valeur. Cela généralise le concept de variable aléatoire utilisée en calcul des probabilités. f est l'amplitude des chocs aléatoires et vaut $K_B T/a$, où a est la taille de la particule.

On suppose que la fonction ξ est de moyenne nulle, c'est à dire qu'il y a autant de chance, *en moyenne*, que les chocs mènent vers la gauche que vers la droite. De plus, on suppose que la connaissance de la valeur de $\xi(t)$ ne nous donne aucune information sur $\xi(t + \tau)$, quelque soit τ . On exprime cela par

$$G(\tau) = \int \xi(t)\xi(t + \tau) = \delta(\tau) \quad (1.6)$$

où bien sûr, δ désigne le delta de Dirac. Cela n'est pas trop dur à imaginer : comme $\xi(t + \tau)$ est complètement indépendant de $\xi(t)$, il y a autant de chance qu'il soit de signe contraire que de même signe. A la longue, l'intégral doit tendre vers 0. Par contre, $\xi^2(t) > 0$, son intégrale tend donc vers l'infini (reportez vous à notre discussion sur ce genre d'objet au chapitre précédent). En prenant la TF de l'éq.(1.6), on obtient :

$$\tilde{G}(\omega) = \tilde{\xi}(\omega)\tilde{\xi}^*(\omega) = 1$$

En notant $\omega_0^2 = k/m$ et en prenant la TF de l'équation (1.5), nous obtenons :

$$(\omega_0^2 - \omega^2 + i\nu\omega)\tilde{x}(\omega) = (f/m)\tilde{\xi}(\omega)$$

1 Convolution et corrélation.

ce qui nous donne, grâce à la relation (1.6),

$$|\tilde{x}(\omega)|^2 = \frac{(f/m)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \nu^2 \omega^2} \quad (1.7)$$

Cette fonction présente un pique à $\omega \approx \omega_0$, comme on peut le constater sur la figure 1.2.

On peut faire beaucoup de chose à partir de là. En physique, on réalise souvent¹ des ressorts de taille micrométrique pour exercer des forces sur des bactéries où des molécules biologiques. Un problème majeur est celui de calibrer le ressort, c'est à dire trouver sa constante k . L'équation (1.7) nous montre qu'il existe une façon extrêmement robuste de trouver cette constante : (i) enregistrer la position $x(t)$ d'une particule au bout de ce ressort au cours du temps (ses fluctuations thermiques); (ii) prendre la TF de $x(t)$; (iii) élever le module de la TF au carré; (iv) trouver pour quelle fréquence, cette dernière présente un maximum : nous avons la fréquence propre de l'oscillateur.

3. Somme de deux variables aléatoires et théorème "central limite" .

Une variable aléatoire X est une fonction qui produit un nombre aléatoire à chaque réalisation. On peut se donner l'image d'un boîtier électronique qui affiche un nombre à chaque fois qu'on appuie sur un bouton (une réalisation). C'est par exemple, le jeté d'un dés; ou le temps entre l'arrivé de deux particules sur notre senseur; ou la direction prise par une amibe au fond d'une boite de pétri quand on la photographie toute les 30 secondes; ou le cours de la bourse à chaque seconde; ...

On caractérise une variable aléatoire (que l'on suppose continue) par sa densité de probabilité $f(x)$: la probabilité d'observer une réalisation de X entre x et $x+dx$ est égale à $f(x)dx$. Cela veut dire concrètement que si on effectue par exemple 10^6 réalisations (mesurons l'arrivé d'un million de particule sur notre senseur), une proportion $f(x)dx$ des réalisations tomberont dans l'intervalle $[x, x + dx[$. D'après ce que nous venons de dire, $f(x) \geq 0$ et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$$

Soit maintenant deux variables aléatoires *indépendantes*² X et Y de densité de probabilité $f(x)$ et $g(y)$. Quelle est la densité de la variable $Z = X + Y$ (comme par exemple la somme de deux dés)? En probabilité, le "et" d'événements indépendants se traduit par le produit de chacune des probabilités et le "ou" par l'opération somme des probabilités. Appelons $h(z)dz$ la probabilité d'observer Z dans l'intervalle $[z, z + dz[$. La probabilité d'observer un tel événement égale la probabilité d'observer X dans $[x, x + dx[$ et Y dans $[z - x, z - (x + dx) + dz[$ pour un x quelconque. Cet événement a la probabilité

$$f(x)dx.g(z - x)(dz - dx) = f(x)g(z - x)dx dz + O(dx^2)$$

1. Par des pinces optiques, magnétique, des micropipettes, ...

2. Une réalisation de l'une n'influe pas sur le résultat de la réalisation de l'autre.

1 Convolution et corrélation.

pour une valeur x quelconque. Il faut donc ajouter la probabilité pour toutes les valeurs possible de x pour obtenir $h(z)dz$, ce qui nous donne

$$h(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(z-x)dx$$

La densité de probabilité de la somme de deux variables aléatoires égale le produit de convolution des densités de chaque variable.

La moyenne d'une variable aléatoire X de densité de probabilité $f(x)$ est notée $\langle X \rangle$ et est définie par

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$$

De façon générale, pour une fonction quelconque V , on définit

$$\langle V(X) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} V(x)f(x)dx$$

Exercices. La suite des exercices suivantes vous entraîne à manipuler les probabilités. Si vous les suivez dans l'ordre jusqu'au bout (bravo), cela vous mènera à la démonstration du théorème central limite : quelque soit la densité de probabilité de la fonction X (pourvu qu'elle ait une variance finie), la densité de probabilité de la moyenne de N de ces variables est une gaussienne, de largeur σ/\sqrt{N} , où σ^2 est la variance de X . L'ensemble de ces exercices constitue un bon cours de probabilité.

1. Démontrer que $\langle aX \rangle = a \langle X \rangle$ où a est un nombre réel. De façon générale, quelle est la densité de probabilité de $Z = aX$?
2. Démontrer que $\langle X + Y \rangle = \langle X \rangle + \langle Y \rangle$. Que vaut la moyenne de la variable $Z = (X+Y)/2$? Soit $Z_N = (1/N) \sum_{i=1}^N X_i$ où les variables aléatoires X_i sont identiques. Que vaut $\langle Z_n \rangle$?
3. La variance d'une variable est définie par $Var(X) = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$. Que vaut $Var(X+Y)$? Et $Var(Z_N)$?
4. La fonction caractéristique $\phi_X(t)$ d'une variable aléatoire X de densité $f(x)$ est définie par

$$\phi_X(t) = \langle \exp(itX) \rangle$$

Quelle est la relation entre la densité de X et la fonction $\phi_X(t)$?

5. Démontrer que $\phi_X(0) = 1$; $\phi'_X(0) = i \langle X \rangle$; $\phi''_X(0) = -\langle X^2 \rangle$; généraliser ce résultat. Vous pouvez obtenir ce résultat par le développement de Taylor de la fonction exponentielle.
6. Que valent $\phi_{aX}(t)$ et $\phi_{X+Y}(t)$? Que vaut $\phi_{Z_n}(t)$?
7. Démontrer que de façon générale, $\phi_X(t)$ a un maximum absolue à $t = 0$.
8. On suppose que $\langle X \rangle = 0$ et $Var(X) = \sigma^2$. Développer $\phi_{Z_n}(t)$ à l'ordre 2 en t autour de son maximum, et démontrer qu'elle tend vers $\exp(-\sigma^2 t^2 / 2\sqrt{N})$. [Help : $(1 + x/n)^n \rightarrow \exp(x)$]. En déduire la densité de probabilité de Z_n . Généraliser ce résultat au cas $\langle X \rangle \neq 0$.

4. Fluctuation de la courbure des polymères.

D'abord, un peu de géométrie différentielle. Soit une courbe dans le plan. Nous pouvons par exemple la décrire par l'équation $y(x)$ ou par ses coordonnées paramétrique $x(t), y(t)$. Si nous appelons l'extrémité de la courbe A , la longueur d'arc à partir de A jusqu'à un point P est définie par

$$s = \int_0^t \sqrt{\dot{x}^2(t) + \dot{y}^2(t)} dt$$

Appelons l'angle $\theta(s)$ l'angle que fait la tangente à la courbe au point P avec l'axe y . En faite, nous pouvons parfaitement définir la courbe par la donnée de la fonction $\theta(s)$. Par exemple, $\theta = \text{Cte}$ décrit une droite, $\theta = s/R$ décrit un cercle de rayon R . Cette description d'une courbe s'appelle semi-intrinsèque. La courbure de la courbe à la position s est donnée par $\kappa = (d\theta/ds)^2$. Nous pouvons également décrire une courbe dans le plan par la donnée de $\kappa(s)$ de façon totalement intrinsèque, sans référence à aucun système d'axe.

Soit maintenant un polymère (à deux dimensions) de longueur L ($L \rightarrow \infty$ à l'échelle moléculaire, comme l'ADN par exemple) baignant dans un bain à température T . L'énergie emmagasinée dans le polymère par unité de longueur dépend de la courbure de sa conformation et s'écrit

$$E = \int_0^L B\kappa^2(s) ds$$

où B est le module de rigidité du polymère. Quelle est la corrélation entre les tangentes à la courbe distantes de σ ? Plus exactement, démontrer que

$$\langle \mathbf{u}(s) \cdot \mathbf{u}(s + \sigma) \rangle = \exp(-\sigma/L_p)$$

où $\mathbf{u}(s)$ est le vecteur tangent à l'abscisse curviligne s et $L_p = B/KT$.

Ceci est loin d'être un calcul anodin : c'est comme cela que l'on mesure la rigidité des polymères biologiques comme l'actin, les microtubules ou l'ADN.

5. Correlation dans le mouvement brownien.

Calculer la fonction d'autocorrelation pour un mouvement brownien $x(t)$.