Quand Joseph Fourier (1768-1830) et Erwin Schrödinger (1887-1961) ne sont pas sur la même longueur d'onde...

Eric Deleersnijder, le 3 octobre 2002

En variables adimensionnelles, l'équation de Fourier[1],

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \tag{1}$$

et l'équation de Schrödinger

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} , \tag{2}$$

(où $i = \sqrt{-1}$) se ressemblent. On peut même les écrire sous la forme générique

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \eta\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} . \tag{3}$$

Ainsi, on obtient l'équation de Fourier en posant η=1, et celle de Schrödinger en sélectionnant η=-i.

En dépit de leur apparente similitude, les équations de Fourier et de Schrödinger appartiennent à des familles différentes. La première est une équation parabolique, tandis que la seconde est de nature hyperbolique. A ce titre, le comportement de leurs solutions n'a quasiment rien de commun. Dans un domaine infini, on peut chercher une solution du type

$$\psi(t,x) = \exp[-\varepsilon t + i(\omega t - \kappa x)] , \tag{4}$$

où ε, ω et κ désignent respectivement le coefficient d'amortissement, la fréquence angulaire et le nombre d'onde. En substituant l'expression (4) dans les équations (1) et (2), on obtient les valeurs reprises dans le tableau ci-dessous:

	Fourier	Schrödinger
coeff. d'amortissement	$\varepsilon = \kappa^2$	$\varepsilon = 0$
fréq. angulaire	$\omega = 0$	$\omega = \kappa^2$

L'équation de Schrödinger admet la propagation d'ondes planes, qui ne sont pas amorties. Par contre, l'équation de Fourier n'autorise pas l'existence d'ondes; elle amortit la solution.

Pour un incrément temporel Δt donné, il est utile d'évaluer le facteur d'amplification

$$G = \frac{\psi(t+\Delta t, x)}{\psi(t,x)} . \tag{5}$$

On voit aisément que la solution (4) peut se mettre sous la forme

$$\psi(n\Delta t) = G^n \exp(-i\kappa x) , \quad (n = 0,1,2...) , \tag{6}$$

où G vaut $\exp(-\kappa^2 \Delta t)$ pour l'équation de Fourier et $\exp(i\kappa^2 \Delta t)$ pour celle de Schrödinger. Pour ces deux équations, le facteur d'amplification satisfait à l'inégalité

$$|G| \leq 1 . \tag{7}$$

Une approximation numérique de la solution de l'équation générique (3) n'est connue qu'à des instants discrets $t_n = n\Delta t$ $(n = 0,1,2...)$ et des points discrets $x_j = j\Delta x$ $(j = 0, \pm 1, \pm 2...)$, où

[1] L'équation (1) est communément appelée "équation de la chaleur", mais, comme je suppose qu'elle a été établie par Joseph Fourier, il ne me semble pas trop inapproprié de l'appeler "équation de Fourier".

Δx désigne un incrément spatial approprié. Si on adopte la notation $\psi_{n,j} = \psi(n\Delta t, j\Delta x)$, on peut écrire deux schémas numériques de base pour résoudre l'équation générique (3), c'est-à-dire le schéma ATCE (différence avant sur le temps, différences centrées sur l'espace)

$$\frac{\psi_{n+1,j} - \psi_{n,j}}{\Delta t} = \eta \frac{\psi_{n,j+1} + \psi_{n,j-1} - 2\psi_{n,j}}{\Delta x^2} \tag{8}$$

et le schéma CTCE (différence centrée sur le temps, différences centrées sur l'espace)

$$\frac{\psi_{n+1,j} - \psi_{n-1,j}}{2\Delta t} = \eta \frac{\psi_{n,j+1} + \psi_{n,j-1} - 2\psi_{n,j}}{\Delta x^2} \ . \tag{9}$$

En s'inspirant de (6), on voit que les équations aux différences (8)-(9) admettent une solution de la forme

$$\psi_{n,j} = G^n \exp(-ij\kappa\Delta x) \ , \tag{10}$$

qui doit satisfaire l'inégalité (7), sinon elle est instable — elle explose! Le tableau ci-dessous fournit les valeurs du coefficient d'amplification et la condition de stabilité des algorithmes envisagés ici:

	Facteur d'amplification G	Stabilité
Fourier ATCE	$G = 1 - \alpha$	Stable si $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$
Schrödinger ATCE	$G = 1 + i\alpha$	Instable
Fourier CTCE	$G = -\alpha \pm \sqrt{1 + \alpha^2}$	Instable
Schrödinger CTCE	$G = i\alpha \pm \sqrt{1 - \alpha^2}$	Stable si $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$

avec

$$\alpha = \frac{2\Delta t[1 - \cos(\kappa\Delta x)]}{\Delta x^2} \ . \tag{11}$$

La méthode ATCE est conditionnellement stable pour l'équation de Fourier, et inconditionnellement instable pour celle de Schrödinger. A l'inverse, le schéma CTCE est inconditionnellement instable pour l'équation de Fourier, et conditionnellement stable pour celle de Schrödinger. Cette situation réflète évidemment la nature fondamentalement différente des deux équations — et de leurs solutions.
