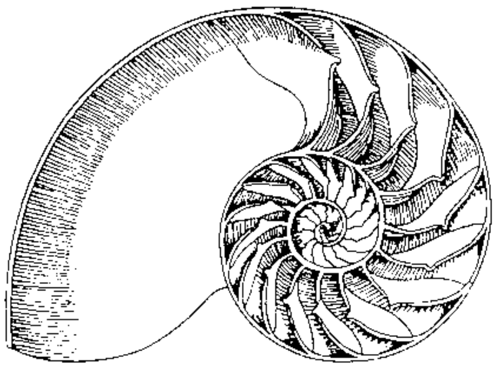
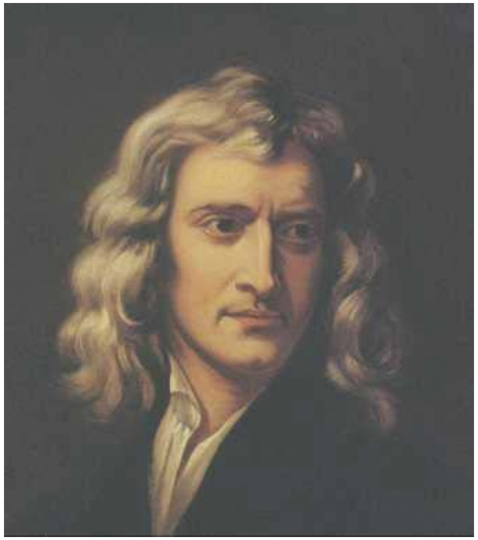
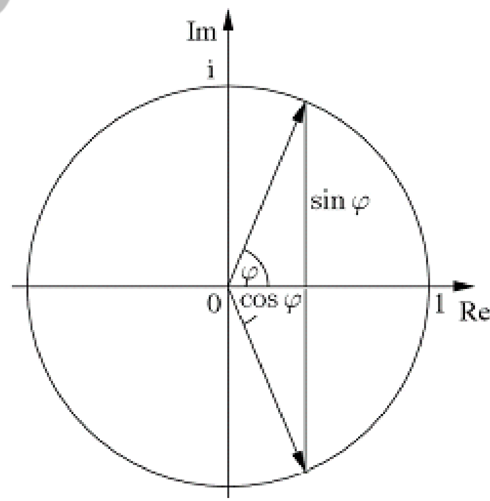


MAT 104

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

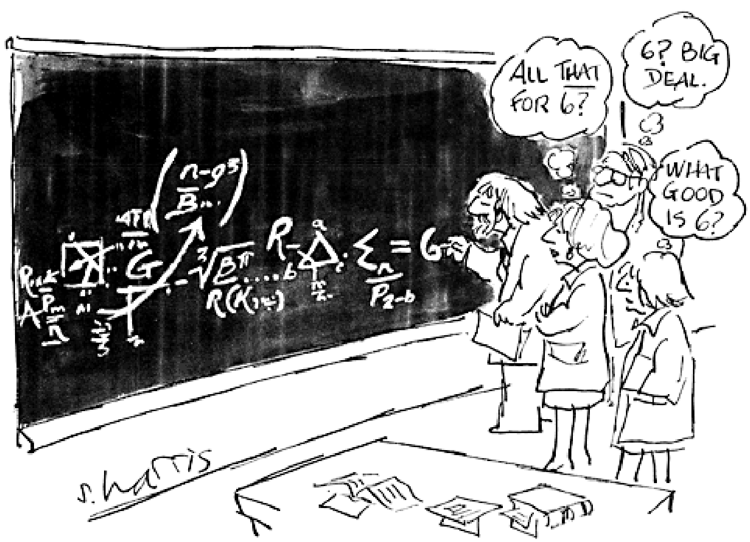
Mathématiques

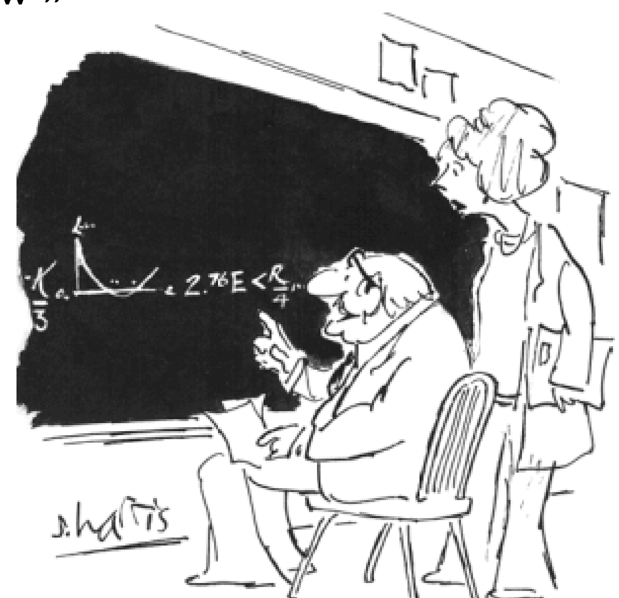




Armand Soldera
Département de Chimie
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Mathematics is only a guide to understanding, a refiner of arguments and a purifier of comprehension, and not the endpoint of explanation **P.W. Atkins, « The Second Law »**





"The beauty of this is that it is only of theoretical importance, and there is no way it can be of any practical use whatsoever."

UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE CHIMIE

✓ **Généralités**

Titre: Mathématique (chimistes)

Sigle: MAT 104

Crédits: 3

Session: Automne 2005

Mardi 8:30-10:20	D7-2013
Mardi 15:30-17:20	D7-2016
Jeudi 10:30-12:20	D7-2016

Professeur: Armand Soldera

Salle: à confirmer

Horaire de disponibilité: D2-2059 …

✓ **Place du Cours dans le programme**

Type de cours: obligatoire

Cours préalable: aucun

Cours co-requis: aucun

PLAN DE LA MATIÈRE

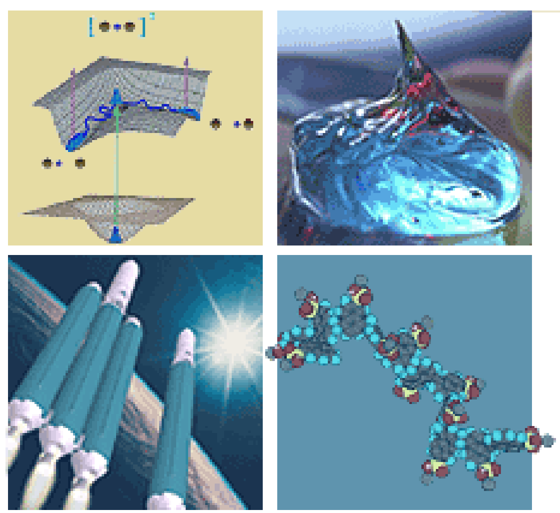
✓ Évaluation

- Moyen d'évaluation: 1 examen final + mini-tests
- Types de questions: questions de cours, problèmes.
- Pondération: ***40%** pour les **mini-tests**,*
  ***60%** pour le **final**.*
- Le français: …

✓ Bibliographie

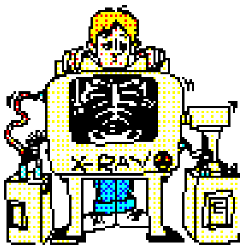
- *Manuels obligatoires*
  - Les notes de cours, disponibles également sur le web:
    http://www.callisto.si.usherb.ca:8080/asoldera/MAT104.htm
  - E. Steiner, *The Chemistry Maths Book*, OUP, 2ème éd., 2004.
- *Manuels complémentaires*
  - Barrante, *Mathematics for Chemists*, Dunod, 2000.

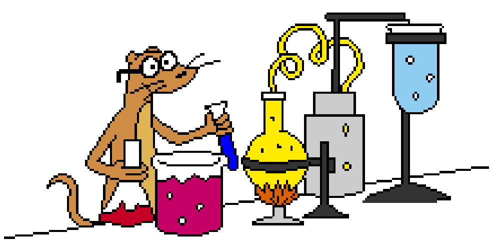
Présentation Générale



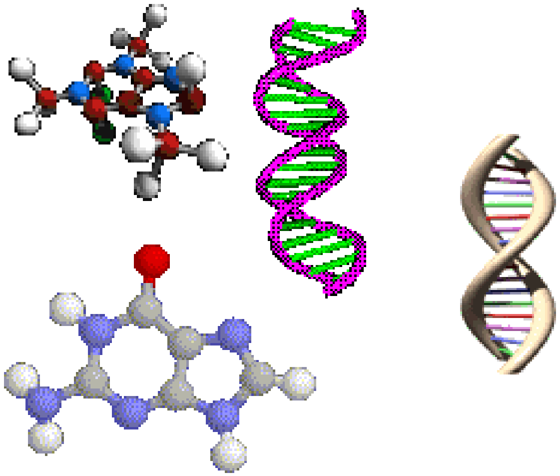
Pourquoi les mathématiques ?

Expériences

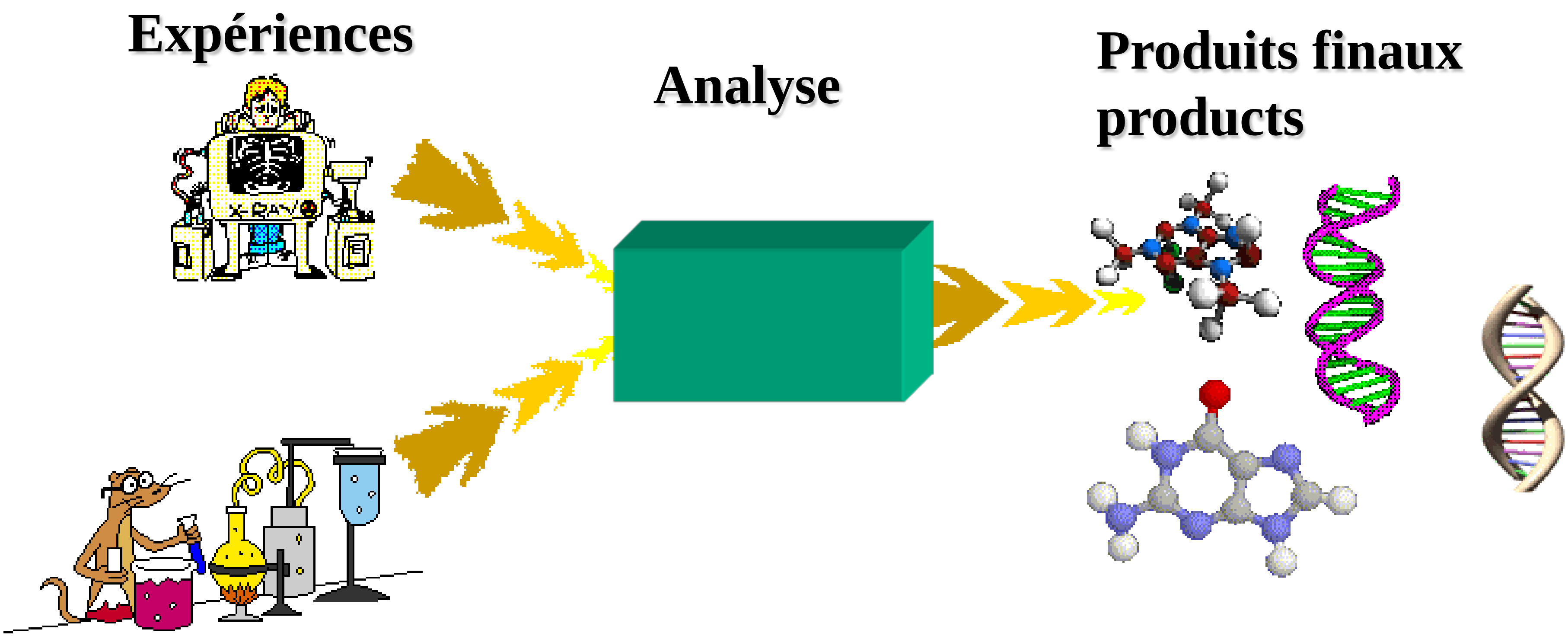




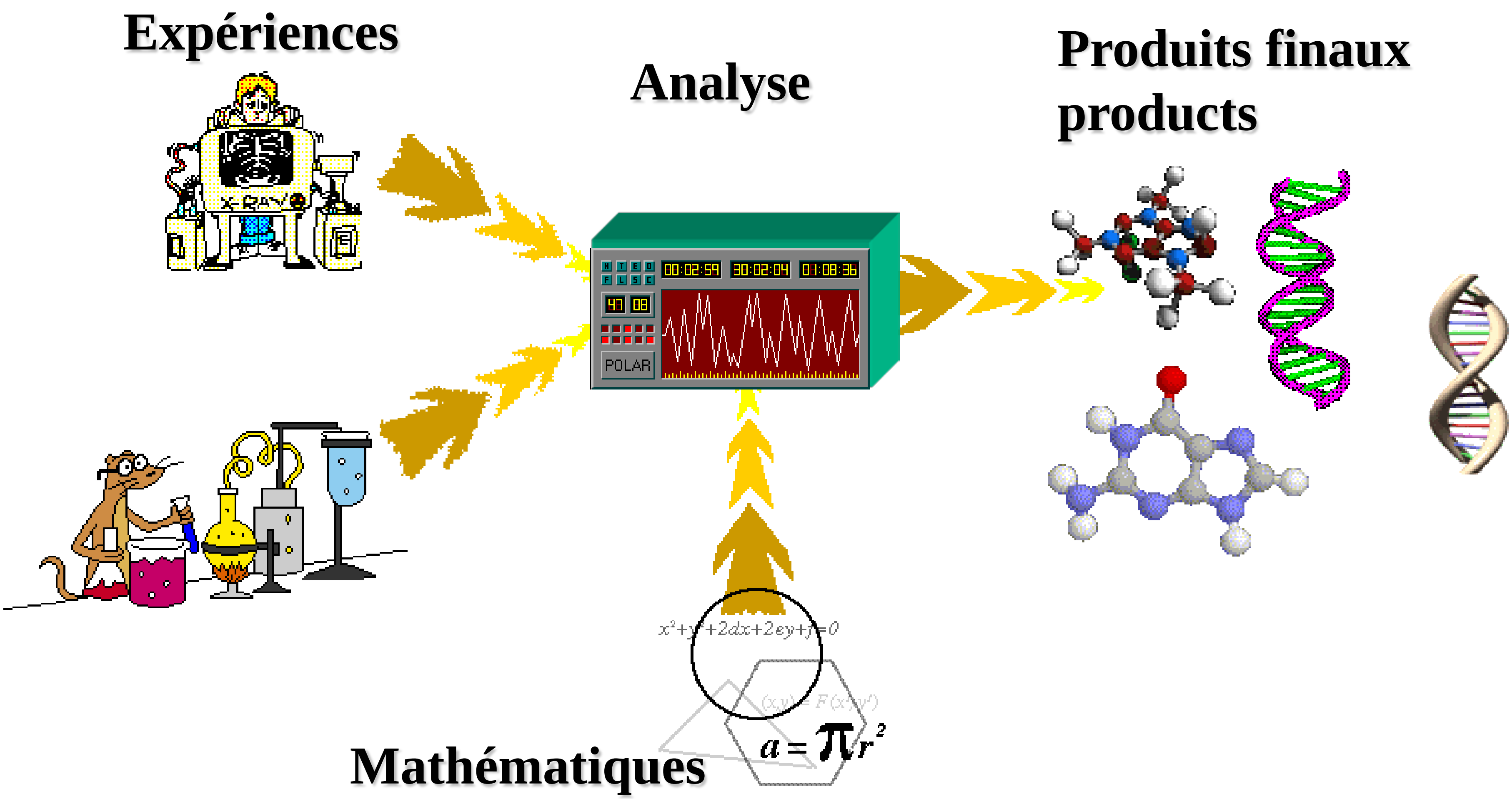
Produits finaux
products



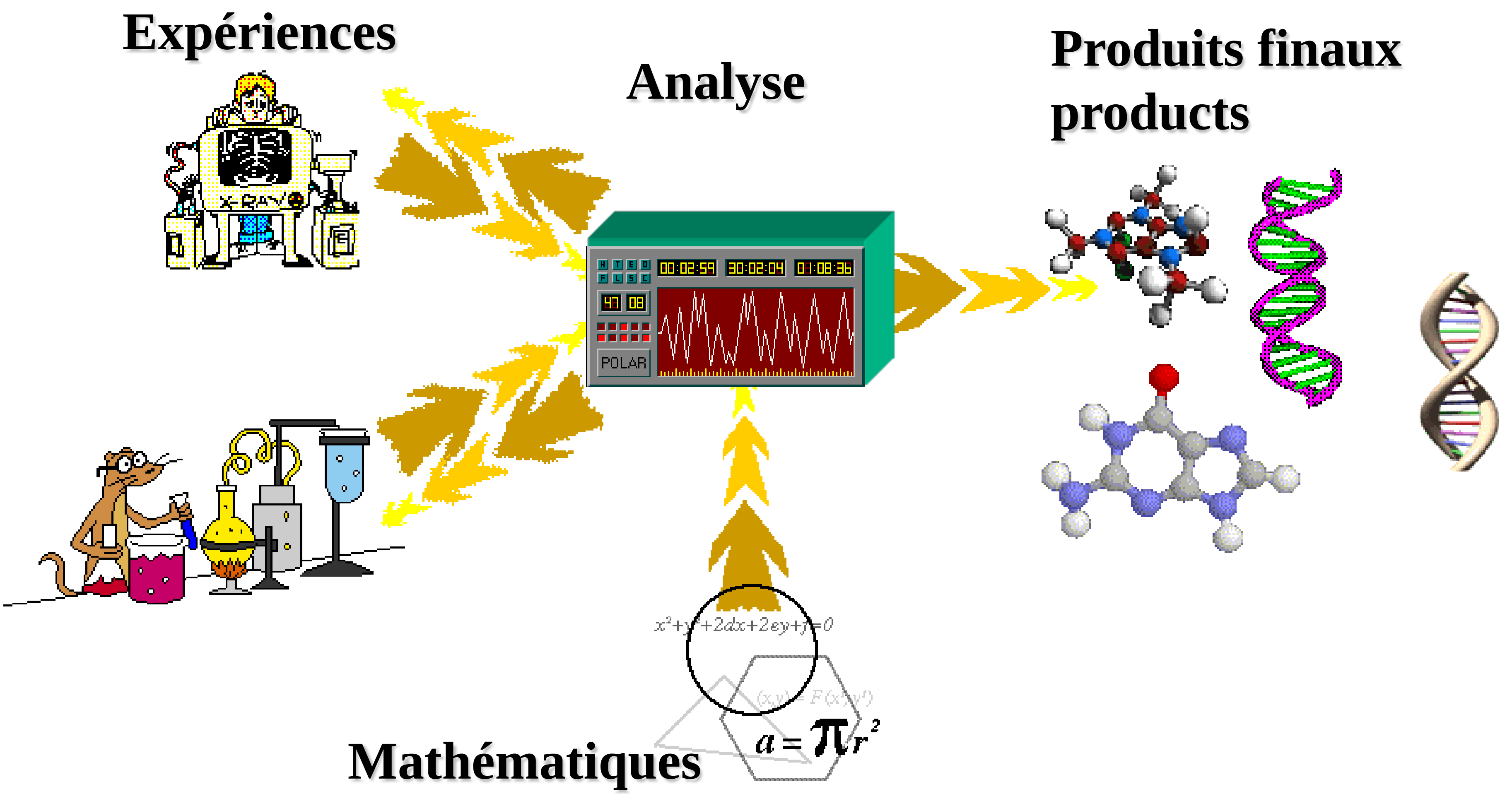
Pourquoi les mathématiques ?



Pourquoi les mathématiques ?



Pourquoi les mathématiques ?



- **Théorème de Pythagore**

  - Version française:

    Dans un triangle rectangle, la somme des carrés des mesures des côtés de l'angle droit est égale au carré de la mesure de l'hypoténuse.

  - Version mathématique

$$a^2 + b^2 = c^2$$

- **Surface d'une sphère**

  - Version française:

    La surface d'une sphère est le double du produit du rayon et de la circonférence à l'équateur.

  - Version mathématique

$$S = 4\pi r^2$$

- ...

✓ Rôle des mathématiques en sciences et chimie

- Réponse du PDG de Airbus à qui on demandait pourquoi Airbus pourrait surpasser Boeing: "Il y a plus de mathématiques dans un avion Airbus".
- Les mathématiques permettent une approche rigoureuse d'un problème.
- Elles sont utilisées pour décrire et comprendre la Nature:
  - Mesures, prédictions, simulations de propriétés physiques
  - Relations entre propriétés physiques
- Variation de propriétés physiques dans le temps, l'espace, en fonction d'autres propriétés physiques.
- Exemple: Acétaminophène
- Différents aspects
  - Synthèse,
  - Emballage
  - Goût
  - Stabilité dans l'estomac
  - Transport au petit intestin
  - Absorption dans le sang
  - Transport et stabilité dans le sang
  - Traverser la barrière sang/cerveau
  - Interactions avec récepteur
  - Réponse du système nerveux

Comment évolue le médicament dans l'estomac → évolution de la concentration *M*

- En fonction du temps
- En fonction du pH

Représentation graphique, équation pour représenter le comportement → théorie → mathématique

– Mathématiques:
  - Rôle d'infrastructure
  - Raisonnement, abstractions
  - Rigueur

✓ **Nombres**

– Concept « primitif »
– Ensembles
– Entiers
– Rationnels
– Irrationnels
– Transcendantaux
– Réels
– Complexes

Chapitre 1

Nombres, Variables et Algèbre

✓ **Principes**

Cas typique: Loi des gaz parfaits:

– Fonction

$$pV = nRT$$

$$V = f\left(p, n, T\right)$$

– Quantités:
  - Constante
  - Variables
  - Contraintes

– Unités:

Système MKSA

Toute quantité mesurée doit:
  - Indiquer son unité
  - Présenter la précision de la mesure

Propriété	**Unité**	**Abbréviation**
Longueur	mètre	m
Masse	kilogramme	kg
Temps	seconde	s
température	kelvin	K
quantité	mole	mol
courant	ampère	A
luminosité	candela	cd

✓ Nombres

- Concept « primitif »
- Ensembles
  - Entiers: naturels $\mathbb{N}$ et relatifs $\mathbb{Z}$
  - Rationnels $\mathbb{Q}$ $1/3 = 0,333\ldots = 0,\overline{3}$
  - Irrationnels $\sqrt{2}$
  - Transcendants π
  - Complexes $\mathbb{C}$ i (j)

  Réels $\mathbb{R}$ $\overline{\mathbb{R}} = \mathbb{R} + \{-\infty, +\infty\}$

  $$\mathbb{N} \subset \mathbb{Z} \subset D \subset \mathbb{Q} \subset \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$$

- Bases
  - Décimale
  - Binaire
  - Hexadécimale
- Algèbre des nombres réels
  - Opérations mathématiques: + - x /
  - Processus limite: $a \to 0; \quad \frac{1}{a} \to \infty$
  - Variables

  exposant

  $$a^m$$

  base

✓ Notion de groupe

- Un ensemble G muni d'une loi Θ est un groupe si :
  - Θ est une loi de composition interne sur G
  - La loi Θ est associative .
  - Θ admet un élément neutre dans G
  - Tout élément x de G admet un symétrique x' dans G
- Dans le cas ou Θ est commutative, on dit que (G, Θ) est un groupe commutatif.
- Exemple : (, +) est un groupe commutatif. (, x) est un groupe.

✓ Anneau

- Un ensemble A non vide, muni de deux lois de composition interne notées respectivement + et * est appelé un anneau si:
  - L'ensemble A muni de la première loi + est un groupe commutatif.
  - La seconde loi * , est associative et distributive par rapport à la première loi.
- Notation (A , + , *) .

- Si la seconde loi * est commutative alors le anneau est dit commutatif.
- Si l'anneau admet pour la seconde loi , un élément neutre, l'anneau est dit unitaire.

✓ Corps …

✓ Algèbre des nombres réels

– Valeur absolue, ou module

$$|a| = \sqrt{a^2}$$

$$|a| = +a \quad \text{si} \quad a > 0$$

$$|a| = -a \quad \text{si} \quad a < 0$$

– Loi d'indexation

$$a^m a^n = a^{m+n} \qquad \left(a^m\right)^n = a^{mn}$$

$$a^{1/n} = \sqrt[n]{a}$$

$$a^{-n} = \frac{1}{a^n}$$

$$a^0 = 1$$

Chapitre 2

Fonctions Algébriques

Descartes

✓ Principes

- Loi des gaz parfaits:

$$V\left(n,T,p\right)=\frac{nRT}{p}$$

- Fonction

$$y=ax^2+bx+c$$

$$f\left(x\right)=ax^2+bx+c \qquad f\left(x+d\right)=g\left(x\right)$$

✓ Factorisation et simplification d'une fonction

- Factorisation

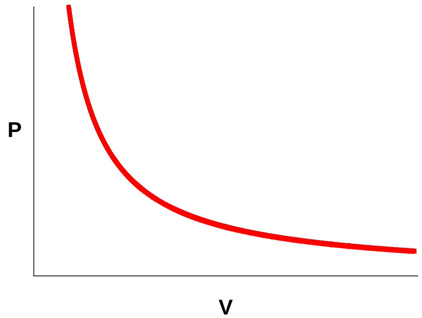
$$2ax^2+4bxy=2x(ax+2by)$$

- Identités remarquables:

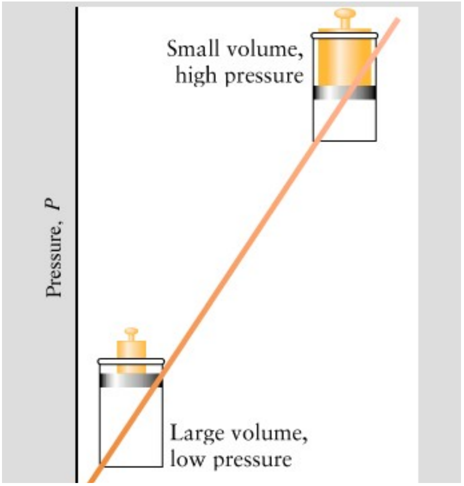
$$a^2-b^2=\left(a+b\right)\left(a-b\right)$$

$$\left(a\pm b\right)^2=a^2\pm 2ab+b^2$$

- **Représentation graphique d'une fonction: Coordonnées cartésiennes**
  - 2 dim: (x,y)
    - Loi des gaz parfaits: $PV = nRT$

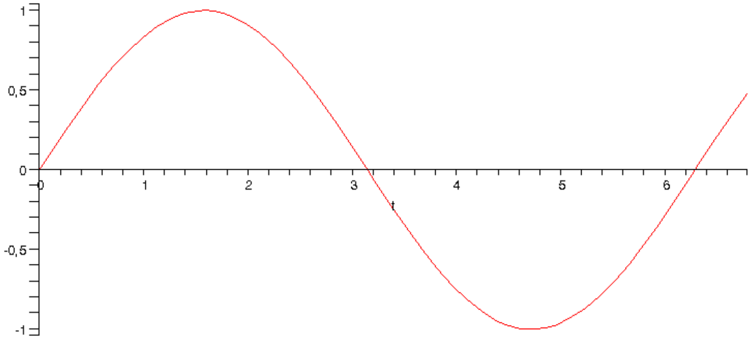


$$V \propto \frac{1}{P}$$



- Onde

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}$$

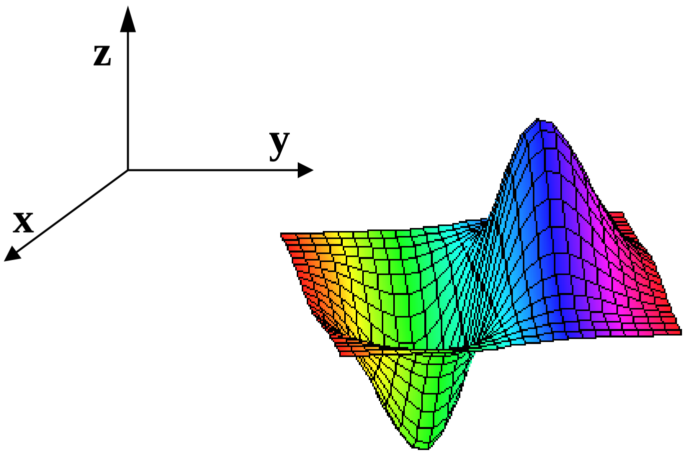


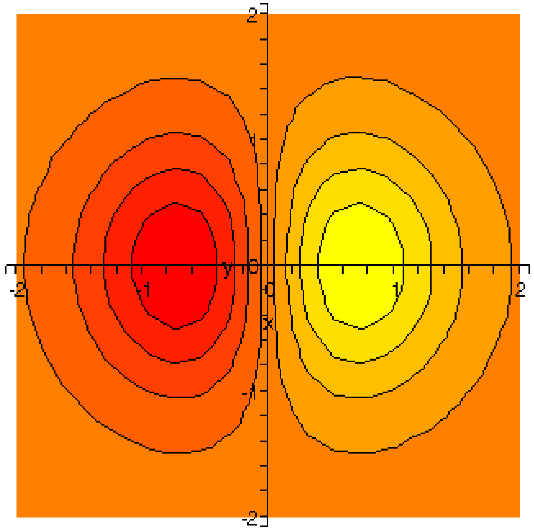
- Repère orthonormé: $\vec{i} \wedge \vec{j} = \vec{k} = \vec{i} \times \vec{j}$

Vecteurs unitaires

$$\left\|\vec{i}\right\| = \left\|\vec{j}\right\| = \left\|\vec{k}\right\| = 1$$

- 3 dim (x,y,z)
  - Transfert de représentation: 2D → 3D
  - Isocontour: géographie





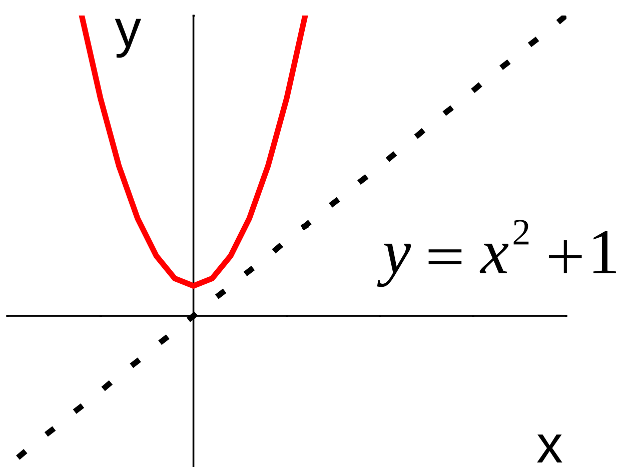
- Nous vivons dans un monde à 3 dim ou 4 dim (11 dim peut-être)
  - Coordonnées polaires
  - Coordonnées sphériques

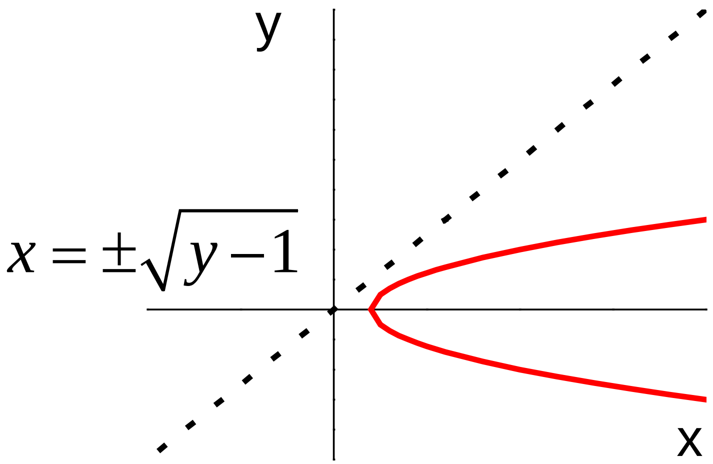
$$U \propto \frac{1}{r^2}$$

✓ Fonctions inverses

– si $y = f(x)$ alors $x = f^{-1}(x)$

– La recherche de la fonction inverse n'est pas toujours aisée





– Équation de van der Waals

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT \Longrightarrow$$

Équation du 3ème degré en V

✓ Polynôme

– $$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots + a_n x^n$$

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

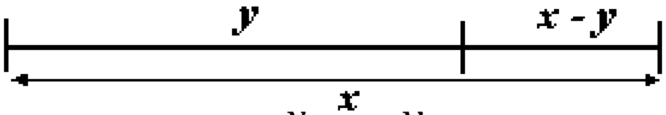
– Degré n=1, fonction linéaire: droite

$$f(x) = ax + b$$

a: pente

b: ordonnée à l'origine

x_0: racine de l'équation $f(x) = 0$



$$\varphi = \frac{x}{y} = \frac{y}{x-y}$$

– Degré n=2, fonction quadratique

Équation d'une parabole

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

$f(x) = 0$ 2 racines possibles: 2 réelles, 1 racine double, ou 2 complexes

– Degré n=3, fonction cubique

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

$f(x) = 0$ 3 racines possibles: 3 réelles, 1 triple, ou 2 complexes + 1 réelle

– Polynôme d'ordre général:

$$\begin{aligned} f(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots + a_n x^n \\ &= a_n (x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n) \\ &= a_n \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) \end{aligned}$$

$f(x) = 0$ n racines: réelles, complexes, ou multiple

remarque: si $n = 2p + 1 \quad (p \in \mathbb{N})$ il va exister au moins une racine réelle
(le graphe traverse l'axe des *x* au moins 1 fois)

Exemple: équation de van der Waals

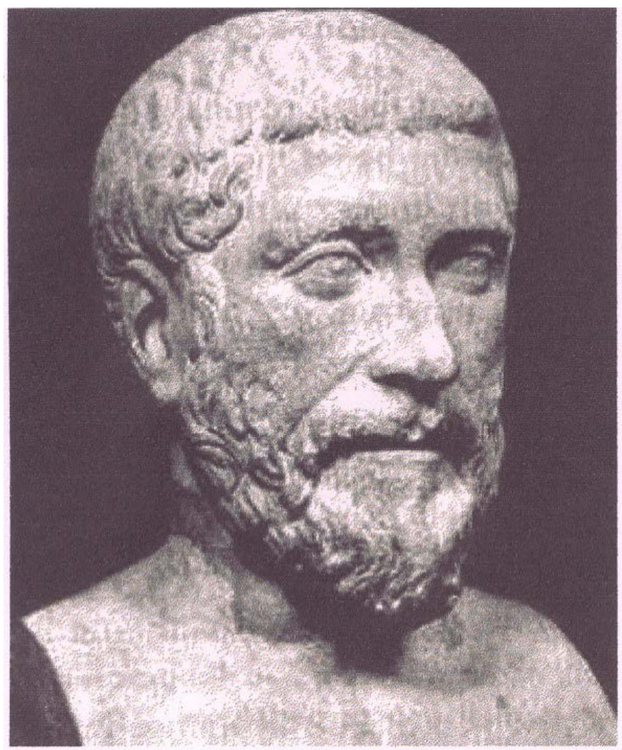
– Fonction algébrique de *x*:

$$P(x) y^n + Q(x) y^{n-1} + \ldots + U(x) y + V(x) = 0$$

– Fonction transcendante: fonction non algébrique: exponentielle, fonction trigonométrique

Chapitre 3

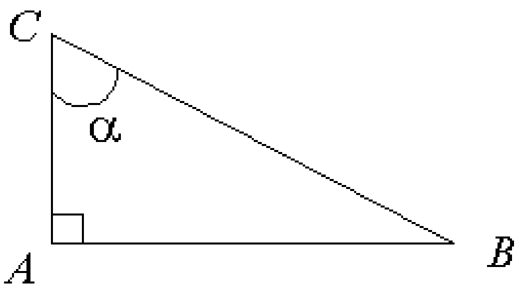
Fonctions Transcendantes

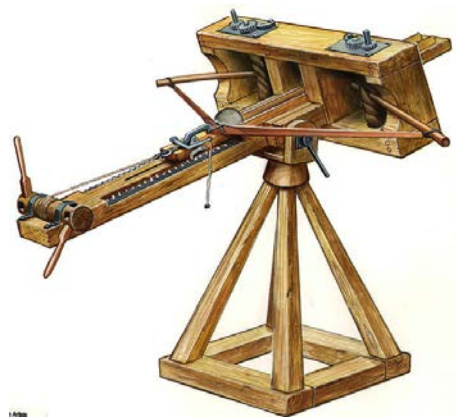


Pythagore

✓ Fonctions trigonométriques

- SOHCAHTOA

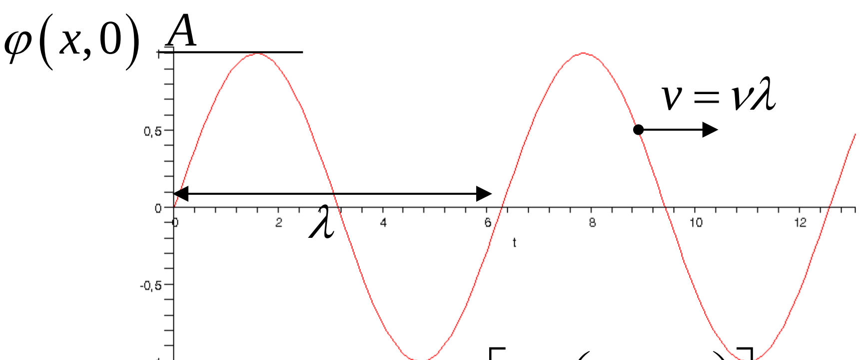


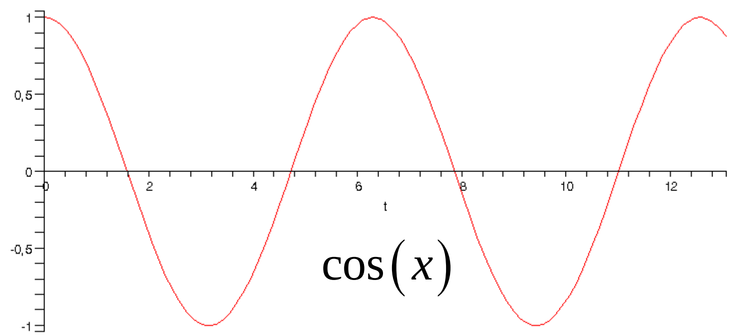


- Théorème de Pythagore

$$\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$$

- Fonctions périodiques $\quad f(x \pm a) = f(x) \quad a$ = période

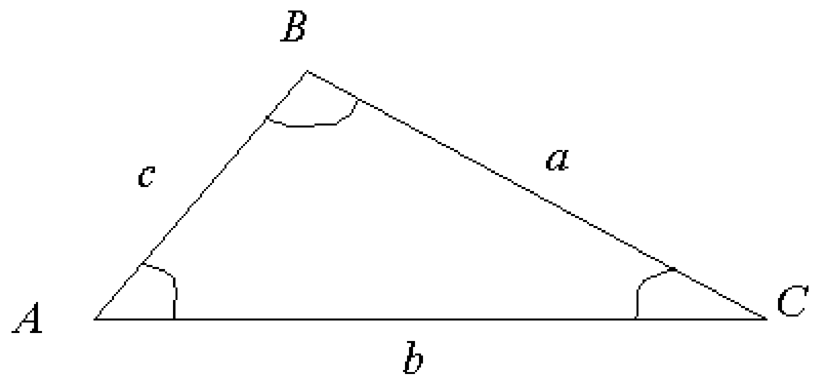




$$\varphi(x,t) = A\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)\right]$$

λ :longueur d'onde, ν :fréquence

✓ Relations de trigonométrie



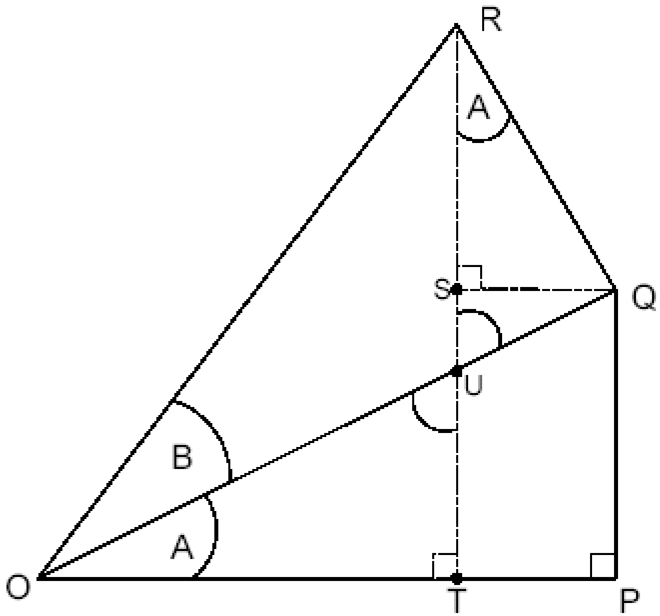
– Règle des sinus $$\frac{\sin A}{a} = \frac{\sin B}{b} = \frac{\sin C}{c}$$

– Règle des cosinus: $$a^2 = b^2 + c^2 - 2bc\cos A$$

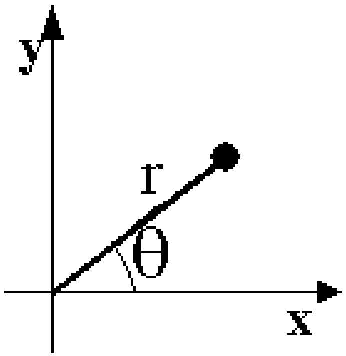
– Identités

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y$$

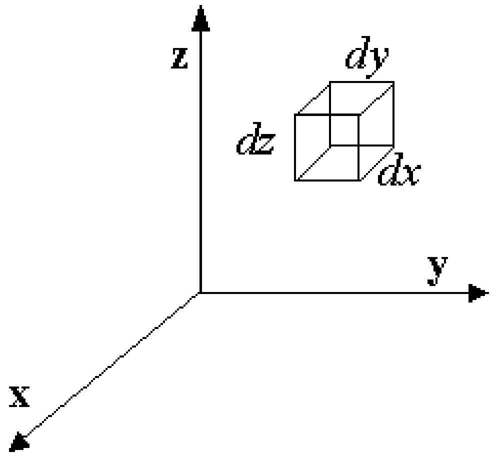
$$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y$$

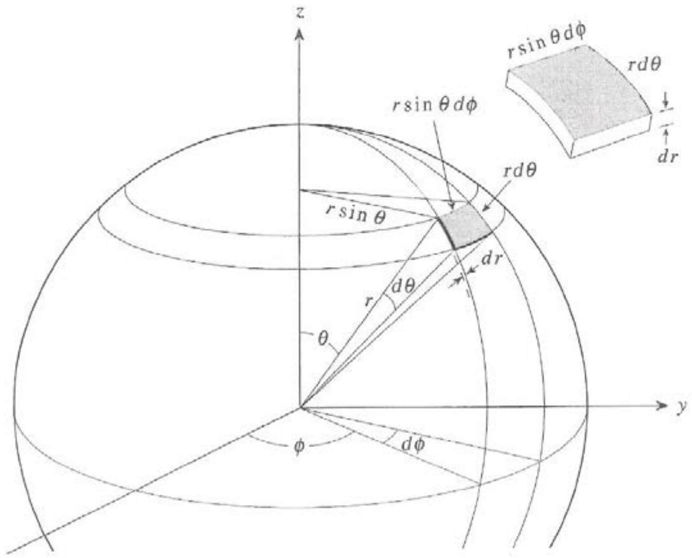


- ✓ **Coordonnées polaires**
  - – Nombreux problèmes de science non solvables en coordonnées rectangulaires
  - – Coordonnées polaires ou curviligne: 2D



- ✓ **Coordonnées sphériques**





✓ Fonctions trigonométriques inverses

$$\arcsin x = \sin^{-1} x$$

$$\arccos x = \cos^{-1} x$$

$$\arctan x = \tan^{-1} x$$

Comme:

$$\sin x = \sin\left(x \pm 2n\pi\right) \quad n \in \mathbb{N}$$

On va parler de valeur principale (exemple: résultat d'une calculatrice):

$$\arcsin x = \sin^{-1} x = y \qquad y \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$$

$$\arccos x = \cos^{-1} x = y \qquad y \in \left[0, \pi\right]$$

$$\arctan x = \tan^{-1} x = y \qquad y \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$$

✓ La fonction exponentielle

- Définition: $f(x) = a^x$

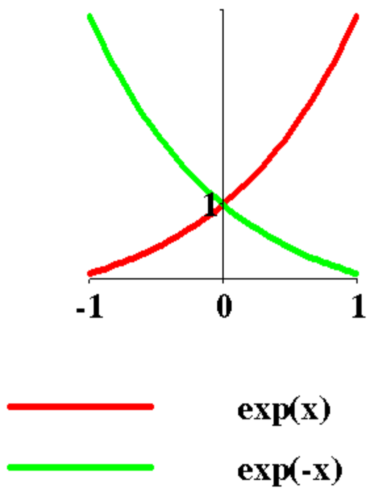
  a: base

  x: exposant (an anglais *exponent*)

- La plus connue: $10^n \quad n \in \mathbb{N}$

- La fonction exponentielle (e de Euler): $\exp(x) = e^x$

$$\exp(x) = e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$



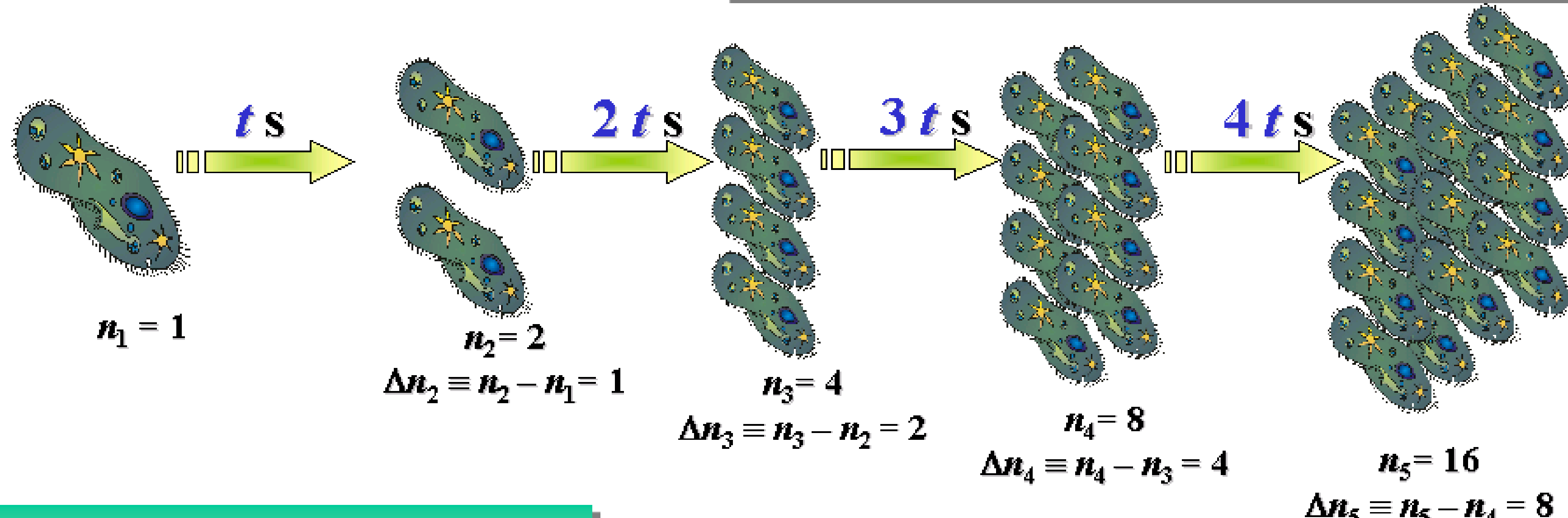
- La pente de exp(x) est exp(x)

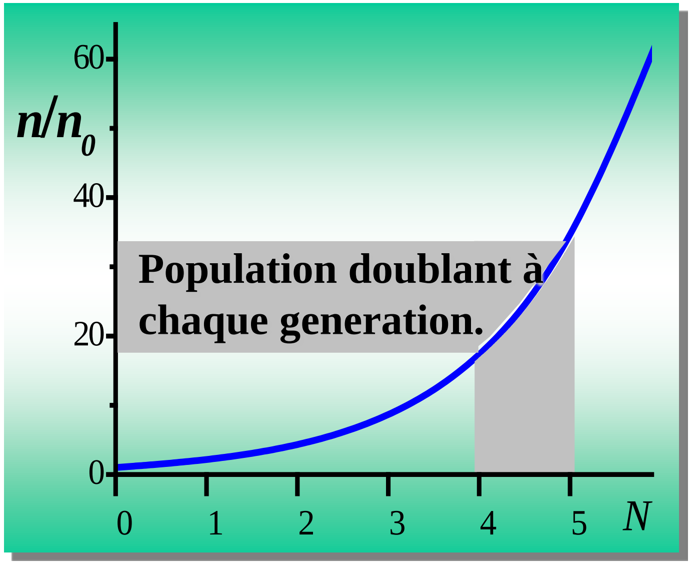
- Fonction exponentielle très utilisée (statistique, population …): fonction gaussienne

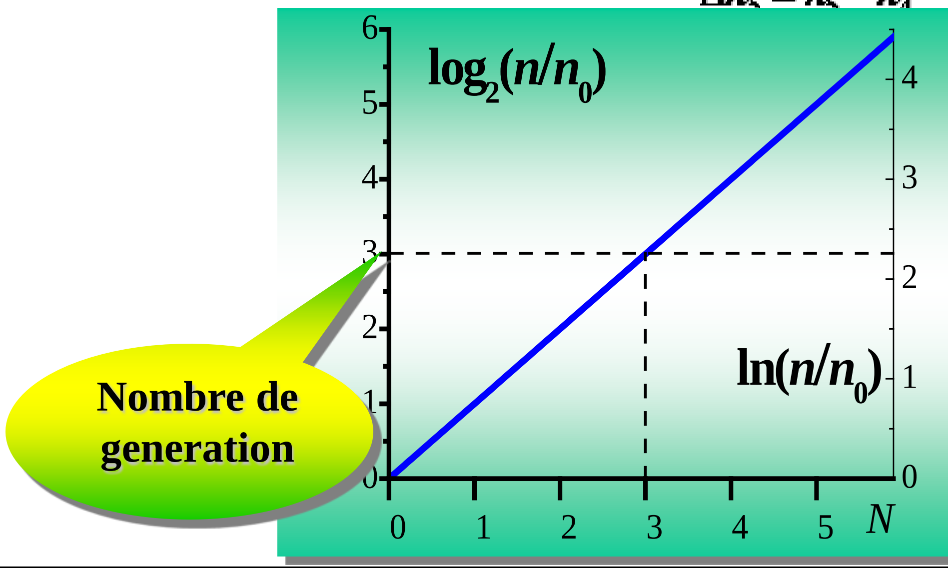
$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$$

Exemple d'utilisation de l'exponentielle

$$\Delta n_k = A \times n_{k-1} \quad \Rightarrow \quad n = n_0 \exp(t/t_0)$$





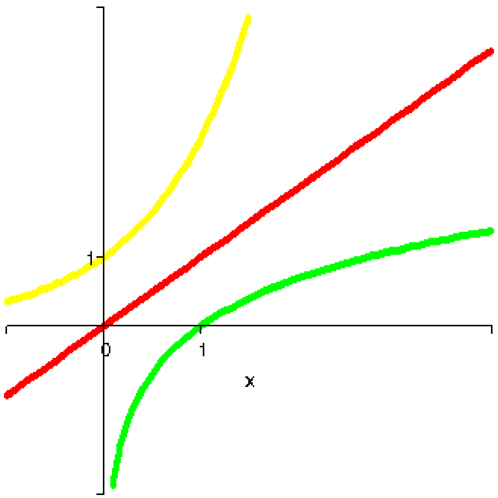


✓ La fonction logarithme

– Définition: $$\text{si } y = a^x \quad \text{alors } x = \log_a y$$

– Logarithme décimal: $$y = 10^x, \; x = \log_{10} y = \log y$$

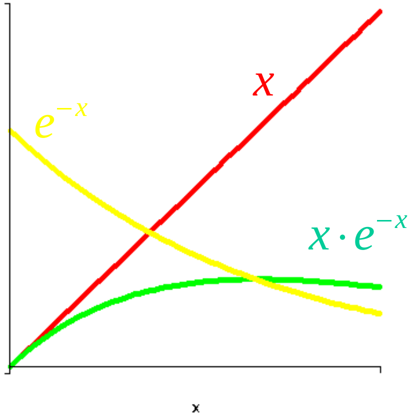
– Logarithme naturel ou népérien: $$y = e^x, \; x = \log_e y = \ln y$$



– Propriétés:
$$\ln xy = \ln x + \ln y$$
$$\ln \frac{x}{y} = \ln x - \ln y$$
$$\ln x^n = n \ln x$$

– Conversion:
$$\ln x = \ln 10 \times \log_{10} x \approx 2{,}303 \log x$$

– Exemple:
$$\mathrm{pH} = -\log_{10}\left[\mathrm{H}^+\right]$$



Logarithme en tant que méthode d'échelle

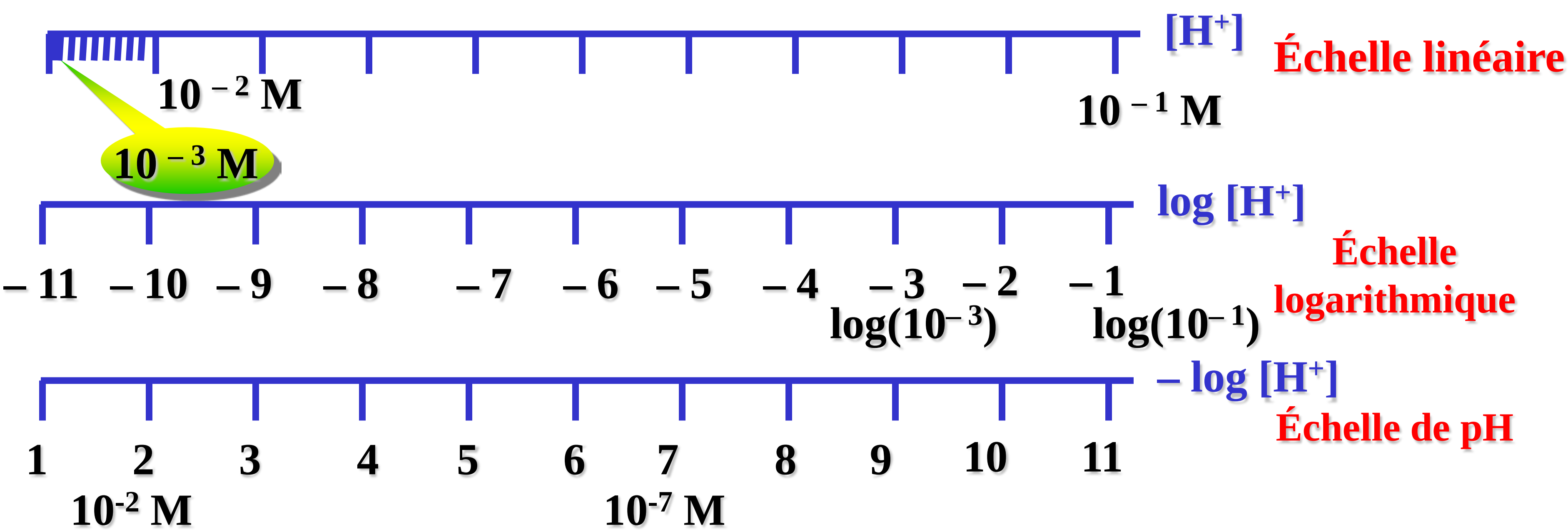
10^{-3} M + 10^{-5} M = 1.01 10^{-3} M ≈ 10^{-3} M

Augmentation va avoir peu d'impact sur l'estomac des mammifères.

10^{-7} M + 10^{-5} M = 1.01 10^{-5} M ≈ 10^{-5} M

Augmentation va avoir un effet dévastateur sur une cellule.

Changement *relatifs* égaux amènent à des effets *similaires* !



✓ Fonctions hyperboliques

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \qquad \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$$

– Équation d'une hyperbole:

$$x^2 - y^2 = a^2$$

– Les fonctions hyperboles inverses

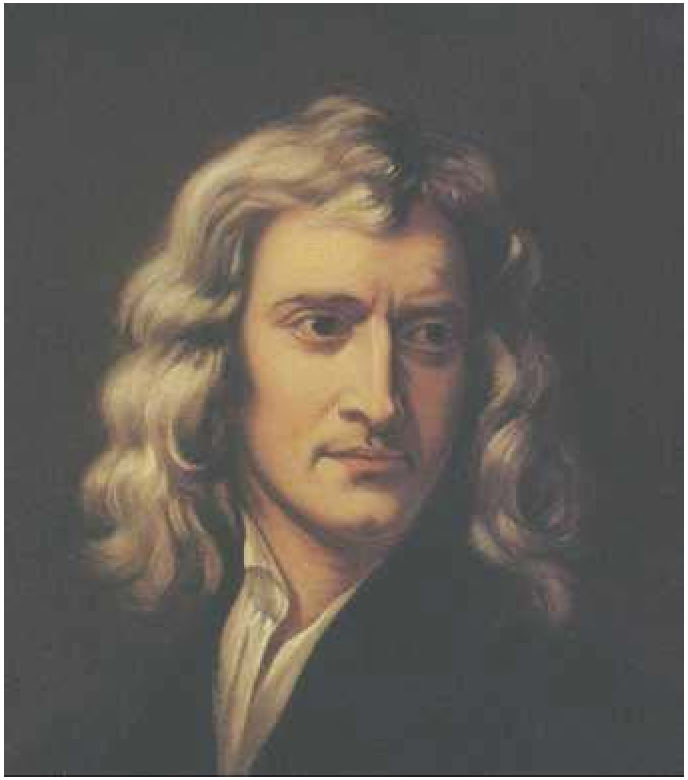
$$\cosh^{-1} x = \ln\left[x \pm \sqrt{x^2 - 1}\right]$$

$$\sinh^{-1} x = \ln\left[x + \sqrt{x^2 + 1}\right]$$

$$\tanh^{-1} x = \frac{1}{2}\ln\left[\frac{1+x}{1-x}\right]$$

Chapitre 4

Différentielle



Newton

Leibniz

✓ Principes du Calcul Différentiel

– Retour à l'équation d'état des gaz parfaits

$$pV = nRT$$

4 variables: chacune des variables peut être exprimée en fonction des 3 autres

$$V = \frac{nRT}{p}$$

– Si on considère que l'on travaille à nombre de moles (*n*) constant, et pression (*p*) constante (on applique des contraintes à notre système)

Que se passe-t-il au niveau du volume si on opère sur le système une variation de température, ΔT ?

$$\Delta T = T_f - T_i$$

$$V = \frac{nRT}{p} \quad \rightarrow \quad V + \Delta V = \frac{nR\left(T + \Delta T\right)}{p}$$

$$\Delta V = \frac{nR\Delta T}{p}$$

$$\frac{\Delta V}{\Delta T} = \frac{nR}{p}$$

$$\Delta T = p_f - p_i$$

$$V + \Delta V = \frac{nRT}{\left(p + \Delta p\right)}$$

$$\Delta V = -nRT\frac{\Delta p}{p^2}$$

✓ Processus de différentiation

– Soit une fonction g continue en x.

x varie entre i et f (f-i) est appelé l'incrément, ou la variation

$$\Delta x = f - i$$

Quand les 2 points se rapprochent (quand l'incrément devient petit), on utilise la notation:

$$\delta x = f - i$$

Soient:

$$y_f = g(f) \qquad y_i = g(i)$$

$$\delta y = y_f - y_i = g(f) - g(i)$$

La pente ou gradient: variation moyenne de y par rapport à x entre i et f:

$$\frac{\delta y}{\delta x} = \frac{y_f - y_i}{f - i}$$

Autre manière de l'écrire:

$$\frac{\delta y}{\delta x} = \frac{g(x + \delta x) - g(x)}{\delta x}$$

Gradient en i (quand f s'approche de i):

$$\text{gradient en } i = \lim_{f \to i}\left(\frac{\delta y}{\delta x}\right)$$

$$\text{gradient en } x = \lim_{\delta x \to 0}\left(\frac{\delta y}{\delta x}\right)$$

Ce processus avec lequel on considère la limite: différentielle

$$\boxed{\frac{dy}{dx} = \lim_{\delta x \to 0}\left(\frac{\delta y}{\delta x}\right) = \lim_{\delta x \to 0}\left(\frac{g(x+\delta x) - g(x)}{\delta x}\right)}$$

– Dérivée:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx}$$

Cas particulier:
dérivée par rapport au temps $v(t) = \dfrac{dx(t)}{dt} = \dot{x}(t)$

– Introduction aux opérateurs:

Opérateur **dérivée**

$$\hat{D} = \frac{d}{dx} \Longrightarrow \hat{D}f = \frac{df}{dx}$$

- **Exemple**

$$f(x) = x^2 \quad \rightarrow \quad f'(x) =$$

$$f(x) = x^3 \quad \rightarrow \quad f'(x) =$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \quad \rightarrow \quad f'(x) =$$

$$f(x) = \exp(x) \quad \rightarrow \quad f'(x) =$$

- **Continuité**
  - Si $f(x_1 + \delta x)$ *et* $f(x_1 - \delta x)$ donnent la même valeur *f(x₁)* quand $\delta x \rightarrow 0$, la fonction est dite continue en x_1:

$$\lim_{x \to x_1} f(x) = f(x_1)$$

  - Plusieurs méthodes pour enlever une discontinuité: Cauchy, …

✓ Règle de différentiation

– Dérivées des fonctions élémentaires:

Fonction	Dérivée
c	
x^n	
$\sin x$	
$\cos x$	
e^x	
$\cosh x$	
$\sinh x$	
$\ln x$	

Type	Dérivée
Multiple	$(au)' = au'$
Somme	$(u+v)' = u' + v'$
Produit	$(uv)' = u'v + uv'$
Quotient	$\left(\dfrac{u}{v}\right)' = \dfrac{u'v - uv'}{v^2}$
Chaîne	$(f(u))' = u'f'$
Inverse	$\dfrac{dx}{dy} = \dfrac{1}{\dfrac{dy}{dx}}$ ou $\dfrac{dx}{dy} \times \dfrac{dy}{dx} = 1$

✓ Dérivées successives

$$\frac{dy}{dx} = f'(x) = \hat{D}y \qquad \frac{d^2y}{dx^2} = f''(x) = \hat{D}^2 y \qquad \frac{d^3y}{dx^3} = f'''(x) = f^{(3)}(x) = \hat{D}^3 y$$

$$\frac{d^ny}{dx^n} = f^{(n)}(x) = \hat{D}^n y$$

✓ Règle de chaîne (fonction d'une fonction)

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{du}\frac{du}{dx}$$

$$f(x) = \sin ax$$

$$f(x) = x \sin ax$$

✓ Fonction inverse

Utilisation: quand il est plus facile de dériver la fonction que son inverse

$$\frac{dx}{dy} = \frac{1}{\frac{dy}{dx}}$$

Fonction	Dérivée
u^a	$au^{a-1}\frac{du}{dx}$
$\sin u$	$\cos u \frac{du}{dx}$
$\cos u$	$-\sin u \frac{du}{dx}$
$\tan u$	$\sec^2 u \frac{du}{dx}$
e^a	$e^a \frac{du}{dx}$
$\ln u$	$\frac{1}{u}\frac{du}{dx}$

✓ Fonctions implicites

$$f(x,y)=0$$

Si y est défini en fonction de x

$$\frac{d}{dx}f(x,y)=0$$

$$f(x,y)=y^5-2y-x=0$$

✓ Différentiation logarithmique

Il est parfois plus facile de dériver le logarithme népérien que la fonction même

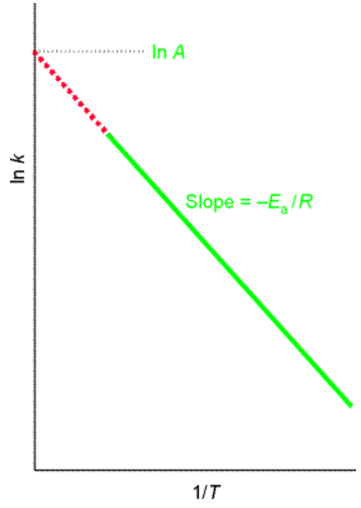
$$y=u^a v^b w^c \ldots$$

$$\ln y = a\ln u + b\ln v + c\ln w^c + \ldots$$

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dx}=\frac{a}{u}\frac{du}{dx}+\frac{b}{v}\frac{dv}{dx}+\ldots$$

Équation d'Arrhénius

$$k = A\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$



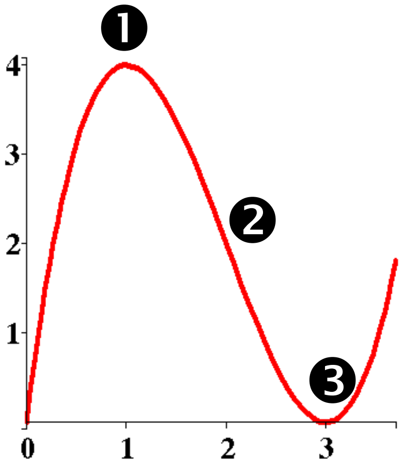
✓ Points stationnaires

- Point stationnaire (extremum): $\dfrac{dy}{dx} = 0$
- Extremums: Maximum: $\dfrac{d^2y}{dx^2} < 0$

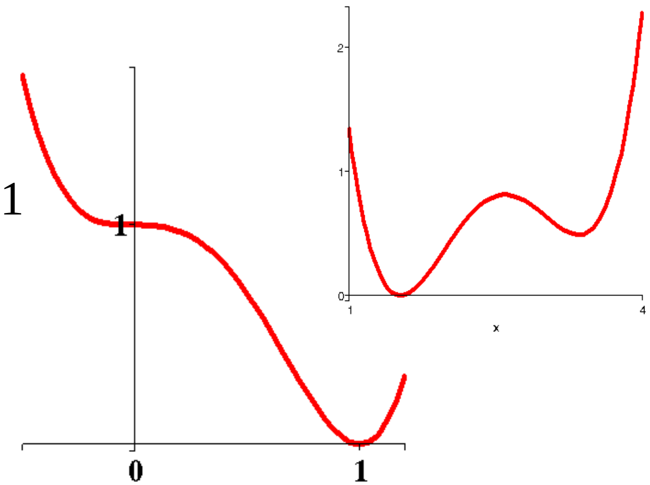
Minimum: $\dfrac{d^2y}{dx^2} > 0$

- Point d'inflexion: $\dfrac{d^2y}{dx^2} = 0$

$$y = x(x-3)^2$$

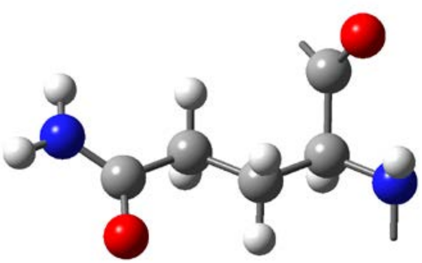


$$y = 3x^4 - 4x^3 + 1$$

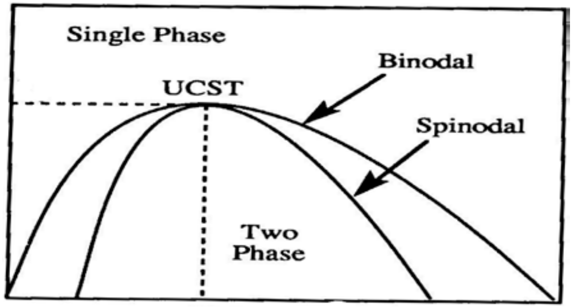


- Cas pratique:

Conformation d'énergie minimale



Mélanges



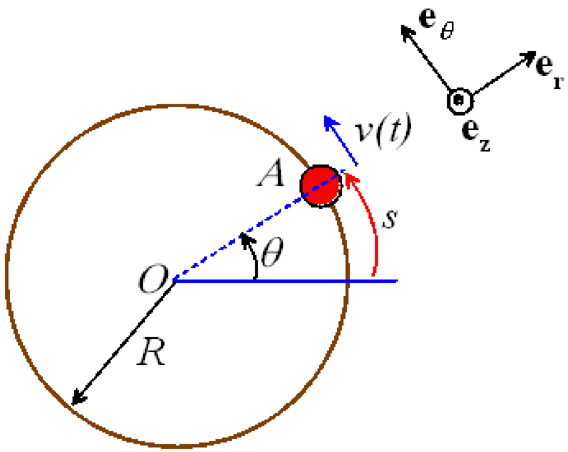
✓ Mouvements linéaires et angulaires

– Mouvement linéaire:

$$\frac{\delta x}{\delta t}: \text{ vitesse moyenne sur un intervalle de temps } \delta t$$

Vitesse linéaire: $v = \dfrac{dx}{dt} = \dot{x}$

Accélération: $\gamma = \dfrac{dv}{dt} = \dot{v} = \dfrac{d^2 x}{dt^2} = \ddot{x}$



– Mouvement angulaire:

vitesse angulaire

$$\omega = \lim_{\delta t \to 0} \frac{\delta \theta}{\delta t} = \frac{d\theta}{dt} = \dot{\theta}$$

$$s = r\theta \qquad \dot{s} = r\dot{\theta}$$

$$v = r\omega$$

✓ Différentielle

$$dy = f'(x)\,dx$$

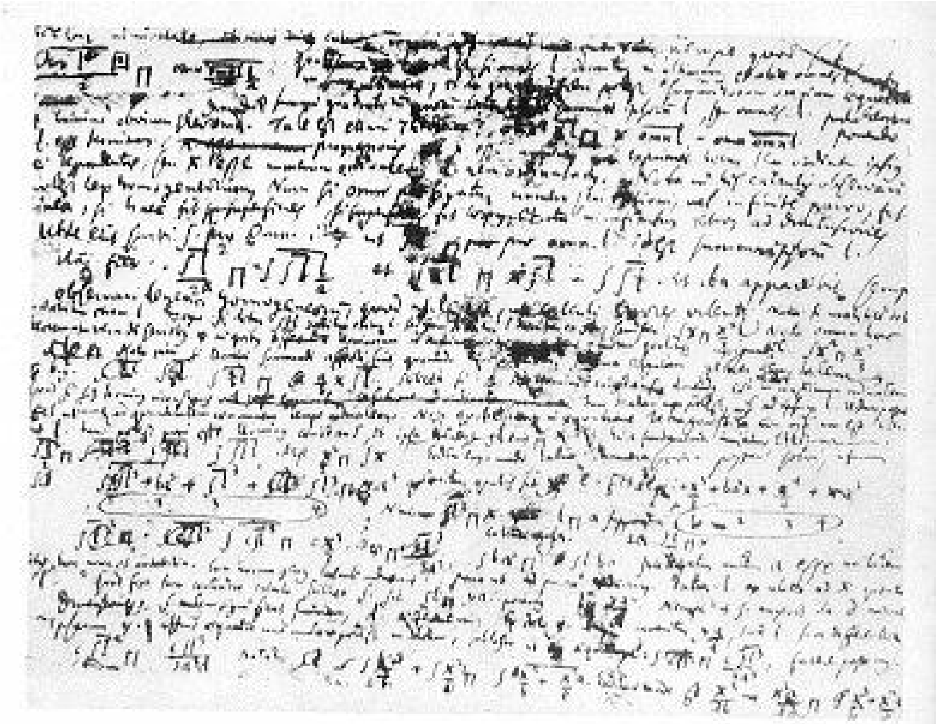
$$y = uv \quad \to \quad dy = u\,dv + v\,du$$

$$A(r) = \pi r^2$$

$$dy = \frac{dy}{dx}\frac{dx}{dt}dt$$

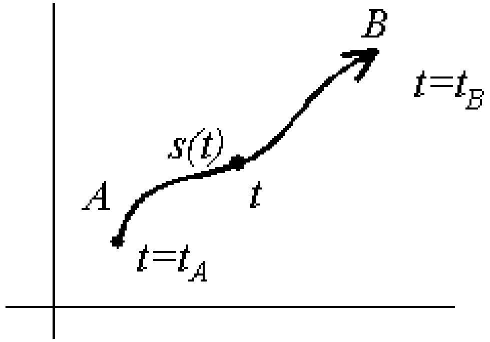
Chapitre 5

Intégration



Ausschnitt aus einem Manuskript von Leibniz vom 29. Oktober 1675, in dem zum ersten Male das Integralzeichen auftritt

✓ Principe

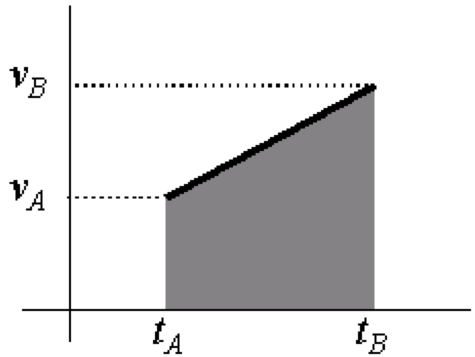


$$s(t) \rightarrow v(t) = \frac{ds(t)}{dt}$$

$$v(t) \rightarrow s(t) = ?$$

$$d = \overline{v}\left(t_B - t_A\right)$$

Exemple: $$d = \left[\frac{1}{2}\left(v_B + v_A\right)\right]\left(t_B - t_A\right)$$



Suite à l'intégration, les 2 problèmes fondamentaux du XVII$^{\text{ème}}$ s. ont pu être résolus

- Problème des tangentes → différentiation
- Problème de la quadrature → calcul intégrale

Inverse de la dérivée → intégrale indéfinie

Calcul de l'aire → intégrale définie

✓ Intégrale indéfinie

Soit $y = F(x)$

telle que: $F'(x) = \dfrac{dy}{dx}$

Intégrale indéfinie par rapport à x: $\int F'(x)\,dx = F(x) + C$

$$y = x^2$$

Intégrales élémentaires	
$\int x^n dx$	$\dfrac{x^{n+1}}{n+1} + C \quad (n \neq -1)$
$\int \dfrac{1}{ax+b} dx$	$\dfrac{1}{a}\ln(ax+b) + C$
$\int \sin axdx$	$-\dfrac{1}{a}\cos(ax) + C$
$\int \cos axdx$	$\dfrac{1}{a}\sin(ax) + C$
$\int e^{ax} dx$	$\dfrac{1}{a}\exp(ax) + C$

- L'intégrale d'une dérivée redonne cette dérivée

$$\frac{d}{dx}\int F'(x)\,dx = \frac{d}{dx}\left(F(x)+C\right) = F'(x)$$

- En fait, opérateur dérivée: $\dfrac{d}{dx} \equiv D$

$$DF(x) = F'(x)$$

$$D^{-1}F'(x) = F(x)+C$$

$$DD^{-1} = D^{-1}D = 1$$

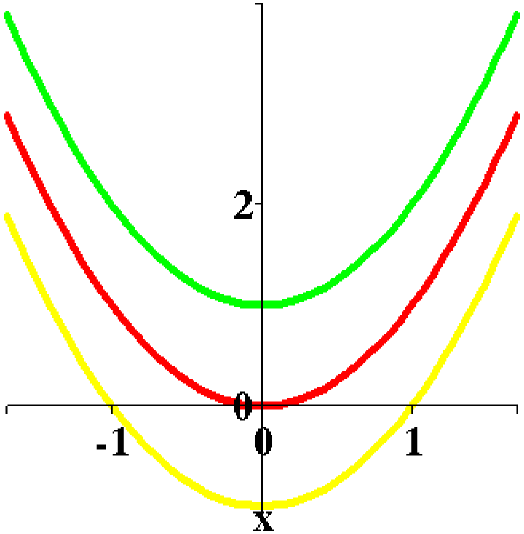
- Détermination de la constante:

$$y = \int 2x\,dx = x^2 + C$$

C = +1

C = 0

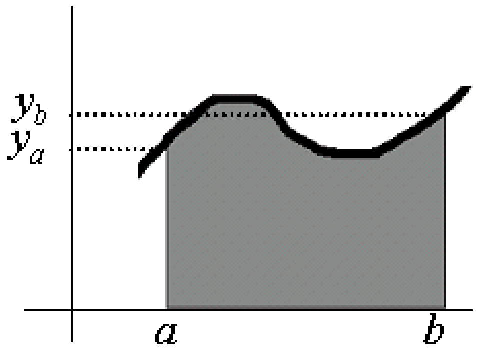
C = -1



$$f(x) = au(x) + bv(x) + \dots \quad \rightarrow \quad \int f(x)\,dx = a\int u(x)\,dx + b\int v(x)\,dx + \dots$$

✓ Intégrale définie

– Calcul intégrale inventé car on désirait connaître l'aire par une courbe



$$A = (b-a)\,\overline{y}$$

Si fonction linéaire: $\overline{y} = \frac{1}{2}\left(f(a) + f(b) \right)$

$$A = \int_a^b f(x)\,dx = \left[F(x)\right]_a^b = F(b) - F(a)$$

Étapes:

1. On définit l'intégrale indéfinie
2. On applique l'intégrale trouvée aux bornes voulues

– Application: moyenne $\overline{y} = \dfrac{\int_a^b f(x)\,dx}{\int_a^b dx} = \dfrac{A}{b-a}$

- Propriétés de l'intégrale définie

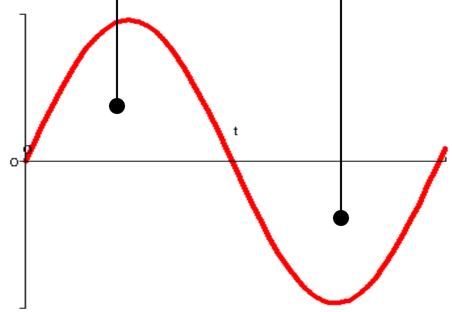
$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^c f(x)\,dx + \int_c^b f(x)\,dx$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = -\int_b^a f(x)\,dx$$

- Aires négatives

$$\int_0^{2\pi} \sin x dx = 0$$

$$\int_0^{2\pi} \sin x dx = \underbrace{\int_0^{\pi} \sin x dx}_{+2} + \underbrace{\int_{\pi}^{2\pi} \sin x dx}_{-2}$$



- Fonctions discontinues
- Intégrales impropres → intégrale de Cauchy

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\varepsilon \to 0}\left\{\int_a^{c-\varepsilon} f(x)\,dx + \int_{c+\varepsilon}^b f(x)\,dx\right\}$$

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\,dx = 2$$

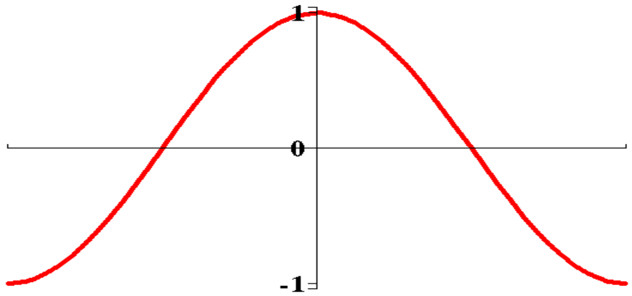
– Intégrale infinie

$$\int_a^\infty f(x)\,dx = \lim_{b\to\infty}\int_a^b f(x)\,dx$$

$$\int_0^\infty \exp(-x)\,dx = 1$$

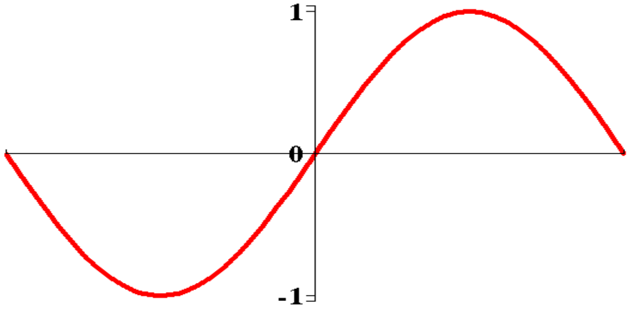
✓ Fonctions paires et impaires

– Fonction paire: $f(-x) = f(x)$



Symétrique par rapport à l'axe x=0

– Fonction impaire: $f(-x) = -f(x)$



Symétrique par rapport à x=0 ou
Antisymétrique par rapport à l'axe x=0

– Produit:

$$f_+(x)\cdot f_+(x) = f_-(x)\cdot f_-(x) = f_+(x)$$

$$f_-(x)\cdot f_+(x) = f_+(x)\cdot f_-(x) = f_-(x)$$

– Somme

$$f(x) = \frac{1}{2}\left[f(x) + f(-x)\right] + \frac{1}{2}\left[f(x) - f(-x)\right]$$
$$= f_+(x) + f_-(x)$$

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots + a_n x^n$$
$$= \left[a_0 + a_2 x^2 + a_4 x^4 + \ldots\right] + \left[a_1 x + a_3 x^3 + a_5 x^5 + \ldots\right]$$
$$= f_+(x) + f_-(x)$$

$$\int_{-a}^{+a} f(x)\,dx = \int_{-a}^{0} f(x)\,dx + \int_{0}^{+a} f(x)\,dx$$

fonction paire

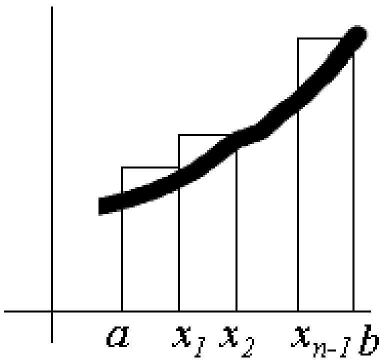
$$\int_{-a}^{+a} f(x)\,dx = 2\int_{0}^{+a} f(x)\,dx$$

fonction impaire

$$\int_{-a}^{+a} f(x)\,dx = 0$$

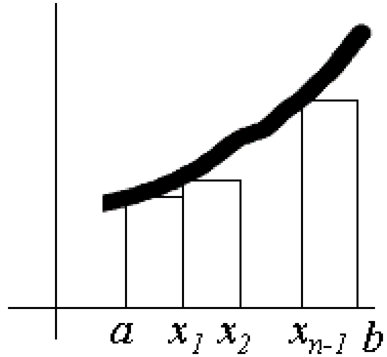
Très grande importance de la symétrie en sciences physiques

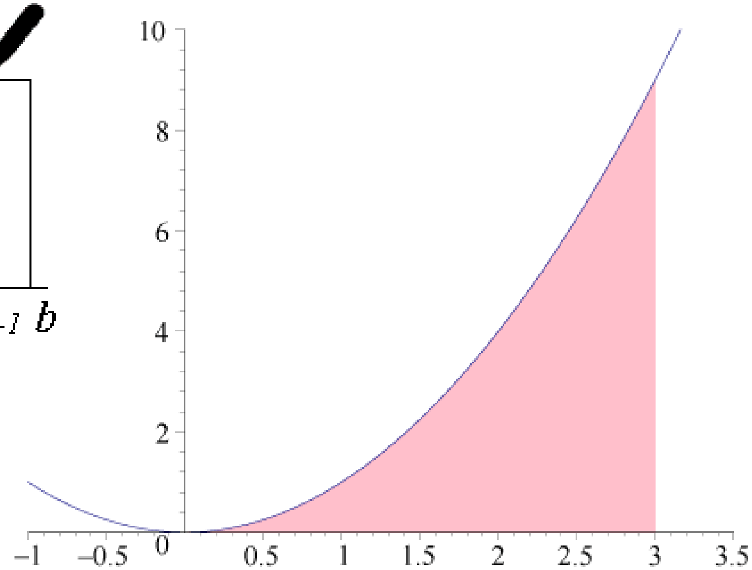
✓ Le calcul intégral



$$A \approx \sum_{i=1}^{n} y_i \Delta x_i$$

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$$





$$A = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} y_i \Delta x_i \qquad \Delta x = \frac{b-a}{n}$$

Leibniz, Newton: $$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,\Delta x_i$$

Intégrale de Riemann: $$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b F'(x)\,dx = F(b) - F(a)$$

Relation entre intégrale définie et indéfinie:

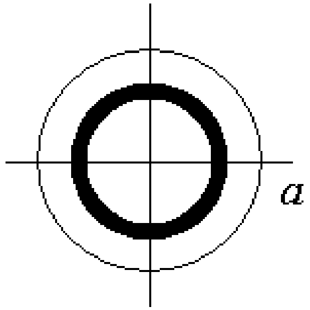
$$\int f(x)\,dx = \int_a^x f(y)\,dy = F(x) - F(a) = F(x) + C$$

- Utilisation des différentielles
  - Cas du cercle:

$$2\pi r\delta r < \delta s < 2\pi\left(r+\delta r\right)\delta r$$

$$2\pi r < \frac{\delta s}{\delta r} < 2\pi\left(r+\delta r\right)$$

$$\lim_{\delta r\to 0}\frac{\delta s}{\delta r} = \frac{ds}{dr} = 2\pi r$$

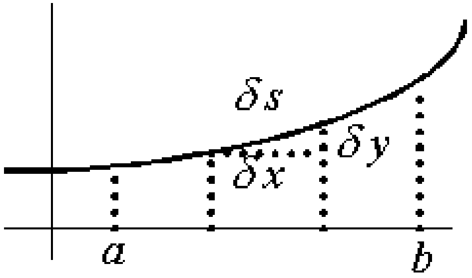


$$A = \int_0^A ds = \int_0^a 2\pi r dr = \pi a^2$$

  - Cas d'une sphère: Volume d'une sphère en considérant le fait que la surface d'une sphère vaut $4\pi R^2$

- Longueur et intégrale

$$\delta s \approx \sqrt{\left(\delta x\right)^2 + \left(\delta y\right)^2} = \delta x\sqrt{1+\left(\frac{\delta y}{\delta x}\right)^2}$$



$$ds = \left(\sqrt{1+\left(\frac{dy}{dx}\right)^2}\right)dx$$

$$L = \int_o^L ds = \int_a^b \left(\sqrt{1+\left(\frac{dy}{dx}\right)^2}\right)dx$$

✓ Utilisation du calcul intégral

- Aires de plan, longueur de courbe …
- Aperçu du calcul 3D
- Valeurs moyenne: masse, moment d'inertie, distribution de charges, …
- Dynamique
- Solution d'équations différentielles:
  - Cinétique
  - Mécanique classique
  - Chimie quantique

✓ Propriétés statiques de la matière

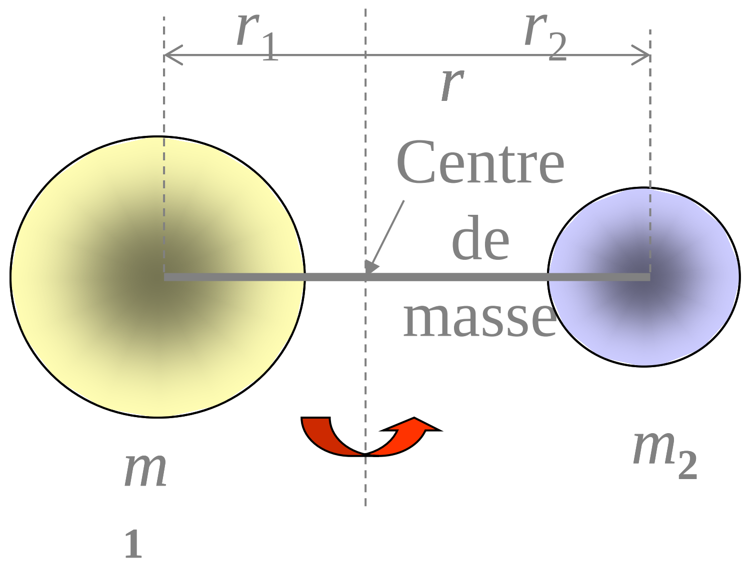
- Masse totale $\sum_{i=1}^{n} m_i$
- Premier moment de masse: $\sum_{i=1}^{n} m_i x_i$
- Deuxième moment de masse: $\sum_{i=1}^{n} m_i x_i^2$
- Centre de masse: $MX = \sum_{i=1}^{n} m_i x_i$
- Moment d'une force: $T = \sum_{i=1}^{n} F_i x_i = g \sum_{i=1}^{n} m_i x_i = gMX = FX$

– Moment d'inertie:

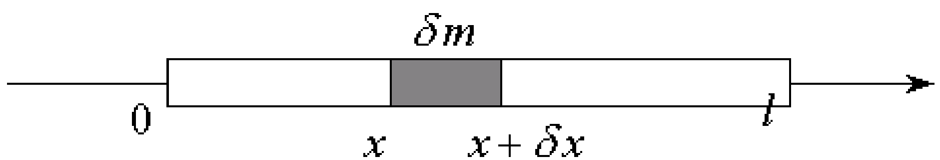
$$I = \sum_{i=1}^{n} m_i r_i^2$$
$$= m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$
$$= \mu r^2$$

μ: masse réduite

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$



– Cas continu:



Densité linéaire:

$$\rho(x) = \lim_{\delta x \to 0} \left(\frac{\delta m}{\delta x} \right) = \frac{dm}{dx}$$

$$M = \int_0^M dm = \int_0^l \rho(x)\, dx$$

Densité moyenne:

$$\bar{\rho} = \frac{M}{l} = \frac{\int_0^l \rho(x)\,dx}{\int_0^l dx}$$

Position du cdm:

$$MX = \int_0^l \rho(x)\,x dx$$

Moment d'inertie: $I = \int_0^l \rho(x)(x - x_0)^2\,dx$

✓ Dynamique

– Travail et Énergie

Quand un travail est effectué sur un système par une force externe, l'énergie du système est augmentée par la quantité de travail produite.

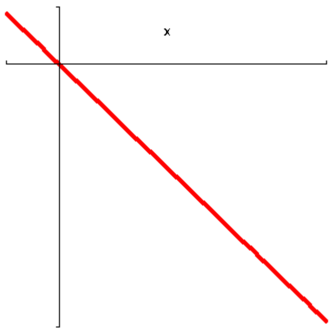
$$E = T + V$$

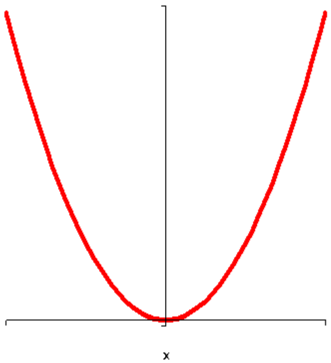
$$W_{AB} = \int_A^B F(x)\,dx = m\int_A^B \frac{dv}{dt}dx = m\int_{t_A}^{t_B} \frac{dv}{dt} v dt = \frac{1}{2} m \int_{t_A}^{t_B} \left[\frac{d}{dt}\left(v^2\right)\right] dt = T_B - T_A$$

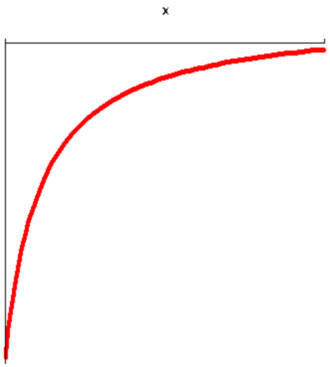
$$W_{AB} = \int_A^B F(x)\,dx = V_B - V_A$$

– Force conservative: Quand le travail effectué par une force est indépendant du chemin

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} \qquad V(x) = -\int F(x)\,dx + C$$







✓ **Travail pression-volume**

– RDV CPH307 …

Chapitre 6

Méthodes d'intégration

Riemann

✓ Principes

$$\int f(x)\,dx = F(x) + C$$

2 méthodes générales pour calculer les intégrales:

- Substitutions
- Intégration par parties

Finalité: transformer en une intégrale qui se trouve dans les tables.

S'il n'est pas possible de trouver une forme intégrable → méthodes numériques

✓ Méthode de substitution

$$f(x) = (2x-1)^3$$

$$f(x) = 8x^3 - 12x^2 + 6x - 1$$

$$\int f(x)\,dx = \int \left(8x^3 - 12x^2 + 6x - 1\right) dx$$

$$= 2x^4 - 4x^3 + 3x^2 - x + C'$$

$$= \frac{1}{8}(2x-1)^4 + C$$

$$u = 2x - 1 \quad \rightarrow \quad du = \frac{du}{dx}dx = 2dx$$

$$\int f(x)\,dx = \int (2x-1)^3\,dx$$

$$= \frac{1}{2}\int u^3 dx = \frac{1}{8}u^4 + C$$

$$= \frac{1}{8}(2x-1)^4 + C$$

$$\int f(x)\,dx = \int f(u)\,du$$

– Quelques exemples de substitution:

$$\int f(x)\, f'(x)\,dx = \int u\,du = \frac{1}{2}u^2 + C$$

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)}\,dx = \int \frac{du}{u} = \ln u + C$$

$$\int f(\cos x)\sin x\,dx = \int f(u)\,du$$

– Substitutions trigonométriques et hyperboliques

$$\int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} = \int \frac{a\cos\theta\,d\theta}{a\cos\theta} = \theta + C = \sin^{-1}\left(\frac{x}{a}\right) + C$$

– Intégrales définies

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{u(a)}^{u(b)} g(u)\,du$$

✓ Intégration par parties

$$y = \int x \cos x dx$$

– Rappel: $(uv)' = u'v + v'u$

Si nous intégrons

$$\int \left[(uv)' = u'v + v'u \right]$$

$$uv = \int u'v + \int v'u$$

$$\int u'v = uv - \int v'u$$

– Revenons à notre intégrale:

$$v = x \qquad u' = \cos x$$

$$v' = 1 \qquad u = \sin x$$

$$\int x (\sin x)' \, dx = x \sin x - \int \sin x (x)' \, dx$$

$$= x \sin x - \int \sin x dx$$

$$= x \sin x + \cos x + C$$

– Mais si nous avions pris: $u = \cos x$ $\qquad v' = x$

✓ **Relation de récurrence**

$$I_n = \int x^n \exp(ax)\,dx$$

$$u = x^n \qquad\qquad v' = \exp(ax)$$

$$\ldots I_0 = \int \exp(ax)\,dx = \frac{1}{a}\exp(ax) + C \ldots$$

$$I_n = \int_0^\infty r^n \exp(-ar)\,dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

✓ **Méthode des fractions partielles**

$$\int \frac{dx}{(x+a)^n}dx = \begin{cases} \ln(x+a) + C & \text{si} \quad n = 1 \\ \dfrac{-1}{(n-1)(x+a)^{n-1}} + C & \text{si} \quad n > 1 \end{cases}$$

$$\int \frac{2x+p}{(x^2+px+q)^n}dx = \begin{cases} \ln(x^2+px+q) + C & \text{si} \quad n = 1 \\ \dfrac{-1}{(n-1)(x^2+px+q)^{n-1}} + C & \text{si} \quad n > 1 \end{cases}$$

$(x^2 + px + q)$ ne doit pas avoir de racines

– Intégrands trigonométriques rationnels

$$\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} = \frac{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}{\sin^2\frac{\theta}{2}+\cos^2\frac{\theta}{2}}$$

$$\cos\theta = \cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}}{\sin^2\frac{\theta}{2}+\cos^2\frac{\theta}{2}}$$

en posant $t = \tan\frac{\theta}{2}$

$$\sin\theta = \frac{2t}{1+t^2} \qquad \cos\theta = \frac{1-t^2}{1+t^2} \qquad \int f(\theta)\,d\theta = \int \frac{2f(t)}{1+t^2}\,dt$$

✓ **Différentiation paramétrique d'intégrales**

Si $f(x,\alpha)$ et $\frac{d}{d\alpha}f(x,\alpha)$ sont des fonctions continues en x et en α,

$$\frac{d}{d\alpha}\int f(x,\alpha)\,dx = \int\left[\frac{d}{d\alpha}f(x,\alpha)\right]du = \frac{d}{d\alpha}F(x,\alpha)$$

Chapitre 7

Séquences et Séries

Fibonacci

Pascal

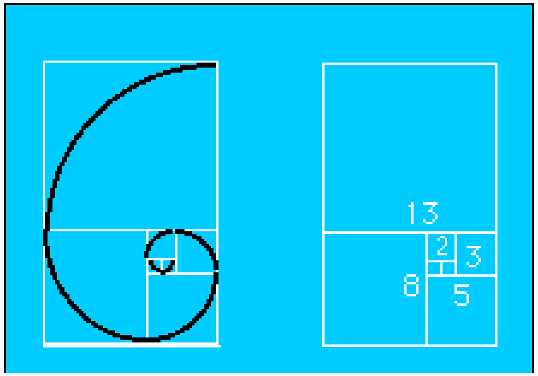
Taylor

McLaurin

✓ Principe

- Série:
  - Finie $u_1 + u_2 + \ldots + u_n$
  - Infinie: $u_1 + u_2 + \ldots$

- Importance en sciences: thermodynamique statistique, solutions de l'équation de Schrödinger, transformées de Fourier, …



✓ Séquences

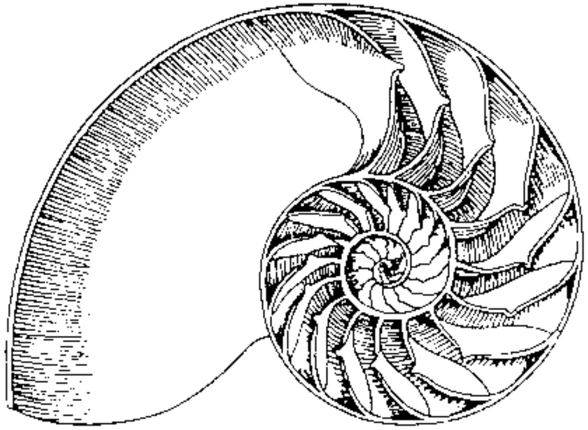
- Ensemble ordonné de termes
  - Nombres impairs: $1, 3, 5, 7, \ldots$

    $u_r = 1 + 2(r-1)$

    $u_r = u_{r-1} + 2 \quad u_1 = 1$ Formule de récurrence

  - Fibonacci $u_r = u_{r-1} + u_{r-2} \quad u_0 = u_1 = 1$

  - Progressions:
    - Arithmétique: $u_r = a + d(r-1)$
    - Géométrique: $u_r = ax^{r-1}$



– Limites de séquences:

$$\lim_{x\to\infty}\frac{1}{x}=0$$

$$\lim_{r\to\infty}u_r=\lim_{r\to\infty}\left(\frac{r-1}{r}\right)=1$$

✓ **Séries finies**

$$S_n=u_1+u_2+\ldots+u_n=\sum_{i=1}^{n}u_i$$

$$S=\lim_{n\to\infty}S_n=\lim_{n\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{n}u_i\right)$$

– Série arithmétique

$$S_n=\sum_{r=1}^{n}\left[a+d\left(r-1\right)\right]$$

$$=\frac{n}{2}\left[2a+\left(n-1\right)d\right]$$

$$S_n=\sum_{r=1}^{n}r=\frac{n\left(n+1\right)}{2}$$

– Série géométrique:

$$S_n = \sum_{r=1}^{n-1} a x^r$$

$$= a\left(\frac{1-x^n}{1-x}\right)$$

– Expansion binomiale: Triangle de Pascal

$$(1+x)^2 = 1 + 2x + x^2$$

$$(1+x)^3 = 1 + 3x + 3x^2 + x^3$$

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}x^3 + \ldots + \frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-r+1)}{r!}x^r + \ldots + x^n$$

$$\binom{n}{r} = \frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-r+1)}{r!} = \frac{n!}{r!(n-r)!}$$

$$(1+x)^n = \sum_{r=0}^{n} \binom{n}{r} x^r$$

$$(x+y)^n = \sum_{r=0}^{n} \binom{n}{r} x^r y^{n-r}$$

- Méthode de différences $u_r = v_r - v_{r-1}$

$$\sum_{r=1}^{n} u_r = \sum_{r=1}^{n} v_r - \sum_{r=1}^{n} v_{r-1}$$
$$= v_n - v_0$$

✓ Séries infinies

- Série géométrique: $S = \lim_{n\to\infty} S_n = \lim_{n\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{n} u_i\right)$

$$S_n = \sum_{r=1}^{n-1} x^r$$
$$= \frac{1-x^n}{1-x} \quad x \neq 1$$
$$\text{si } |x| < 1 \quad \lim_{n\to\infty}\left(\frac{1-x^n}{1-x}\right) = \frac{1}{1-x}$$

- Série harmonique:

$$S = \lim_{n\to\infty} S_n = \lim_{n\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i}\right) \text{ diverge}$$

✓ Tests de convergence

– Test de comparaison:

Soient 2 séries de termes positifs $A = a_1 + a_2 + \ldots + a_r + \ldots$

$$B = b_1 + b_2 + \ldots + b_r + \ldots$$

- Si série B converge, série A converge si $a_r \leq b_r$
- Si série B diverge, série A diverge si $a_r \geq b_r$

– Test des rapports de d'Alembert

Soient une série: $a_1 + a_2 + \ldots + a_r + a_{r+1} + \ldots$

- Converge si: $\lim\limits_{x \to \infty} \left| \dfrac{a_{r+1}}{a_r} \right| < 1$
- Diverge si: $\lim\limits_{x \to \infty} \left| \dfrac{a_{r+1}}{a_r} \right| > 1$
- D'autres tests sont nécessaires si le rapport vaut 1.

– Test de l'intégrale de Cauchy:

Soit une série présentant des termes positifs décroissants: $a_1 + a_2 + \ldots + a_r + a_{r+1} + \ldots \quad (a_{r+1} < a_r)$

Soit une fonction continue en *x* telle que: $a(r) = a_r$

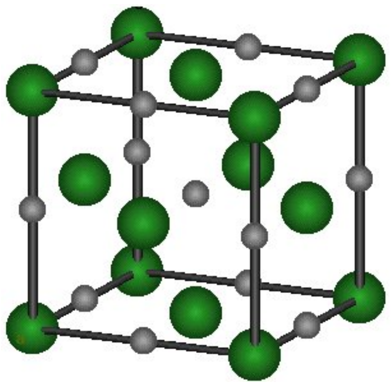
Converge (diverge) si $\int_1^{\infty} a(x)\,dx$ converge (diverge)

– Série alternée

$$a_1 - a_2 + a_3 - \ldots + a_r - a_{r+1} + \ldots \quad (a_i > 0)$$

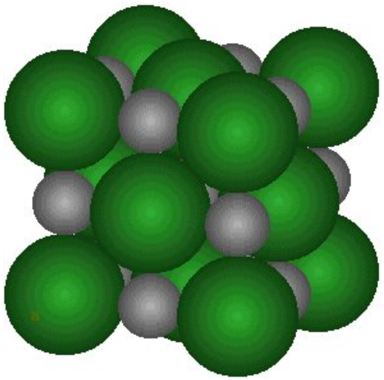
$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots = \ln 2$$

Principe de l'obtention de la constante de Madelung; NaCl



- Maille cubique
- Mode de réseau: CFC
- a = 5,64 Å

$$E \propto \frac{qq'}{d}$$



$$E = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\underbrace{\left[\frac{6}{\sqrt{1}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} + \ldots\right]}_{\text{constante de Madelung}}$$

✓ Séries de MacLaurin et de Taylor (Développement limité)

- Séries de puissance: $a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots$

  Rayon de convergence: $R = \lim_{r \to \infty} \left| \frac{a_r}{a_{r+1}} \right| > |x|$

  Série est convergente pour $R > |x|$, et divergente pour $R < |x|$

- Série de MacLaurin

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots$$

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots \quad \to \quad f(0) = a_0$$

$$f'(x) = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \ldots \quad \to \quad f'(0) = a_1$$

$$f''(x) = 2 \times 1 \times a_2 + 3 \times 2 \times 1 \times a_3 x + \ldots \quad \to \quad f''(0) = 2! a_2$$

$$f^{(n)}(x) = n! a_n + (n+1)! a_{n+1} x + \ldots \quad \to \quad f^{(n)}(0) = n! a_n$$

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} x + \frac{f''(0)}{2!} x^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n + \ldots$$

La fonction et ses dérivées doivent bien entendu exister en x=0, et dans l'intervalle entre 0 et x.

– Série de Taylor:

La série de MacLaurin se faisait au point x=0, celle de Taylor se fait en x=a.

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \ldots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n$$

$$f(x+a) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}x + \frac{f''(a)}{2!}x^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}x^n + \ldots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}x^n$$

– Exemples:

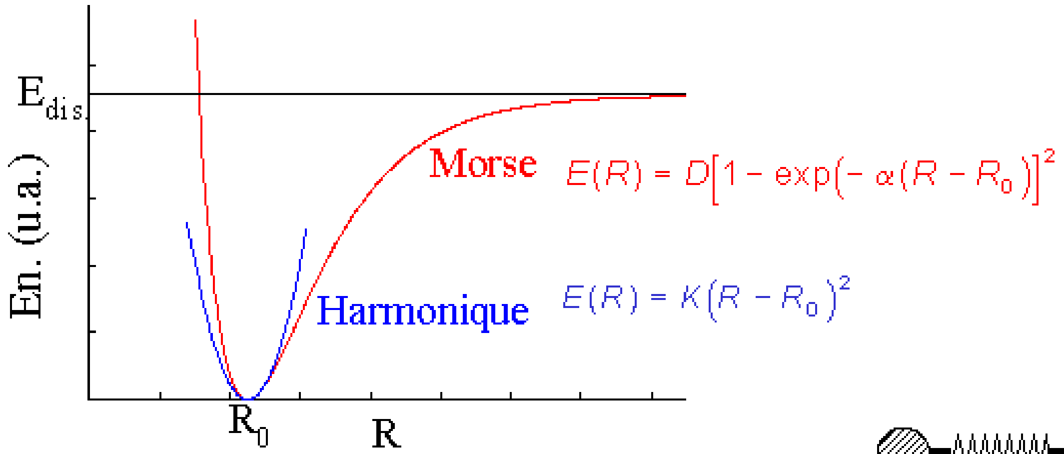
$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \ldots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \ldots$$

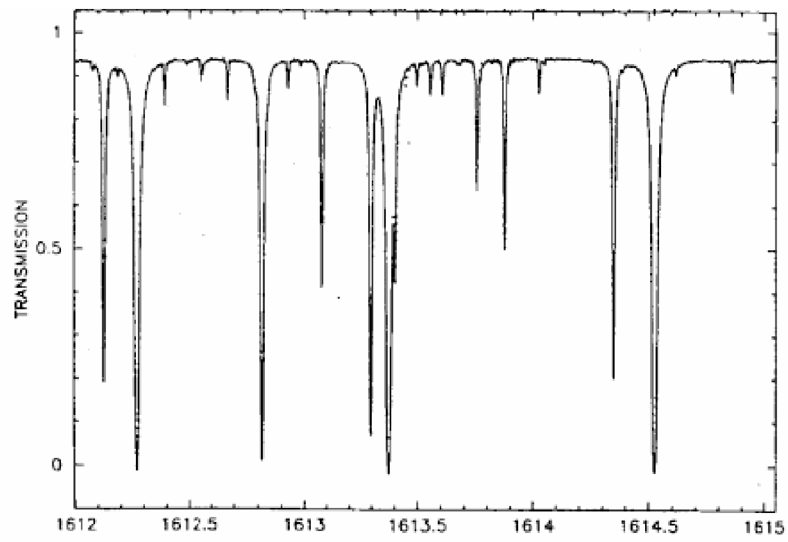
$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \ldots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \ldots$$

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \ldots$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \ldots + (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n} + \ldots$$

– Exemple: Liaison entre 2 atomes





✓ Limites

– Théorème de Taylor

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + R_n(x)$$

$$R_n(x) = \frac{(x-a)^n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(b) \qquad \text{avec} \quad a < b < x$$

– Limites

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \ldots \approx x$$

D'où: $$\frac{\sin x}{x} = 1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} + \ldots$$

Soit: $$\lim_{x \to 0}\left(\frac{\sin x}{x}\right) = 1$$

En fait l'utilisation de série de puissance permet de déterminer des limites indéterminées: $$\lim_{x \to a}\frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \to a}\frac{0}{0} = ?$$

$$\frac{f(x)}{g(x)} = \frac{f(a) + f'(a)(x-a) + \ldots}{g(a) + g'(a)(x-a) + \ldots} = \frac{f'(a)(x-a) + \ldots}{g'(a)(x-a) + \ldots} \approx \frac{f'(a)}{g'(a)}$$

Règle de l'Hôpital: $$\lim_{x \to a}\frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \to a}\frac{f'(x)}{g'(x)}$$

✓ Opérations avec les séries de puissance

– Multiplication:

$$C(x) = A(x)B(x) = \left(\sum_{r=0}^{\infty} a_r x^r\right)\left(\sum_{s=0}^{\infty} b_s x^s\right)$$

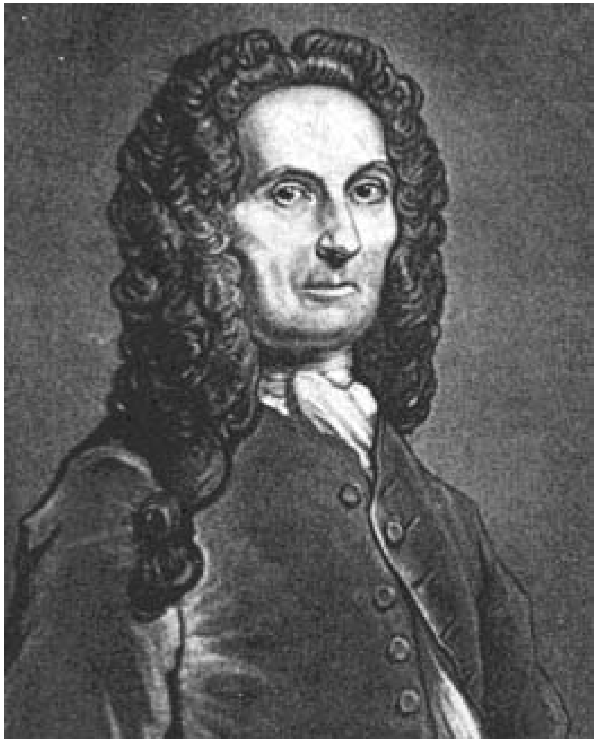
$$= \sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty} a_r b_s x^{r+s}$$

Produit de Cauchy

$$C(x) = \sum_{r=0}^{\infty} c_r x^r \quad \text{avec} \quad c_r = \sum_{i=0}^{r} a_i b_{r-i}$$

Chapitre 8

Nombres complexes



de Moivre

Euler

✓ Principes

– Définition

$$i^2 = -1 \quad \left[i = \sqrt{-1} \right] \quad (= j)$$

– Nombre imaginaire:

$$z = x + iy$$

$$\Re(z) = x \qquad \Im(z) = y$$

– Nécessité des nombres complexes:

- Résolution des équations en mathématiques
- Facilité de résolution des équations en physique
- Interprétation physique
- …

$$\tilde{n} = n - ik$$

indice de réfraction *absorption*

✓ Algèbre des nombres complexes

- Soient

$$z_1 = x_1 + iy_1 \qquad z_2 = x_2 + iy_2$$

Si $z_1 = z_2$

Alors $x_1 = x_2$ et $y_1 = y_2$

- Complexe conjugué:

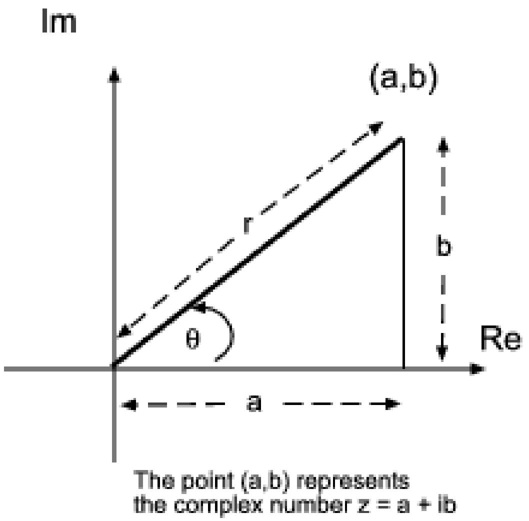
$$z^* = \tilde{z} = x - iy$$

$$\frac{1}{2}\left(z + z^*\right) = x = \Re\left(z\right)$$
$$\frac{1}{2}\left(z - z^*\right) = y = \Im\left(z\right)$$

$$zz^* = x^2 + y^2$$

- Division: $\dfrac{z_1}{z_2} = \dfrac{z_1 z_2{}^*}{z_2 z_2{}^*}$

✓ Représentation graphique



Plan complexe:
diagramme d'Argand

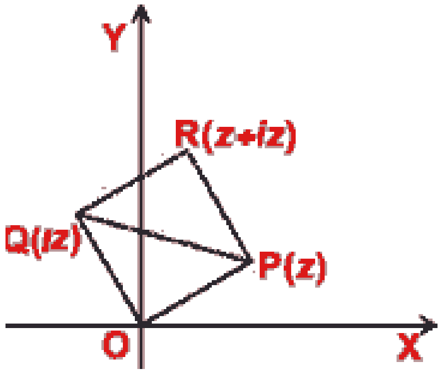
– Module (ou valeur absolue):

$$r=\left(x^2+y^2\right)^{1/2}=|z|=\operatorname{mod} z$$

– Représentation polaire

$$z=x+iy=r(\cos\theta+i\sin\theta)$$

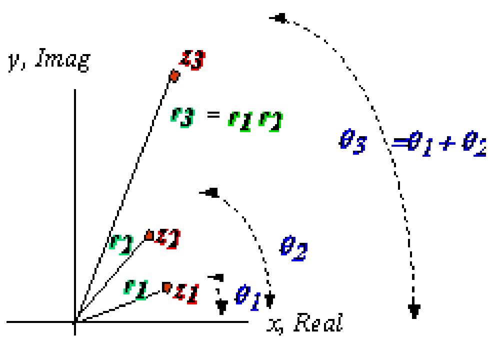
Phase (angle de phase), ou argument de z: $\theta=\arg z$



– Représentation des opérations d'arithmétique
  - Addition: même principe d'addition que les vecteurs
  - Multiplication et division:

$$z_1z_2 \longrightarrow \left|z_1z_2\right|=\left|z_1\right|\left|z_2\right| \quad \text{et} \quad \arg\left(z_1z_2\right)=\arg\left(z_1\right)+\arg\left(z_2\right)$$

$$\frac{z_1}{z_2} \longrightarrow \left|\frac{z_1}{z_2}\right|=\frac{\left|z_1\right|}{\left|z_2\right|} \quad \text{et} \quad \arg\left(\frac{z_1}{z_2}\right)=\arg\left(z_1\right)-\arg\left(z_2\right)$$



– Formule de de Moivre

$$z^n = r^n(\cos n\theta + i \sin n\theta)$$

Pour un cercle de rayon 1:

$$(\cos\theta + i\sin\theta)^n = \cos n\theta + i\sin n\theta$$

✓ **Fonctions complexes**

$$f(x) = g(x) + ih(x)$$

Très important dans la théorie des ondes: on retrouve module, complexe conjugué, …

✓ **Formule d'Euler**

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} + \ldots$$

$$e^{i\theta} = 1 + \frac{(i\theta)}{1!} + \frac{(i\theta)^2}{2!} + \ldots + \frac{(i\theta)^n}{n!} + \ldots$$

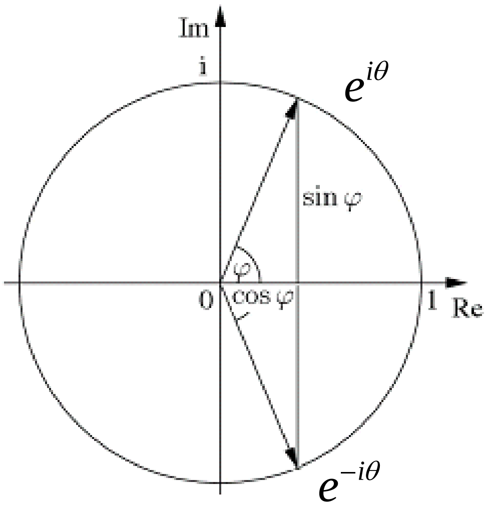
$$= \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \ldots\right) + i\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \ldots\right)$$

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$$

$$zz^* = 1$$

$$\cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} \qquad \sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2}$$



$$z = x + iy = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta}$$

$$z^* = x - iy = r(\cos\theta - i\sin\theta) = re^{-i\theta}$$

$$z^{-1} = \frac{1}{x+iy} = \frac{1}{r}e^{-i\theta}$$

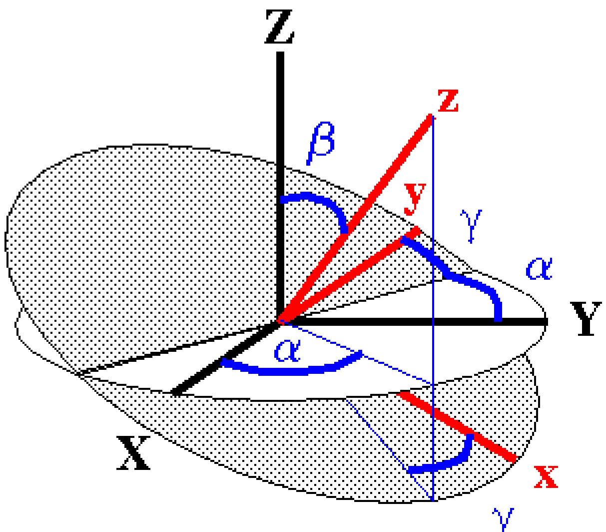
– Formule de de Moivre:

$$\left(e^{i\theta}\right)^n = \cos n\theta + i\sin n\theta$$

– Opérateurs de rotation:

Quand un nombre complexe $re^{i\alpha}$ est multiplié par $e^{i\theta}$, alors le module reste constant mais l'argument est augmenté de θ

Donc $e^{i\theta}$ peut être considéré comme l'opérateur de rotation qui transforme les coordonnées (x,y) d'un point z en coordonnées (x',y') d'un point z'.

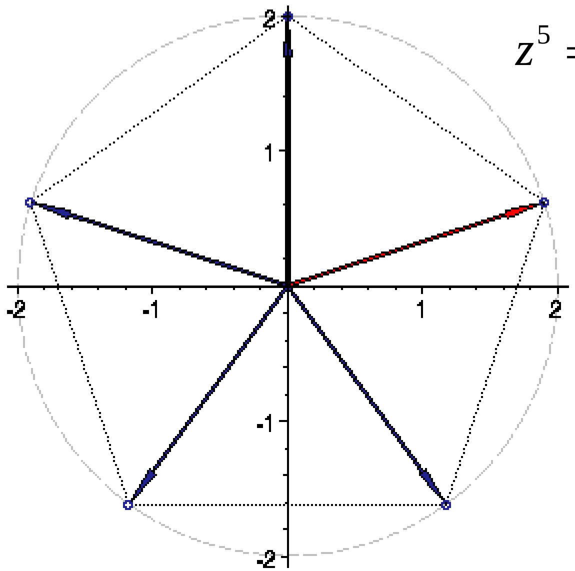


Angles d'Euler

✓ Périodicité

– $$e^{i(\theta+2n\pi)} = e^{i\theta} \times e^{2n\pi i} = e^{i\theta}$$

– Périodicité sur un cercle: les n racines de 1



$$z^5 = -1$$

- $z^3 = -1$

$$z_0 = -1$$
$$z_1 = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} i$$
$$z_1 = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} i$$

$$z^n = -1$$

$$z_k = e^{2\pi k i/n} \quad \text{pour} \quad k = \begin{cases} \pm(n-1)/2 & \text{si } n \text{ est impair} \\ \pm n/2 & \text{si } n \text{ est pair} \end{cases}$$

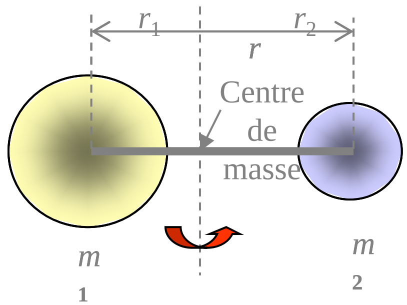
- Applicable à une fonction:

$$f\left(\theta + 2\pi/n\right) = f\left(\theta\right) \quad \text{si} \quad f\left(\theta\right) = e^{i\theta}$$

– Périodicité le long d'une ligne: $$f\left(x+a\right) = f\left(a\right)$$

Fonction la plus simple: $$f\left(x\right) = e^{2\pi x i/a}$$

– Exemple d'utilisation: en chimie quantique



✓ Évaluation des intégrales

Simplification de certaines intégrales:

$$I = \int e^{ax} \cos bx dx$$

$$I = \Re e \int e^{(a+ib)x} dx$$

$$I = \int e^{ax} \cos bx dx = \frac{e^{ax}\left(a \cos bx + b \sin bx\right)}{a^2 + b^2}$$

$$\int e^{ax} \sin bx dx = \Im m \int e^{(a+ib)x} dx = \frac{e^{ax}\left(a \sin bx - b \cos bx\right)}{a^2 + b^2}$$

Chapitre 9

Fonctions de plusieurs variables

Lagrange

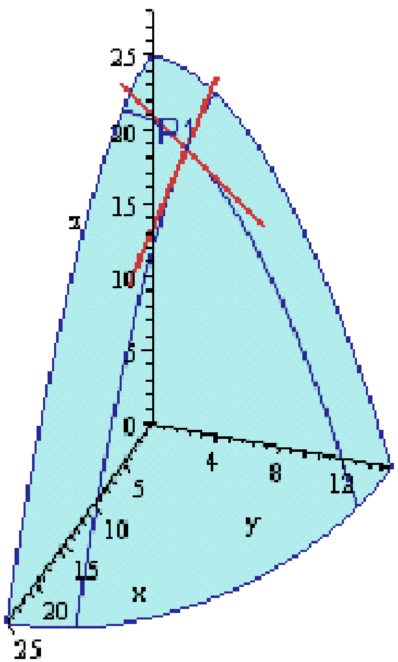
✓ Principes

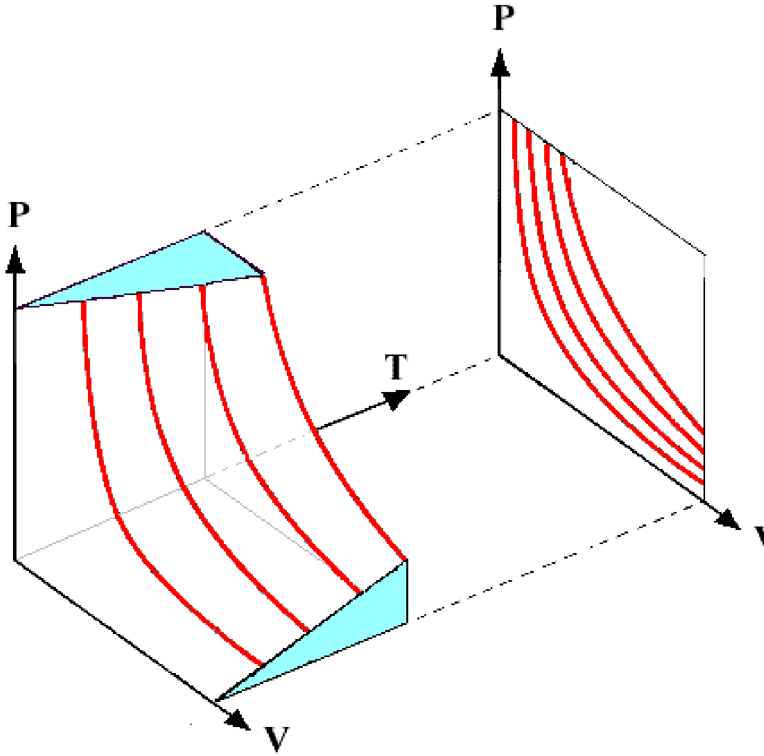
$$V(n,T,p) = \frac{nRT}{p}$$

$$z = f(x,y) = x^2 - 3xy + 2y^3$$

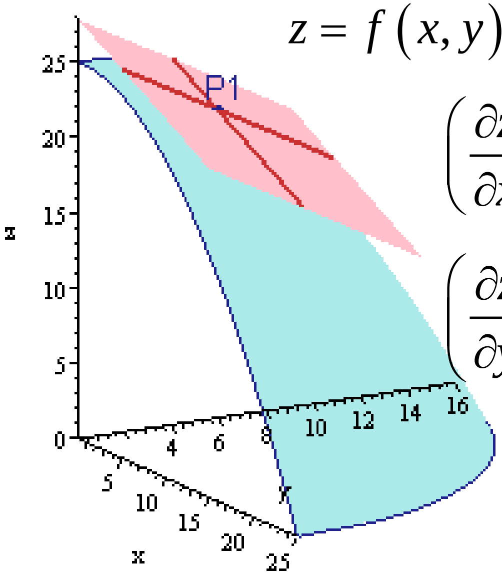
x et y: variables indépendantes

✓ Représentation graphique





✓ Différentiation partielle

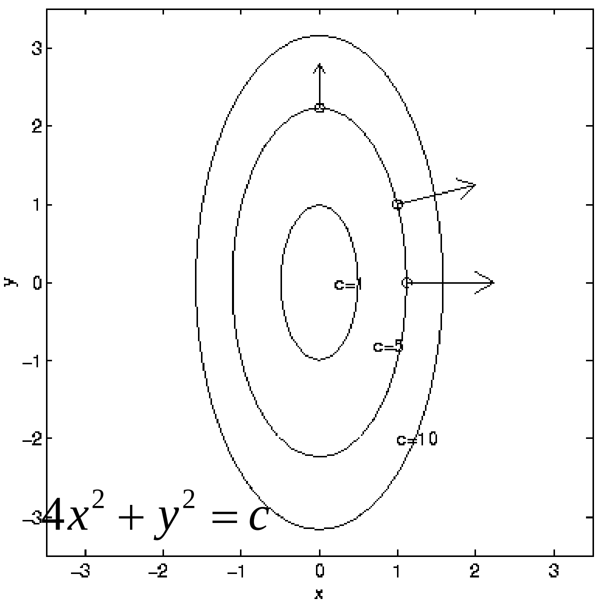


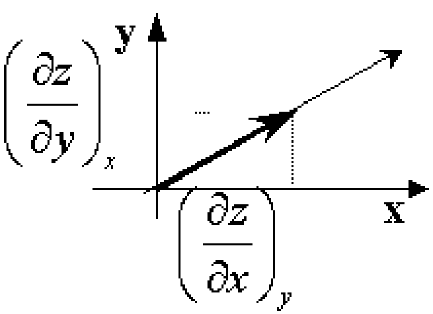
$$z = f(x,y) = x^2 - 3xy + 2y^3$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = 2x - 3y \qquad \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = \lim_{\delta x \to 0}\left\{\frac{f(x+\delta x, y) - f(x,y)}{\delta x}\right\}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x = -3x + 6y^2 \qquad \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x = \lim_{\delta y \to 0}\left\{\frac{f(x, y+\delta y) - f(x,y)}{\delta y}\right\}$$

$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y$ Pente de la courbe dans le plan pour lequel y = constante





$$\left(\frac{\partial z}{\partial r}\right) = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \cos\theta + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \sin\theta$$

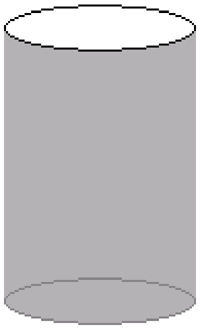
$$f(x,y) = 4x^2 + y^2$$

$$\nabla f(x,y) = \overrightarrow{\mathrm{grad}}\, f = \langle 8x, 2y \rangle$$

– Dérivées plus élevées

$$z = f(x,y) = x^2 - 3xy + 2y^3$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} = 2 \qquad \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} = 6$$



$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right) = -3 \qquad \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right) = -3$$

Dans le cas des fonctions cubiques: $\dfrac{\partial^2 z}{\partial y \partial x} = \dfrac{\partial^2 z}{\partial x \partial y}$

Égalité a une grande importance en thermodynamique … RDV à CPH307

– Optimisation avec des contraintes … CPH507

Méthode des multiplicateurs de Lagrange

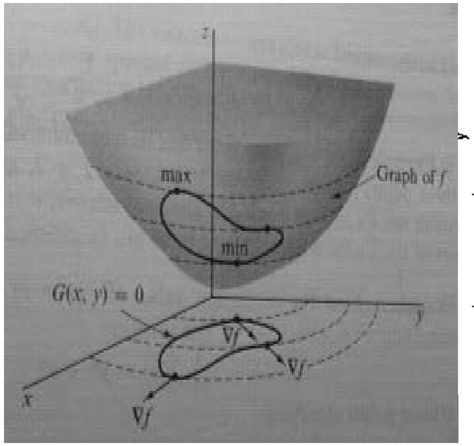
Soit: $f(x,y)$ et la contrainte $g(x,y)$

Alors:

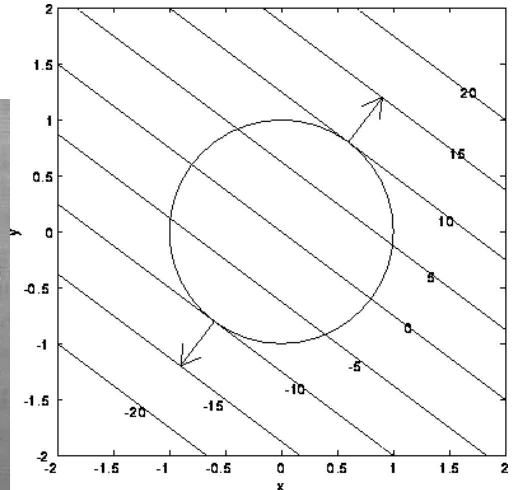
$$\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda\frac{\partial g}{\partial x} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial f}{\partial y} - \lambda\frac{\partial g}{\partial y} = 0$$

λ: multiplicateur de Lagrange

Cela peut être généralisé …



$$f(x,y) = 6x + 8y$$

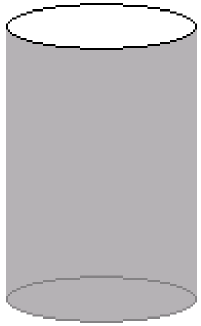


$$g(x,y) = x^2 + y^2 - 1$$

✓ Différentielle totale

$$dz = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x dy$$

$$dz = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial z}{\partial x_i}\right)_{x_{j\neq i}} dx_i$$



✓ Propriétés des différentielles

– Dérivée totale

Règle de chaîne

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \frac{dx}{dt} + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \frac{dy}{dt}$$

$$\frac{dz}{dx} = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \frac{dy}{dx}$$

– Le long d'un contour:

$$\delta z = 0 = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \delta x + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \delta y$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1$$

– Équation de Laplace en 2D

Soit: $f(x,y)$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=0$$

Équation très importante en sciences physiques

Opérateur différentiel, ou le laplacien: $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\Delta$

$$\nabla^2 f = 0$$

Une solution *f* de cette équation est appelée fonction harmonique

✓ Différentielle exacte

$$F(x,y)\,dx + G(x,y)\,dy = dz = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x dy$$

Condition pour que la différentielle soit exacte, est que les deux fonction *F* et *G* satisfassent la Relation de Réciprocité d'Euler:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)_y$$

⇒ **Relations de Maxwell**; primordiales en thermodynamique

✓ Intégrales de ligne

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

Autre interprétation que « l'aire sous la courbe »

$f(x)$ est une propiété physique

Intégrale de ligne $$I = \int_C f(x,y)\,ds = \int_C f(x,y(x))\left[1+\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right]dx$$

C: chemin d'intégration

$$I = \int_C \left[F(x,y) + G(x,y)\frac{dy}{dx}\right]dx \qquad I = \int_{t_1}^{t_2} \left[F(x,y)\frac{dx}{dt} + G(x,y)\frac{dy}{dt}\right]dt$$

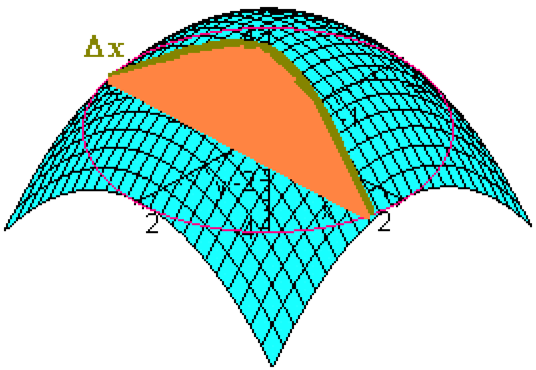
La ligne d'intégration dépend du chemin suivi.
Mais si les forces sont conservatives, alors l'intégrale est indépendante du chemin

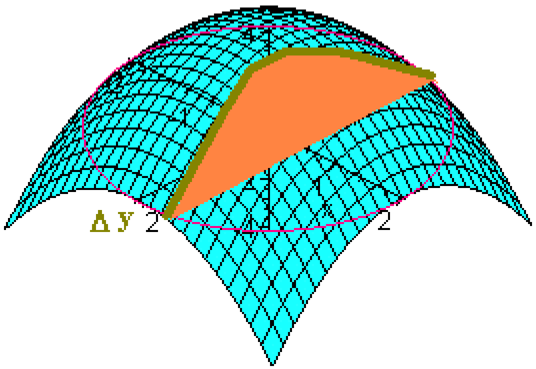
– Indépendance du chemin pour une différentielle exacte

$$z = ax^2 + bxy + cy^2 + d$$

✓ Double intégrale

$$\int_c^d \int_a^b f(x,y)\,dxdy = \lim_{\substack{m\to 0\\ n\to 0}} \sum_{s=1}^{n} \sum_{r=1}^{m} f(x_r, y_s)\,\delta x_r \delta y_s$$



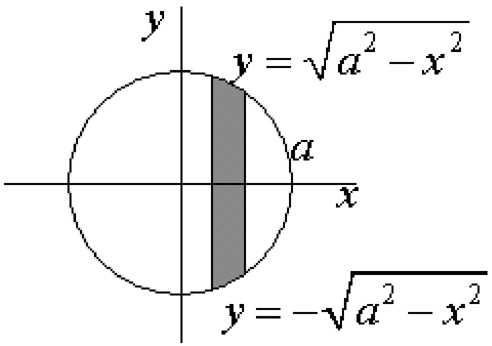


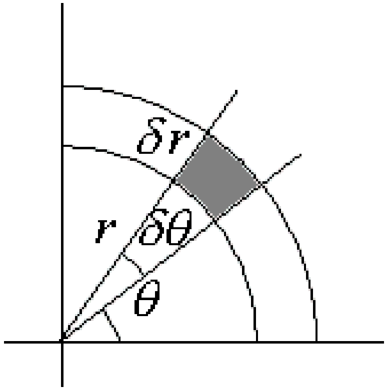
– Double intégrale peut être interprétée comme le volume sous la courbe

$$\int_R f(x,y)\,dA = \int_c^d \left\{ \int_{g(x)}^{h(x)} f(x,y)\,dy \right\} dx$$

✓ Changement de variables

– $$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{u(a)}^{u(b)} f(x(u))\frac{dx}{du}\,du$$





– Cas général:

$$x = x(u,v) \qquad y = y(u,v)$$

$$\int\int_R f(x,y)\,dxdy = \int\int_{R^*} f\big(x(u,v),y(u,v)\big)|J|\,dudv$$

$|J|$ est la norme du **Jacobien** de la transformation:

$$J = \frac{\partial(u,v)}{\partial(u,v)} = \frac{\partial x}{\partial u}\frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial v}\frac{\partial y}{\partial u}$$

si $x = r\cos\theta$ et $y = r\sin\theta$

$$J = \frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{\partial x}{\partial \theta}\frac{\partial y}{\partial r} = r$$

$$dA = dxdy \quad \rightarrow \quad dA = rdrd\theta$$

– L'intégrale:

$$\int_o^{\infty} e^{-x^2} dx$$

Transformation de coordonnées cartésiennes en coordonnées polaires

$$I = \int_o^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

$$I^2 = \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2+y^2\right)} dxdy$$

$$I^2 = \frac{1}{4}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-r^2} rdrd\theta = \frac{1}{4}\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} e^{-r^2} rdr = \frac{\pi}{4}$$

$$\int_o^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Chapitre 10

Fonctions en 3 dimensions

Laplace

✓ Principes

- $f(x, y, z)$: fonction de position, ou un champ
- Plus importantes coordonnées:
  - Cartésiennes,
  - Sphériques.

✓ Coordonnées sphériques

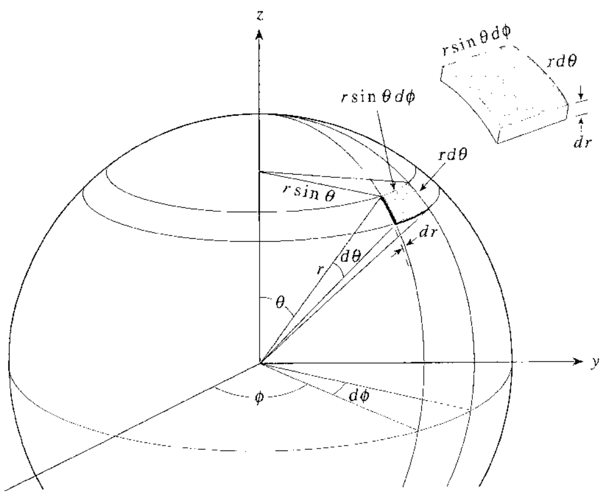
- r: coordonnée radiale
- θ: latitude
- axe z: axe polaire
- φ: longitude

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi = \begin{cases} \tan^{-1}\left(\frac{y}{r}\right) & \text{si} \quad x > 0 \\ \tan^{-1}\left(\frac{y}{r}\right) + \pi & \text{si} \quad x < 0 \end{cases}$$

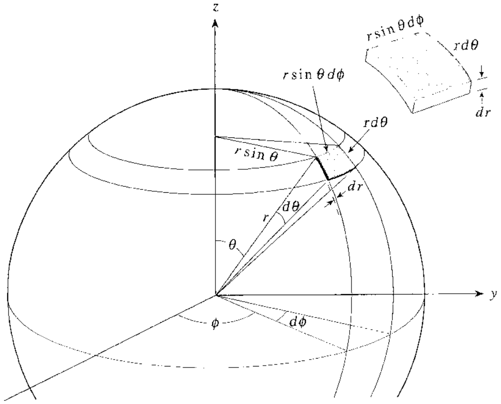


✓ Intégrales de volume

– Généralité

$$\int_V f(x,y,z)\,dv = \int_{z_1}^{z_2}\int_{y_1}^{y_2}\int_{x_1}^{x_2} f(x,y,z)\,dxdydz$$

– Coordonnées sphériques



$$\int_V f(r,\theta,\varphi)\,dv = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2}\int_{\theta_1}^{\theta_2}\int_{r_1}^{r_2} f(r,\theta,\varphi)\,r^2\sin\theta\,drd\theta d\varphi$$

– Intégrales dans tout l'espace:

$$\int_V f dv = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y,z)\,dxdydz \quad \text{en coordonnées cartésiennes}$$

$$= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} f(r,\theta,\varphi)\,r^2\sin\theta\,drd\theta d\varphi \quad \text{en coordonnées sphériques}$$

Angle solide: $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta = 4\pi$ stéradians

– Valeurs moyennes:

$$\overline{f} = \int_a^b f(x)\,p(x)\,dx$$

- ✓ **L'opérateur de Laplace (laplacien)**

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

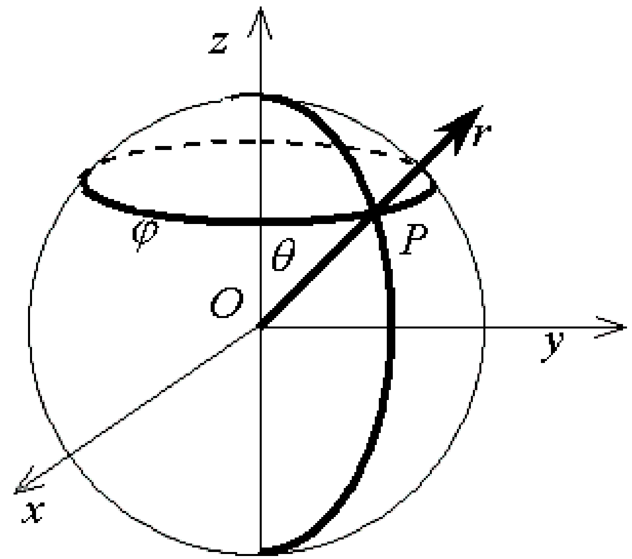
$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\varphi}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\varphi}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

✓ Autres systèmes de coordonnées

- Coordonnées curvilinéaires orthogonales

  exemples d'utilisation:
  - canevas de Wulf,
  - orientation des polymères (rayons X)

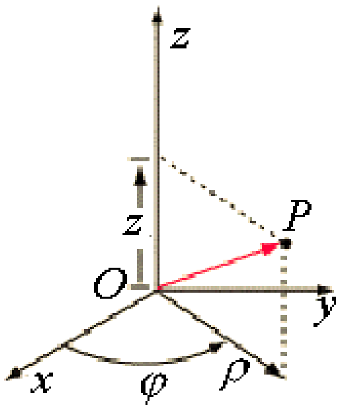


- Coordonnées polaires

$$\begin{cases} x = \rho\cos\phi \\ y = \rho\sin\phi \\ z = z \end{cases}$$

$$dv = \rho d\rho d\phi dz$$

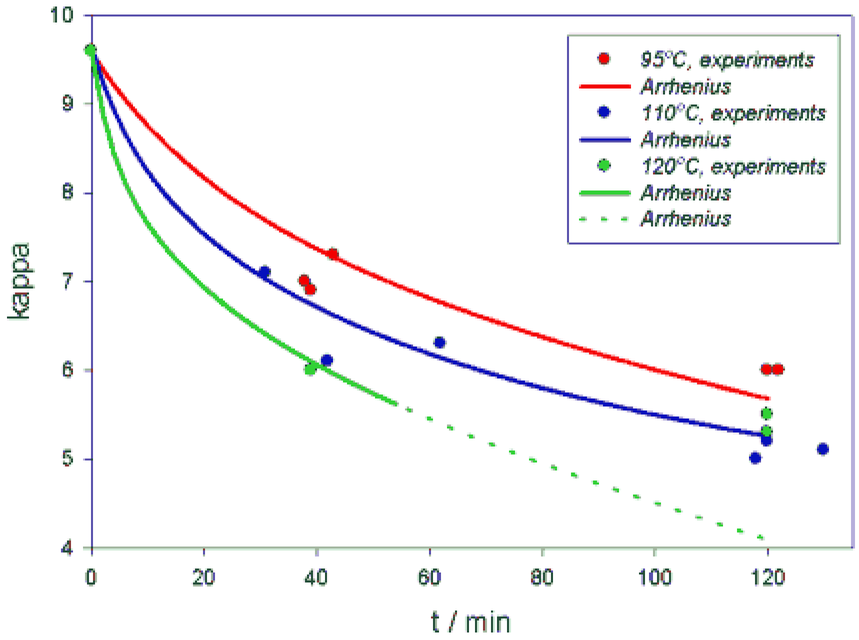
$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$



- Coordonnées elliptiques

Chapitre 11

Équations différentielles du 1er ordre



Arrhenius

Armand Soldera Automne 2004 (Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

✓ Principes

- Une équation différentielle est une équation qui contient des dérivées
- Exemple d'équations différentielles que vous allez retrouver durant le Bac.:
  - Cinétique du premier ordre: $\dfrac{dx}{dt} = kx$
  - Cinétique du deuxième ordre: $\dfrac{dx}{dt} = k(a-x)(b-x)$
  - Oscillateur harmonique: $\dfrac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$
  - Équation de Shrödinger: $-\dfrac{\hbar}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$
- Ordre d'une équation différentielle: ordre de la dérivée la plus élevée

✓ Solution d'une équation différentielle

$$f\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \ldots\right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \text{Trouver } y(x) \text{ qui satisfasse cette équation}$$

Il existe une solution générale (présence de la constante), et une solution particulière

– Forme générale d'une équation différentielle du premier ordre: $\frac{dy}{dx}=F(x,y)$

✓ Équations séparables

$$\frac{dy}{dx}=\frac{f(x)}{g(y)}$$

Écriture sous forme différentielle: $g(y)\,dy=f(x)\,dx$

$$\int g(y)\,dy=\int f(x)\,dx+C$$

– Transformation en une forme séparable

Soit une fonction homogène: $F(\lambda x,\lambda y)=\lambda^n F(x,y)$

Si fonction homogène de degré 0: $F(\lambda x,\lambda y)=F(x,y)$

Exemple: $F(x,y)=\frac{x^2+y^2}{xy}=\left(\frac{y}{x}\right)+\left(\frac{y}{x}\right)^{-1}=f\left(\frac{y}{x}\right)$

$$\frac{dy}{dx}=\frac{x^2+y^2}{xy}=\frac{d(xv)}{dx}=f(v)$$

✓ Équations linéaire du premier ordre

$$\frac{dy}{dx}+p(x)\,y=r(x)$$

Équation est dite homogène si $r(x)$=0, sinon elle est dite inhomogène

– Équation homogène

$$\frac{dy}{dx}+p(x)\,y=0$$

Séparation des variables, et intégration

$$\frac{dy}{y}=-p(x)\,dx$$

$$\ln y=-\int p(x)\,dx+C$$

$$y=A\exp\left(-\int p(x)\,dx\right)$$

(solution triviale: A=0)

– Équation inhomogène:

Soit: $F(x)=\exp\left(\int p(x)\,dx\right)$ alors $\dfrac{d}{dx}F(x)=F(x)\,p(x)$

D'où:

$$F(x)\,y=\int F(x)\,r(x)\,dx+C$$

$F(x)$: facteur intégrand

$$y=\frac{\int F(x)\,r(x)\,dx+C}{F(x)}$$

Chapitre 12

Équations différentielles du 2ème ordre. Coefficients constants

Schrödinger

Armand Soldera Automne 2004 (Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

✓ Principes

$$\frac{d^2y}{dx^2}+p(x)\frac{dy}{dx}+q(x)y=r(x)$$

coefficients

Si les coefficients sont constants, on parle d’équations linéaires

✓ Équations linéaires homogènes

$$\frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by=0$$

Il est toujours possible de trouver une solution de la forme: $e^{\lambda x}$

En fait il est toujours possible de trouver 2 solutions particulières $y_1(x)$ et $y_2(x)$

Remarque: $cy_1(x)$ est aussi une solution

De même, $y=c_1y_1+c_2y_2$ est aussi une solution.

C’est en fait le **Principe de superposition**, propriété importante des équation homogènes linéaires.

Si $y_1(x)$ et $y_2(x)$ sont linéairement dépendantes alors: $c_1y_1+c_2y_2=0$

✓ La solution générale

$$\frac{d^2y}{dx^2} + a\frac{dy}{dx} + by = 0$$

Solution: $y = e^{\lambda x}$

On obtient alors l'équation caractéristique, ou équation auxiliaire:

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0$$

1. Si le discriminant est positif, 2 racines réelles: $y(x) = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 e^{\lambda_2 x}$

2. Si le discriminant est nulle, racine réelle double: $y_1(x) = e^{\lambda_1 x} = e^{-ax/2}$

   En fait, il existe une seconde solution: $y_2(x) = xy_1(x) = xe^{-ax/2}$

   Donc la solution générale est: $y(x) = (c_1 + c_2 x)e^{-ax/2}$

3. Si le discriminant est négatif, 2 racines complexes: $y(x) = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 e^{\lambda_2 x}$

$$y(x) = e^{-ax/2}\left(c_1 e^{i\delta x} + c_2 e^{-i\delta x}\right)$$

$$y(x) = e^{-ax/2}\left[(c_1 + c_2)\cos\delta x + i(c_1 - c_2)\sin\delta x\right]$$

✓ Solutions particulières

$$y(x) = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 e^{\lambda_2 x}$$

2 conditions (données par le système d'étude) → 2 constantes

- Conditions initiales $y(x_0) = y_0 \qquad y'(x_0) = y_1$

par exemple, x → t

- Conditions limites $y(x_1) = y_1 \qquad y(x_2) = y_2 \qquad x \in [x_1, x_2]$
- Cas d'étude: $y'' + \omega^2 y = 0 \qquad \omega \in \mathbb{R}$

$$y(x) = c_1 e^{i\omega x} + c_2 e^{-i\omega x}$$

$$y(x) = d_1 \cos \omega x + d_2 \sin \omega x$$

Si ω est un paramètre à déterminer, une condition additionnelle est nécessaire (« particule dans une boîte » en quantique)

Si condition aux limites périodiques, alors $y(x+\lambda) = y(x)$

D'où:

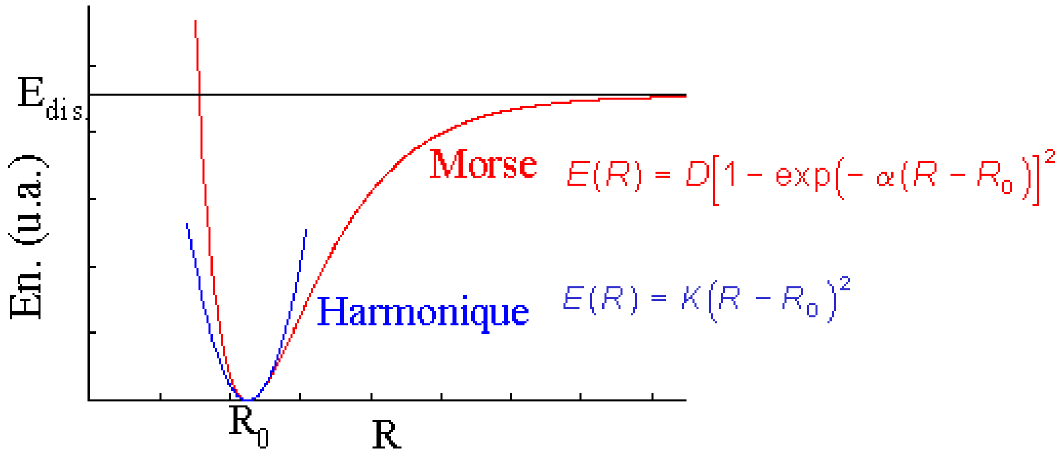
$$y(x+\lambda) = c_1 e^{i\omega x} e^{\omega\lambda} + c_2 e^{-i\omega x} e^{-\omega\lambda} = c_1 e^{i\omega x} + c_2 e^{-i\omega x} = y(x)$$

Soit, $e^{\lambda x} = e^{-\lambda x} = 1$ Donc $\omega\lambda = 2\pi n \qquad n \in \mathbb{Z}$

$$y_n(x) = c_1 e^{(2\pi n x/\lambda) i} + c_2 e^{-(2\pi n x/\lambda) i} \qquad n \in \mathbb{Z} \qquad y(x) = d_1 \cos \frac{2\pi n x}{\lambda} + d_2 \sin \frac{2\pi n x}{\lambda}$$

✓ Cas d'étude

- L'oscillateur harmonique
- La particule dans une boîte (uni-dimensionnelle)
- La particule confinée à un cercle



✓ Les équations linéaires inhomogènes

$$\frac{d^2y}{dx^2} + a\frac{dy}{dx} + by = r(x)$$

- La méthode des coefficients indéterminés

Soit une solution particulière $y_p(x)$

$$\frac{d^2y_p}{dx^2} + a\frac{dy_p}{dx} + by_p = r(x)$$

Soit la solution réduite $y_h(x)$

$$\frac{d^2y_h}{dx^2} + a\frac{dy_h}{dx} + by_h = 0$$

$$y(x) = y_h(x) + y_p(x)$$

Termes dans $r(x)$	**Choix de** $y_p(x)$
$ce^{\alpha x}$	$ke^{\alpha x}$
$cx^n \quad n \in \mathbb{N}$	$\sum_{i=0}^{n} a_i x^i$
$c\cos\omega x$ ou $c\sin\omega x$	$k\cos\omega x + l\sin\omega x$
$ce^{\alpha x}\cos\omega x$ // $ce^{\alpha x}\sin\omega x$	$e^{\alpha x}\left(k\cos\omega x + l\sin\omega x\right)$

Chapitre 13

Équations différentielles du 2ème ordre. Fonctions spéciales.

Hermite

Bessel

Legendre

✓ Principes

- L'appui des équations différentielles à la résolution de problèmes physiques a été primordiale (et le reste d'ailleurs: équation de Navier-Stokes en Mécanique des Fluides → toute l'aéronautique !)
- Équations les plus connues:

Nom	**Équation**
Legendre	$(1-x^2)y''-2xy'+l(l+1)y=0$
Hermite	$y''-2xy'+2ny=0$
Laguerre	$xy''+(m+1-x)y'+(n-m)y=0$
Bessel	$x^2y''+xy'+(x^2-n^2)y=0$

✓ Équation de Legendre

– Intervient quand un problème de physique n 3D est formulé en termes de coordonnées sphériques

$$\left(1-x^2\right)y''-2xy'+l\left(l+1\right)y=0$$

– Polynômes de Legendre

$$P_l\left(x\right)=\frac{1\cdot3\cdot5\ldots\left(2l-1\right)}{l!}\left\{x^l-\frac{l\left(l-1\right)}{2\left(2l-1\right)}x^{-l-2}+\ldots\right\}$$

$$P_0\left(x\right)=1 \qquad P_1\left(x\right)=x \qquad P_2\left(x\right)=\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right)$$

Les polynômes de Legendre satisfont la relation de récurrence:

$$\begin{cases}\left(l+1\right)P_{l+1}\left(x\right)-\left(2l+1\right)xP_l\left(x\right)+lP_{l-1}\left(x\right)=0\\ P_0\left(x\right)=1\\ P_1\left(x\right)=x\end{cases}$$

– Orthogonalité et normalisation

Orthogonalité: propriété des solutions d'une classe d'équations différentielles linéaires du deuxième ordre (équations de Sturm-Liouville)

$$\int_{-1}^{+1}P_l\left(x\right)P_{l'}\left(x\right)dx=0 \quad \text{quand} \quad l\neq l'$$

Les équations de Legendre sont orthogonales dans $-1\leq x\leq 1$

Fonctions de Legendre associées

$$\int_{-1}^{+1} P_l^{|m|}(x)\, P_{l'}^{|m|}(x)\, dx = 0 \quad \text{quand} \quad l \neq l'$$

$$\theta_{l,m} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x)$$

$$\int_{-1}^{+1} \theta_{l,m}(x)\,\theta_{l',m}(x)\, dx = \delta_{ll'} = \begin{cases} 1 & \text{si } \; l = l' \\ 0 & \text{si } \; l \neq l' \end{cases} \quad \text{Symbole de Kronecker}$$

- **Équation de Hermite**

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0$$

– Intervient dans la solution de l’équation de Schrödinger de l’oscillateur harmonique

$$H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-4)}{2!}(2x)^{n-4} + \ldots$$

$$H_0(x) = 1$$

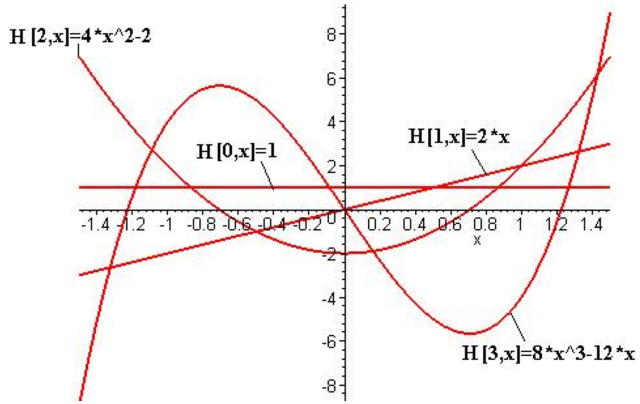
$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$\begin{cases} H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \\ H_0(x) = 1 \\ H_1(x) = 2x \end{cases}$$

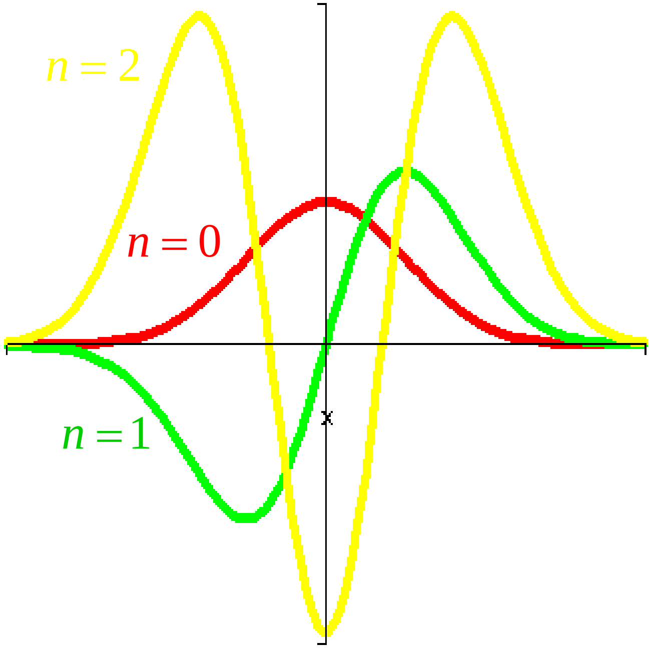
– Fonctions de Hermite

$$y''\left(1-x^2+2n\right)y=0$$



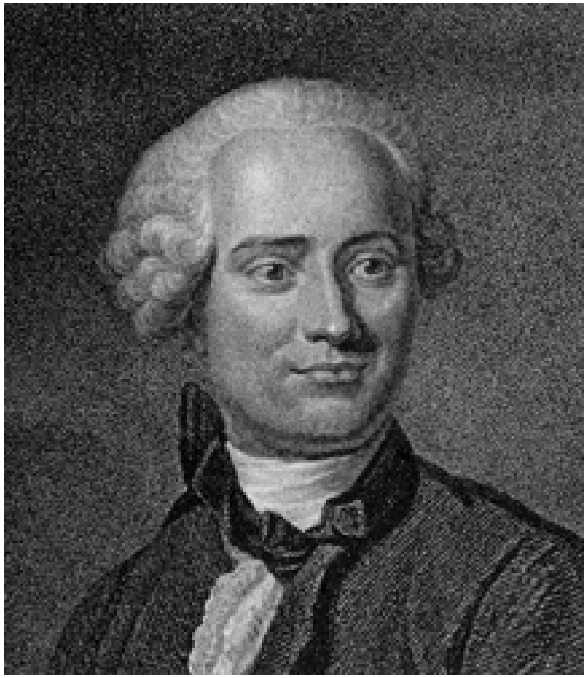
Fonctions de Hermite: solutions quantiques au problème de l'oscillateur harmoniqu

$$y_n\left(x\right)=e^{-x^2/2}H_n\left(x\right)$$



Chapitre 14

Équations différentielles partielles



d'Alembert

- **Principes**

  Équation qui contient des dérivées partielles $\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$ $\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$

  – Équation de diffusion 1D $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{D}\frac{\partial f}{\partial t}$

  – Équation de Laplace 3D $\nabla^2 f = 0$

  – Équation de Poisson 3D $\nabla^2 f = g(x,y,z)$

  – Équation de Schrödinger indépendante du temps $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,y,z)\psi = E\psi$

  – Équation de Schrödinger dépendante du temps $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,y,z)\psi = i\hbar\frac{\partial E}{\partial t}$

- **Solutions générales**

  – Équation d'une onde 1D $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$

  solution: $f(x,y) = F(x+vt)$

  solution générale: $f(x,y) = F(x+vt) + G(x-vt)$

✓ Séparation des variables

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}=0$$

Principe

$$f(x,y)=X(x)Y(y)$$

$$\left[\frac{1}{X(x)}\frac{dX(x)}{dx}\right]+\left[\frac{1}{Y(y)}\frac{dY(y)}{dy}\right]=0$$

$$\frac{1}{X(x)}\frac{dX(x)}{dx}=C \qquad \frac{1}{Y(y)}\frac{dY(y)}{dy}=-C$$

C est la constante de séparation

$$X(x)=Ae^{Cx},\quad Y(y)=Ae^{Cy}$$

$$f(x,y)=X(x)Y(y)=De^{C(x-y)}$$

✓ La particule dans une boîte rectangulaire

Cours de chimie quantique … CPH 308

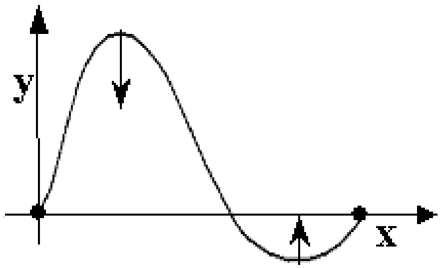
✓ La corde vibrante

– (Exemple: corde de guitare)

Longueur l, densité linéaire uniforme, ρ $y = y(x,t)$

Mouvement décrit par: $\dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \dfrac{1}{v^2}\dfrac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

Conditions limites et périodiques: $y(0,t) = y(l,t) = 0$



– Séparation des variables: $y(x,t) = F(x)G(t)$

$$\frac{1}{F}\frac{d^2F}{dx^2} = \frac{1}{Gv^2}\frac{d^2G}{dt^2} = -\lambda^2$$

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{l} \qquad F_n(x) = \sin\frac{n\pi x}{l}$$

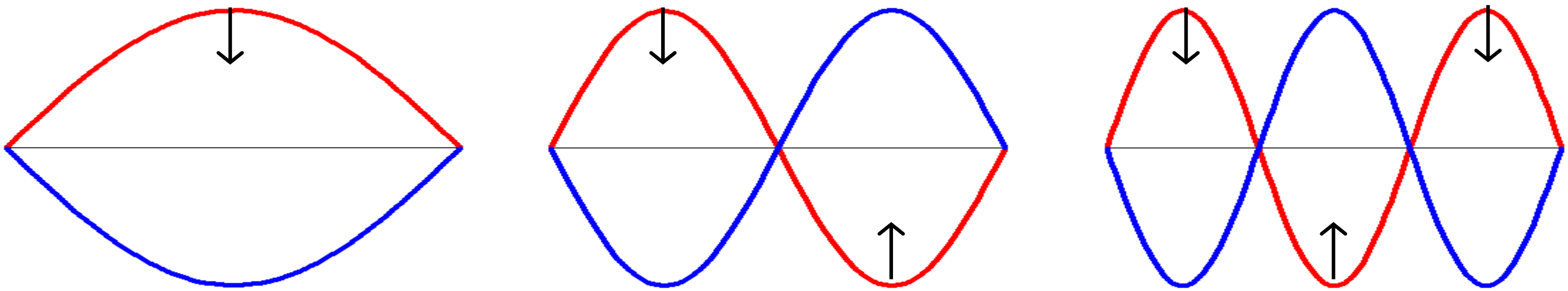
$$\frac{d^2F}{dx^2} + \omega_n^2 G = 0 \qquad \omega_n = \lambda_n v = \frac{n\pi v}{l} \qquad G_n(t) = A_n\cos\omega_n t + B_n \sin\omega_n t$$

Fonctions propres:
$$y_n(x,t) = \sin\frac{n\pi x}{l}\left[A_n\cos\omega_n t + B_n\sin\omega_n t\right]$$

Valeurs propres: $\omega_n = \dfrac{n\pi v}{l}$

– Modes normaux de mouvement

Le *n*ième mode normal de la corde vibrante: $\nu_n = \dfrac{\omega_n}{2\pi}$



n=1 ; la fondamentale *n=2* ; première harmonique *n=3* ; deuxième harmonique

Le *n*ième mode présente *n-1* nœuds: points où il n'y a aucun déplacement (*standing wave*)

– La solution complète

Le mouvement n'est pas un pure mode normal, mais une superposition de modes normaux.

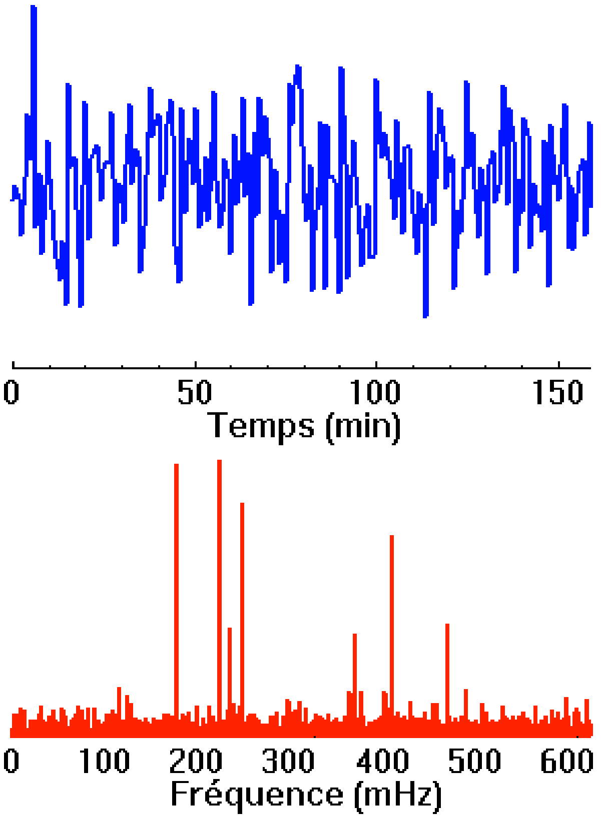
$$y_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\frac{n\pi x}{l}\left[A_n \cos\omega_n t + B_n \sin\omega_n t\right]$$

Cette solution satisfait les conditions initiales

$$y(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\frac{n\pi x}{l} \qquad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{t=0} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n\omega_n \sin\frac{n\pi x}{l}$$

Chapitre 15

Expansions Orthogonales. Analyse de Fourier.



Fourier

Armand Soldera Automne 2004 (Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

✓ Principes

- Une fonction peut présenter une expansion en série de MacLaurin, si la fonction et sa dérivée existent en $x=0$, et dans l'intervalle considéré.

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots = \sum_{l=0}^{\infty} a_l x^l$$

ou

$$f(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + a_3 g_3(x) + \ldots = \sum_{l=0}^{\infty} a_l g_l(x)$$

L'ensemble de ces fonctions d'importance particulière: fonctions orthogonales

- Importance primordiale → CPH 316, Méthodes de la chimie physique

✓ Expansions orthogonales

$$f(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x) + \ldots = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(x)$$

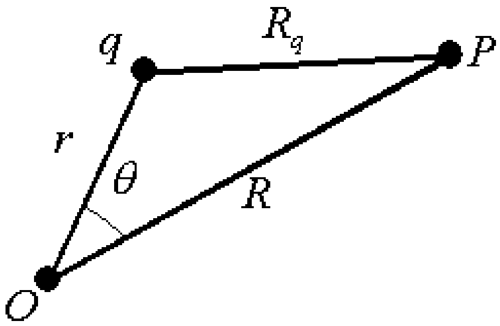
✓ Expansion en polynômes de Legendre

$$\left(1 - 2xt + t^2\right)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(x) \qquad x \in [-1,1]$$

$$P_0(x) = 1 \qquad P_1(x) = x \qquad P_2(x) = \frac{1}{2}\left(3x^2 - 1\right) \qquad P_3(x) = \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right)$$

– Expansion du potentiel électrostatique

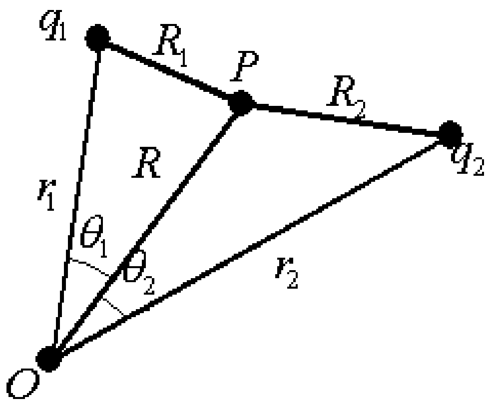
$$V = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o R_q}$$



$$V = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o R}\left[1 - 2\left(\frac{r}{R}\right)\cos\theta + \left(\frac{r}{R}\right)\right]^{-1/2}$$

$$V = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o R}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r}{R}\right)^{l} P_l\left(\cos\theta\right)$$

$$V = \sum_{i=1}^{n}\frac{q_i}{4\pi\varepsilon_o R_i}$$



$$V = \sum_{i=1}^{n}\frac{q_i}{4\pi\varepsilon_o R_i}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_i}{R}\right)^{l} P_l\left(\cos\theta_i\right)$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{R^{l+1}}\left[\sum_{l=0}^{\infty} q_i r_i^l P_l\left(\cos\theta_i\right)\right]$$

$$Q_i = \sum_{l=0}^{\infty} q_i r_i^l P_l\left(\cos\theta_i\right)$$ Moments multipolaires

✓ Séries de Fourier

Expansion en termes de fonctions trigonométriques

$$\cos nx \quad n \in \mathbb{N}$$
$$\sin nx \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Intervalle d'étude: $-\pi \leq x \leq \pi$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos mx \cos nx dx = 0 \quad m \neq n$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin mx \sin nx dx = 0 \quad m \neq n$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos mx \sin nx dx = 0 \quad \forall m, n$$

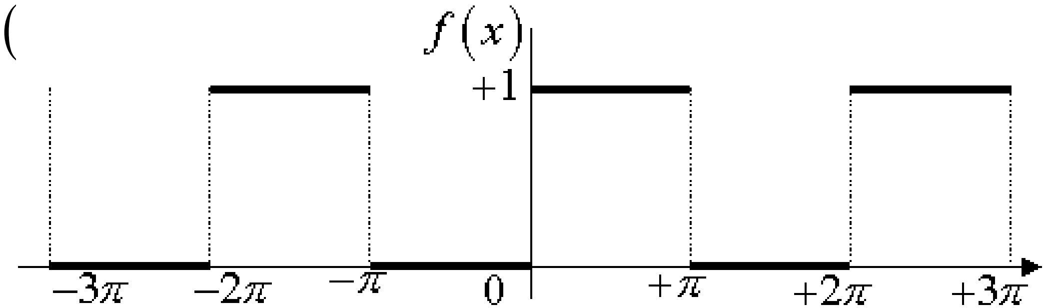
$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos nx \cos nx dx = \begin{cases} 2\pi & \text{si } n = 0 \\ \pi & \text{si } n > 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin nx \sin nx dx = \pi \qquad \text{si } n > 0$$

– Les séries de Fourier s'écrivent habituellement: $f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx)$

Coefficients de Fourier $\quad a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos nx dx \qquad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin nx dx$

– Périodicité $f(x+2\pi) = f($



Cas d'étude

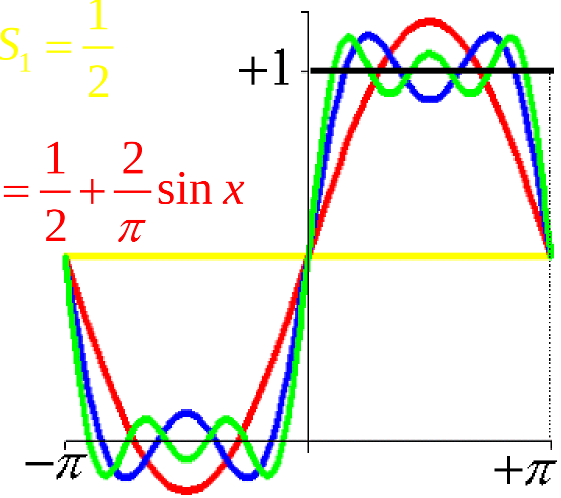
$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{pour } x \in]0, \pi[\\ 0 & \text{pour } x \in]-\pi, 0[\end{cases}$$

– Changement de période

$$f(x) = f\left(\frac{\pi z}{l}\right) = g(z)$$

alors:

$$f(x+2\pi) = f\left(\frac{\pi}{l}(z-2l)\right) = g(z+2l)$$



$$S_1 = \frac{1}{2}$$

$$S_2 = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\sin x$$

$$S_3 = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\left(\sin x + \frac{\sin 3x}{3}\right)$$

$$S_4 = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\left(\sin x + \frac{\sin 3x}{3} + \frac{\sin 5x}{5}\right)$$

Donc une fonction périodique en *x* de période *2l*

$$f(x) = f(x+2l)$$

peut être étendue en séries de Fourier:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{n\pi x}{l} + b_n \sin\frac{n\pi x}{l}\right)$$

$$a_n = \frac{1}{l}\int_{-l}^{+l} f(x)\cos\frac{n\pi x}{l}dx \qquad b_n = \frac{1}{l}\int_{-l}^{+l} f(x)\sin\frac{n\pi x}{l}dx$$

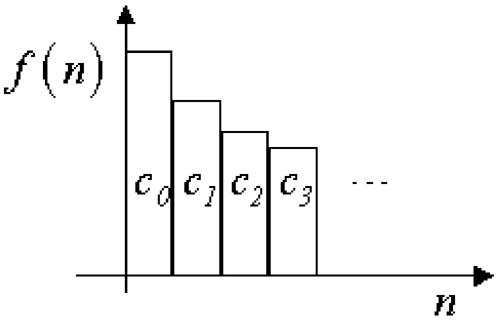
✓ Transformées de Fourier

– De nombreuses applications en sciences physiques ne présentent pas un caractère périodique

Principe de l'analyse de Fourier: largeur de l'intervalle de base devient infiniment large, et la transformation des séries de Fourier en intégrales infinies: Intégrale de Fourier, ou Transformation de Fourier

– Intervalle infini

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{n\pi x}{l} + b_n \sin\frac{n\pi x}{l}\right)$$



soit:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta n$$

Substitution:

$$y_n = \frac{\pi}{l} n \qquad \delta y_n = \frac{\pi}{l}\delta n$$

$$f(x) = \frac{l}{\pi}\left\{\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{n\pi x}{l} + b_n \sin\frac{n\pi x}{l}\right)\right\}\delta y_n$$

ou

$$f(x) = \left\{\frac{u(y_0)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(u(y_n)\cos xy_n + v(y_n)\sin xy_n\right)\right\}\delta y_n$$

$$u\left(y_n\right)=\frac{la_n}{\pi}=\frac{1}{\pi}\int_{-l}^{+l} f\left(x\right)\cos xy_n dx \qquad v\left(y_n\right)=\frac{lb_n}{\pi}=\frac{1}{\pi}\int_{-l}^{+l} f\left(x\right)\sin xy_n dx$$

$$f\left(x\right)=\lim_{x\to\infty}\sum_{n=0}^{\infty} F\left(y_n\right)\delta y_n=\int_0^{\infty} F\left(y\right)dy$$

Intégrale de Fourier

$$f\left(x\right)=\int_0^{\infty}\left[u\left(y\right)\cos xy+v\left(y\right)\sin xy\right]dy$$

$$u\left(y\right)=\int_{-\infty}^{+\infty} f\left(x\right)\cos xy\, dx \qquad v\left(y\right)=\int_{-\infty}^{+\infty} f\left(x\right)\sin xy\, dx$$

Grâce aux relations d'Euler, on a:

$$f\left(x\right)=\int_0^{\infty} w\left(y\right)e^{ixy}dy$$

$$w\left(y\right)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty} f\left(x\right)e^{-ixy}dx$$

Ceci peut être réécrit sous une forme plus conventionnelle: …

– Paires de transformées de Fourier

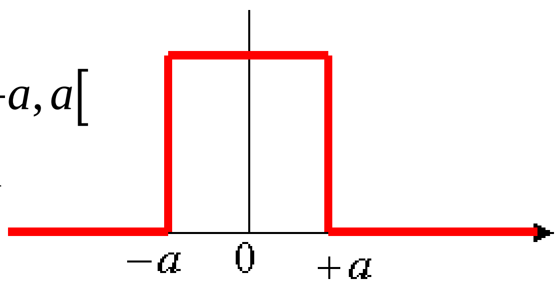
transformée de Fourier inverse $$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty} g(y)e^{ixy}dx$$

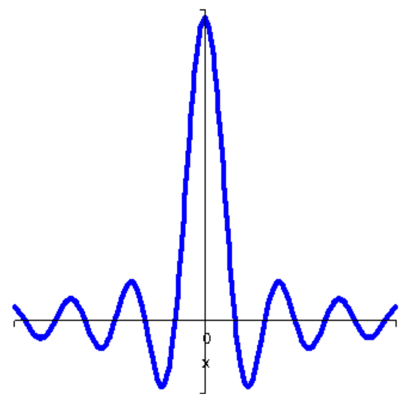
transformée de Fourier $$g(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty} f(x)e^{-ixy}dx$$

x et y: variables conjuguées

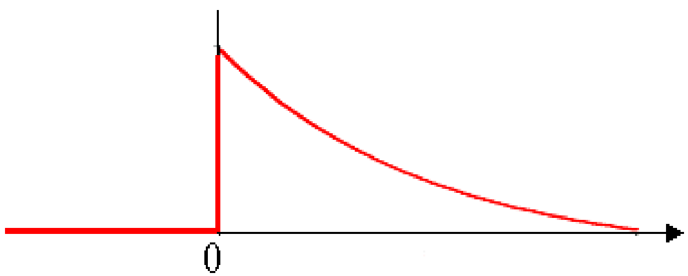
Pour que la transformée de Fourier existe, il faut que l'intégrale suivante existe $\int_0^{\infty}\left|f(x)\right|dx$

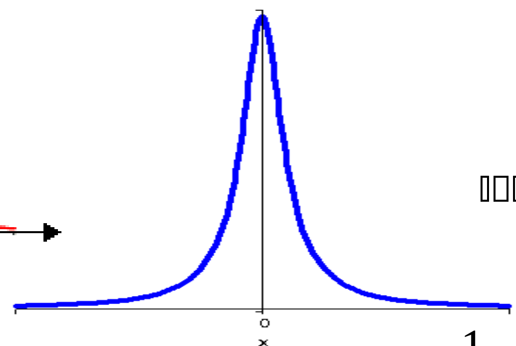
$$f(x)=\begin{cases}A & x\in\left]-a,a\right[\\ 0 & \text{sinon}\end{cases}$$

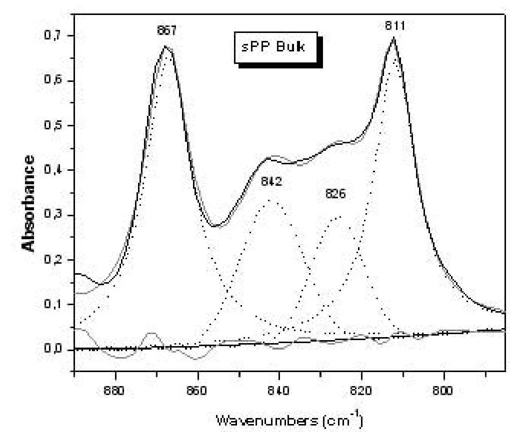




$$g(y)=\frac{2Aa}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{\sin ay}{ay}\right)$$







$$f(x)=e^{-ax}\qquad x>0; a>0$$

$$\Re eg(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{a^2+y^2}\right)$$

Chapitre 16

Les Vecteurs

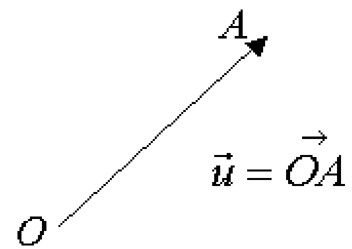
Grassmann

Chasles

✓ Principes

– Un vecteur est défini par:

- Sa norme $\left\|\vec{u}\right\|$
- Sa direction
- Son sens



✓ Algèbre vectorielle

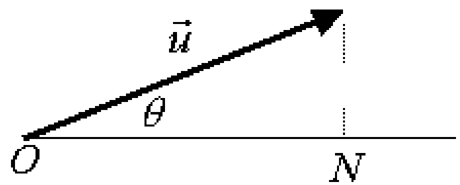
– Égalité, addition, soustraction

– Multiplication scalaire

vecteur unitaire: $\hat{u} = \dfrac{\vec{u}}{\left\|\vec{u}\right\|}$

Loi de Chasles $\mathbf{OB} = \mathbf{OA} + \mathbf{AB}$

✓ Composantes des vecteurs



$$\vec{u} = \left\|\vec{u}\right\| \cos\theta$$

$$\left\|\vec{u}\right\| = x^2 + y^2$$

Théorème de Pythagore dans le RON $\left(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\right)$

$$\vec{u} = \left(x, y, z\right) = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

$$\left\|\vec{u}\right\| = x^2 + y^2 + z^2$$

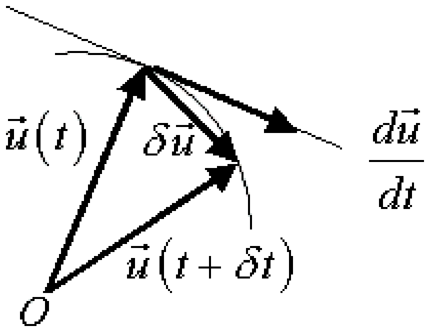
Centre de Masse
$$\mathbf{OG} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} m_i} \sum_{i=1}^{N} m_i \vec{r}_i$$
$$= \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{OA}_i}{M}$$

– Différentiation scalaire d'un vecteur

$$\delta\vec{u} = \vec{u}\left(t+\delta t\right) - \vec{u}\left(t\right)$$

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \lim_{\delta t \to 0} \frac{\delta \vec{u}}{\delta t}$$

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{dx}{dt}\vec{i} + \frac{dy}{dt}\vec{j} + \frac{dy}{dt}\vec{k}$$



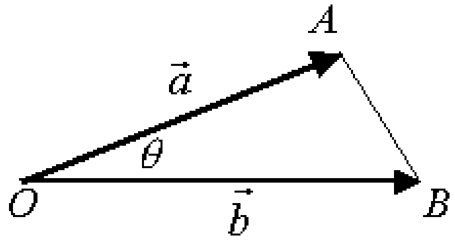
Si correspond à la vitesse → composantes tangentielle et normale →

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{dv}{dt}\vec{e}_t + \frac{v^2}{R}\vec{e}_t$$

✓ Produit scalaire

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = \|\vec{a}\|\|\vec{b}\|\cos\theta = ab\cos\theta$$

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$$



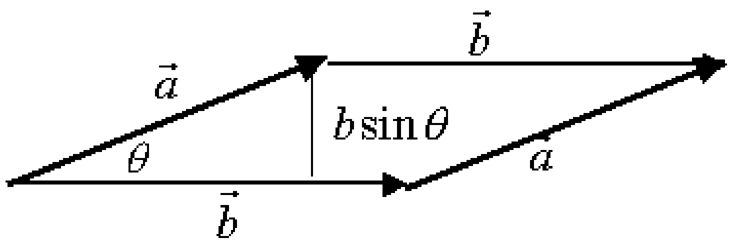
Deux vecteurs sont dits orthogonaux si: $\vec{a}\cdot\vec{b} = 0$

Le produit scalaire est commutatif

$$\vec{a}\cdot\vec{a} = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = \|\vec{a}\|^2$$

$$\vec{u},\vec{v} = \vec{i},\vec{j},\vec{k} \qquad \vec{u}\cdot\vec{v} = \delta_{\vec{u}\vec{v}}$$

✓ Produit vectoriel



$$\vec{v} = \vec{a}\times\vec{b} = \vec{a}\wedge\vec{b} = ab\sin\theta$$

$$\vec{a}\times\vec{b} = -\vec{b}\times\vec{a}$$

Si $\vec{a}$ et $\vec{b}$ sont parallèles

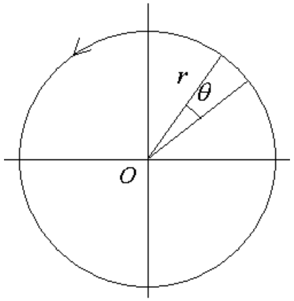
$$\vec{a}\times\vec{b} = \vec{0}$$

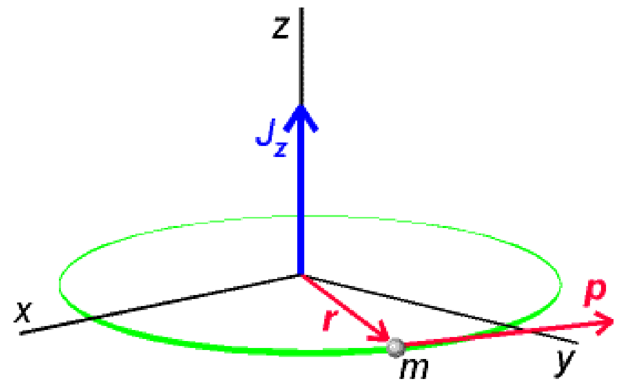
$$\vec{a}\times\vec{b} = \left(a_y b_z - a_z b_y\right)\vec{i} + \left(a_z b_x - a_x b_z\right)\vec{j} + \left(a_x b_y - a_y b_z\right)\vec{k}$$

$$= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix}$$

– Exemple d'utilisation du produit vectoriel: vitesse angulaire et moment angulaire

- Vitesse angulaire

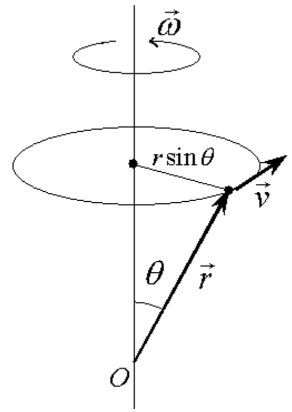




$$\omega = \frac{d\theta}{dt}$$

$$v = \omega r$$

$$\vec{v} = \vec{\omega} \times \vec{r}$$



- Moment angulaire

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$l = mr^{r}\omega = I\omega$$ *I*: moment d'inertie

$$\vec{l} = \mathbf{I}\vec{\omega}$$

- Conservation du moment angulaire

$$\mathcal{M} = \frac{d\vec{l}}{dt}$$

✓ Champs scalaire et vecteur

- Champ scalaire: $f = f\left(\vec{r}\right) = f\left(x, y, z\right)$
- Champ vecteur: $\vec{v} = \vec{v}\left(\vec{r}\right) = f\left(x, y, z\right)$

✓ Le gradient d'un champ scalaire

$$\overrightarrow{grad}\ f = \frac{\partial f}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\vec{k}$$

Opérateur nabla

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

$$\vec{\nabla} f = \overrightarrow{grad}\ f = \left[\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\right] f$$

$$= \frac{\partial f}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\vec{k}$$

Force: $\vec{F} = -\vec{\nabla} V$

$\vec{\nabla}$ est la généralisation des dérivées ordinaires, et peut être écrit: $\nabla = \dfrac{d}{dr}$

✓ Divergence et rotationnel (curl) d'un champ vecteur

– Divergence:

$$div\vec{v} = \vec{\nabla}\cdot\vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

Si le champ vecteur est le gradient d'un champ scalaire $\vec{v} = \vec{\nabla} f$

$$div\vec{v} = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

$\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \nabla^2 = \Delta$: opérateur Laplacien

$\nabla^2 f = 0$ pas de flux net en dehors de l'élément de volume autour du point considéré

– Rotationnel $\overrightarrow{rot}\,\vec{v} = \overrightarrow{curl}\,\vec{v} = \vec{\nabla}\times\vec{v}$

$$= \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z}\right)\vec{i} + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x}\right)\vec{j} + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}\right)\vec{k}$$

$$= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ v_x & v_y & v_z \end{vmatrix}$$

– Propriétés

$$\vec{rot}\left(\vec{grad}\ f\right)=0 \qquad div\left(\vec{rot}\,\vec{v}\right)=0$$

– Explications physiques
  - Théorème de Gauss-Ostrogradski: théorème de la divergence

    Flux total sortant d'une surface:

$$\phi_{tot}=\int_{Surface}\vec{E}\cdot d\vec{s}=\int_{Volume}div\vec{E}$$

  - Théorème de Stokes: théorème du rotationnel

$$\oint_C \vec{E}\cdot d\vec{l}=\int_{Surface}\vec{rot}\,\vec{E}\cdot d\vec{s}$$

La circulation d'un champ vectoriel le long d'une courbe fermée quelconque est égale au flux du rotationnel de ce champ à travers la surface limitée par la courbe fermée.

✓ Espaces vectoriels

De 3D, on passe à un espace à *n* dimensions

On utilise les mêmes opérations que précédemment, mais à présent on travaille dans un espace euclidien à *n* dimensions $\mathbb{R}^n$

Chapitre 17

Les Déterminants

Cauchy

Slater

✓ Principes

– Comment résoudre un système à *n* équations linéaires ?

– Généralisation à *n* dimensions …

– Résolution d'une paire d'équations:

$$(1) \qquad a_1 x + b_1 y = c_1$$

$$(2) \qquad a_2 x + b_2 y = c_2$$

$$x = \frac{b_2 c_1 - b_1 c_2}{a_1 b_2 - a_2 b_1} \qquad\qquad y = \frac{a_1 c_2 - a_2 c_1}{a_1 b_2 - a_2 b_1}$$

Dénominateur → **déterminant**

$$D = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = a_1 b_2 - a_2 b_1$$

$$x = \frac{D_1}{D} \quad D_1 = \begin{vmatrix} c_1 & b_1 \\ c_2 & b_2 \end{vmatrix} \qquad\qquad y = \frac{D_2}{D} \quad D_2 = \begin{vmatrix} a_1 & c_1 \\ a_2 & c_2 \end{vmatrix}$$

– Généralisation

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = |a_{ij}|$$

✓ Déterminants d'ordre 3

$$
\begin{aligned}
&(1) \qquad a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z = b_1 \\
&(2) \qquad a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z = b_2 \\
&(3) \qquad a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z = b_3
\end{aligned}
$$

$$
D_1 = \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \quad \ldots
$$

– Mineurs et cofacteurs

- Mineur

$$
\begin{vmatrix} \cancel{a_{11}} & a_{12} & a_{13} \\ \cancel{a_{21}} & \cancel{a_{22}} & \cancel{a_{23}} \\ \cancel{a_{31}} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = M_{21}
$$

$$
\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}M_{11} - a_{21}M_{21} + a_{31}M_{31}
$$

Signe: $(-1)^{i+j}$

- Cofacteur:

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$$

Expansion de Laplace du déterminant:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} C_{ij}$$

Remarque: quand *n* devient grand, il est difficile de résoudre des équations linéaires aussi facilement, cela implique beaucoup de calculs …

✓ La solution d'équations linéaires

– Règle de Cramer: $x_i = \dfrac{D_i}{D}$

– Cas où $D=0$

$$(1) \qquad 2x + 2y + z = 10$$

$$(2) \qquad x + 2y - 2z = -3$$

$$(3) \qquad 3x + 2y + 4z = 20$$

Les équations sont linéairement dépendantes

$$x = 13 - 3z \qquad y = \frac{1}{2}(5z - 16)$$

– Équations homogènes

Quand tous les b_i sont égaux à 0, les équations sont dites homogènes.

Il suffit qu'un b_i soit différent de 0, pour que le système d'équations soit dit inhomogène.

équation homogène: $x_1 = x_2 = \ldots = x_n = 0 \quad \text{si} \ \ D \neq 0$

Si $D = 0$; soit une solution triviale (comme dans le cas précédent), ou une solution non-triviale.

Une solution unique est alors trouvée s'il existe une autre relation entre les variables.

– Équations séculaires

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= \lambda x_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= \lambda x_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n &= \lambda x_n \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} (a_{11} - \lambda)x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + (a_{22} - \lambda)x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= 0 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + (a_{nn} - \lambda)x_n &= 0 \end{aligned}$$

Ces équations séculaires ont une solution non triviale si le déterminant séculaire est nul:

$$\begin{vmatrix} (a_{11} - \lambda) & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & (a_{22} - \lambda) & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & (a_{nn} - \lambda) \end{vmatrix} = 0$$

Polynôme d'ordre n en λ → valeurs de λ sont les n racines du polynôme

Applications: Hückel, vibrations IR

✓ Propriétés des déterminants

1. Transposition

   La valeur d'un déterminant est inchangée si ses lignes et colonnes sont interchangées:

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix}$$

2. Multiplication par une constante:

$$\begin{vmatrix} \lambda a_1 & \lambda b_1 & \lambda c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \lambda \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix}$$

3. Ligne ou colonne de 0

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = 0$$

4. Règle d'addition:

$$\begin{vmatrix} a_1+d_1 & b_1 & c_1 \\ a_2+d_2 & b_2 & c_2 \\ a_3+d_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} d_1 & b_1 & c_1 \\ d_2 & b_2 & c_2 \\ d_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix}$$

5. Interchanger 2 lignes (ou colonnes): antisymétrie

   Si 2 lignes (ou 2 colonnes) d'un déterminant sont interchangées, la valeur du déterminant est multipliée par (-1)

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = -\begin{vmatrix} a_2 & b_2 & c_2 \\ a_1 & b_1 & c_1 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix}$$

6. Égalité entre 2 lignes ou 2 colonnes:

   Dû à l'antisymétrie

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_1 & b_1 & c_1 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = 0$$

7. Proportionnalité entre lignes (ou colonnes)

$$\begin{vmatrix} \lambda a_2 & \lambda b_2 & \lambda c_2 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \lambda \begin{vmatrix} a_2 & b_2 & c_2 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = 0$$

8. La valeur du déterminant reste inchangée si un multiple d'une ligne (ou colonne) est additionné à une autre ligne (ou colonne)

$$\begin{vmatrix} a_1 + \lambda a_2 & b_1 + \lambda b_2 & c_1 + \lambda c_2 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix}$$

9. Dérivé d'un déterminant

$$\frac{d}{dx}\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{da_1}{dx} & \frac{db_1}{dx} & \frac{dc_1}{dx} \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ \frac{da_2}{dx} & \frac{db_2}{dx} & \frac{dc_2}{dx} \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ \frac{da_3}{dx} & \frac{db_3}{dx} & \frac{dc_3}{dx} \end{vmatrix}$$

✓ Réduction à une forme diagonale

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33}\dots a_{nn}$$

Tout déterminant peut être réduit sous une forme diagonale

✓ Fonctions alternatives

– Fonction alternative ou antisymétrique

$$f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = -f(x_2, x_1, x_3, \dots, x_n)$$

$$f(x_1, x_1, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$\begin{vmatrix} f_1(x_1) & f_1(x_2) & \dots & f_1(x_n) \\ f_2(x_1) & f_2(x_2) & \dots & f_1(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_n(x_1) & f_n(x_2) & \dots & f_n(x_n) \end{vmatrix}$$

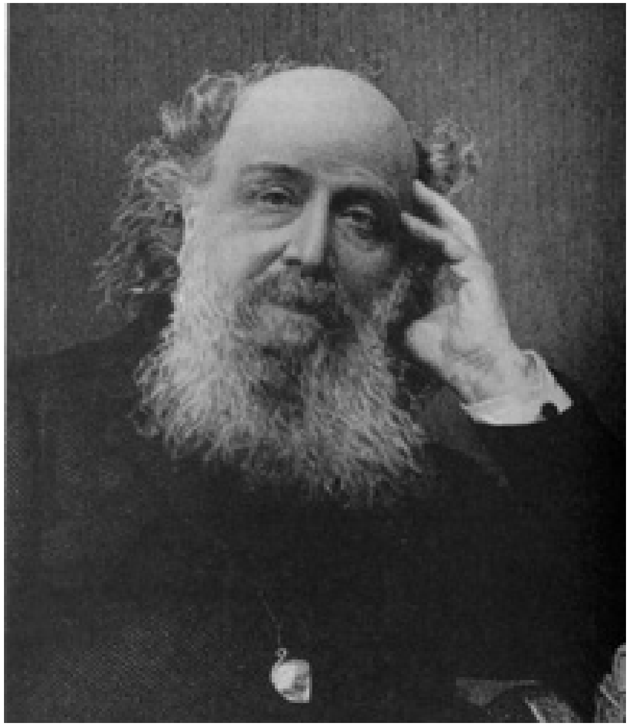
$n!$ permutations

Particules identiques: fermions, bosons

Déterminant de Slater

Chapitre 18

Les matrice et les transformations linéaires



Sylvester

Cayley

✓ Principes

– Une des applications importantes des matrices en chimie: transformation linéaire lors de la représentation matricielle d'opérations de symétrie dans la description de la symétrie des propriétés d'une molécule, de ces fonctions d'onde, des modes normaux de vibration, …

– Une matrice: $m \cdot n$ quantités

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} = \left(a_{ij}\right) = \left[a_{ij}\right]$$

– Origine: transformation linéaire

Changement de coordonnées de (x,y) à (x',y')

$$x' = a_1 x + b_1 y$$
$$y' = a_2 x + b_2 y$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Soit $\mathbf{r}' = \mathbf{A}\mathbf{r}$

$\mathbf{r}'$ $\mathbf{r}$ colonnes matrices (vecteurs)

$\mathbf{A}$ matrice carrée

✓ Matrices spéciales

– Matrice carrée

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

termes de la diagonale: a_{ii}

termes hors-diagonale (termes croisés) $a_{ij} \quad i \neq j$

Matrice diagonale $\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}$

Matrice unité: $\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Déterminant d'une matrice: $|\mathbf{A}| = \det \mathbf{A} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$

Trace d'une matrice: $\mathrm{tr}\mathbf{A} = a_{11} + a_{22} + \ldots + a_{nn} = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$

– Vecteurs

Une matrice colonne: vecteur colonne

Une matrice ligne: vecteur ligne

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

– Transposé d'une matrice:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \\ a_3 & b_3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A}^t = \tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{pmatrix}$$

- Si la matrice est symétrique, $\mathbf{A}^t = \mathbf{A}$
- Déterminant: $\det \mathbf{A}^t = \det \mathbf{A}$

✓ Algèbre matriciel

– Égalité des matrices $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right) \quad \mathbf{B} = \left(b_{ij}\right)$

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} \quad \text{si } \mathrm{a}_{ij} = b_{ij} \quad \forall i, j$$

– Addition de matrices: $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \left(a_{ij} + b_{ij}\right)$

– Multiplication par un scalaire $c\mathbf{A} = \left(ca_{ij}\right)$

– Multiplication de matrices $\mathbf{C} = \mathbf{AB} = \left(c_{ij}\right)$

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{AB} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a_{i1}} & \mathbf{a_{i2}} & \dots & \mathbf{a_{in}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & \mathbf{b_{1j}} & \dots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & \mathbf{b_{2j}} & \dots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & \mathbf{b_{nj}} & \dots & b_{ip} \end{pmatrix}$$

n

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1j} & \dots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2j} & \dots & c_{2p} \\ \dots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{j1} & c_{j2} & \ddots & \mathbf{c_{ij}} & \dots & c_{jp} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \dots & c_{mj} & \dots & c_{mp} \end{pmatrix}$$

– Propriétés de la multiplication de matrices

- Associativité $\mathbf{A}(\mathbf{BC}) = (\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{ABC}$
- Loi de distribution: $\mathbf{A}(\mathbf{B}+\mathbf{C}) = \mathbf{AB}+\mathbf{AC}$
- Non-Commutativité (en général): $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$

  Commutateur: $[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$
- Multiplication par matrice unité: $\mathbf{I}_m\mathbf{A} = \mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{I}_n$
- Produit nul: $\mathbf{AB} = 0$ n'implique pas qu'une des matrices soit nulle
- Déterminant d'un produit de matrices: $\det\mathbf{AB} = \det\mathbf{A}\cdot\det\mathbf{B} = \det\mathbf{BA}$

  matrices carrées
- Trace d'un produit de matrices: $\mathrm{tr}\mathbf{AB} = \mathrm{tr}\mathbf{BA}$
- Transposé d'un produit de matrices: $(\mathbf{AB})^t = \mathbf{B}^t\mathbf{A}^t$

✓ Matrice inverse

– Soient 2 matrices carrées, **A** et **B**, alors **B** est la matrice inverse de **A** (et inversement) si:

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

`

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

A est dire matrice non-singulière

– Procédure générale d'obtention d'une de l'inverse d'une matrice non-singulière

1. Obtention de la matrice des cofacteurs: $\mathbf{A} = (a_{ij}) \rightarrow (C_{ij})$

2. Transposition de cette matrice: $(C_{ij}) \rightarrow \hat{\mathbf{A}} = (C_{ji})$

   Obtention de la matrice adjointe $\hat{\mathbf{A}}$

3. Division de la matrice adjointe par le déterminant: $\mathbf{A}^{-1} = \dfrac{\hat{\mathbf{A}}}{\det \mathbf{A}}$

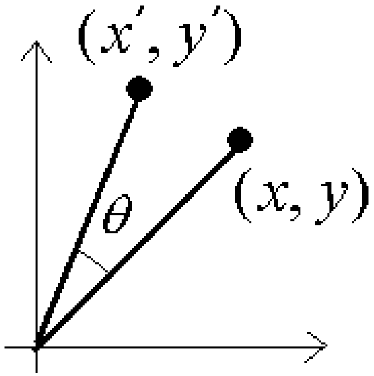
– Inverse du produit de matrices: $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$

✓ Transformations linéaires

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

– $\mathbf{A}$ est la matrice de transformation

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$



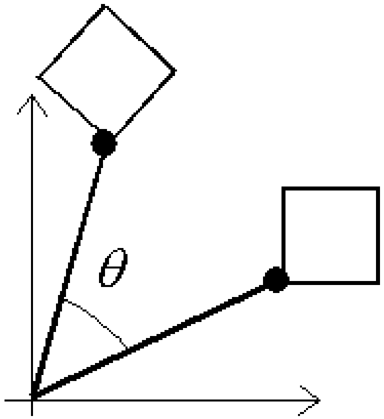
– Si 2 transformations

$$\mathbf{x}'' = \mathbf{B}\mathbf{x}'$$

$$\mathbf{x}'' = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{C}\mathbf{x}$$

– Transformation de matrices

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A}\mathbf{X}$$



$$(x, y) = (2,1), (3,1)(3,2)(2,2)$$

$$\theta = \frac{\pi}{4}$$

$$(x', y')\ ?$$

✓ Matrice orthogonale

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{t}$$

– Exemple:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

– Les colonnes (et les lignes) forment alors un système de vecteurs orthonormés

– Transformations orthogonales

Le produit scalaire des vecteurs est préservé.

Exemple: transformation du carré → la taille et la forme ont été préservés

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

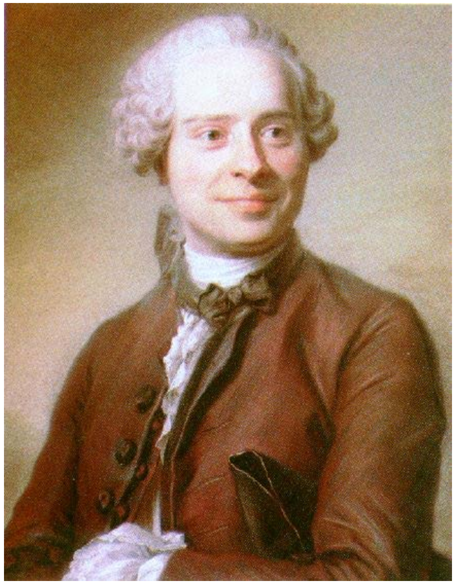
✓ Opérations de symétrie

– RDV cours de spectroscopie CPH 408

Chapitre 19

Les matrices et le problème aux valeurs propres

Frobenius



d'Alembert

✓ Principes

Détermination des valeurs propres et vecteurs propres d'une matrice carrée: problème aux valeurs propres: Importance majeure en sciences physiques

✓ Systèmes d'équations linéaires

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$$

Si $\det \mathbf{A} \neq 0$, i.e. **A** n'est pas singulière, alors:

$$\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{Ax}) = (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{x} = \mathbf{Ix} = \mathbf{x}$$

Soit:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$$

ce qui est équivalent à la règle de Cramer

Dans le cas homogène: $\mathbf{Ax} = 0$

si **A** n'est pas singulière, $\mathbf{x} = 0$

si **A** est singulière, solution triviale (**x**=0), ou autres solutions …

✓ Problème aux valeurs propres

– Soit l'équation associée à une matrice carrée: $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$

Celle-ci peut se réécrire: $\left(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\right)\mathbf{x} = \mathbf{0}$

Nous obtenons alors les équations séculaires, et donc:

déterminant séculaire (ou caractéristique) de **A** $\det\left(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\right) = \mathbf{0}$

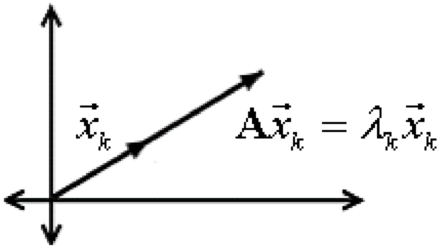
Les valeurs de λ pour lesquelles l'équation aux valeurs propres présentent des solutions non nulles, sont les **valeurs propres *(eigenvalue)*** de la matrice **A**.

Une matrice d'ordre *n* a *n* valeurs propres, qui forment ainsi le spectre de valeurs propres de **A**.

En général, 2, ou davantage, valeurs propres sont égales → valeurs propres **dégénérées**.

À λ_k , correspond une solution: $\mathbf{x}_k$ appelée **vecteur propre**

$$\mathbf{Ax}_k = \lambda_k\mathbf{x}_k$$



2 matrices d'importance dans les sciences physiques

- Matrices symétriques réelles
- Matrices d'Hermite complexes , il n'y a que des valeurs propres distincts, i.e. non-dégénérées.

Les valeurs propres obtenues sont réelles.

– Propriétés des vecteurs propres

- Propriété 1:

  *Si **x** est un vecteur propre correspondant à une valeur propre, λ, alors k**x** est aussi un vecteur propre correspondant à la même valeur propre.*

- Propriété 2:

  *Si **A** est une matrice symétrique (réelle), les vecteurs propres correspondant à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.*

- Propriété 3:

  Pour une matrice symétrique, les vecteurs propres correspondant à la même valeur propre sont soit orthogonaux, peuvent le devenir.

- Théorème:

  Les n vecteurs propres d'une matrice symétrique réelle d'ordre n forment (ou peuvent former) un système de n vecteurs unités orthogonaux (i.e. orthonormés).

$$\mathbf{x}_k^t \mathbf{x}_l = \delta_{kl}$$

✓ Diagonalisation de matrice

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_k = \lambda_k \mathbf{x}_k \qquad k \in \mathbb{N}^*$$

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \dots & x_{mn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{AX} &= \begin{pmatrix} \mathbf{Ax}_1 & \mathbf{Ax}_2 & \dots & \mathbf{Ax}_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1\mathbf{x}_1 & \lambda_2\mathbf{x}_2 & \dots & \lambda_n\mathbf{x}_n \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{XD} \end{aligned}$$

D: Matrice de diagonalisation dont les éléments de la diagonale sont les valeurs propres de **A**

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$\mathbf{D} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{AX} \Longrightarrow$ **A** a été réduite à la forme diagonale **D**

- Implications
  1. La trace de **A** est égale à la somme des valeurs propres de **A** $\sum_{k=1}^{n} \lambda_k = \mathrm{tr}\mathbf{A}$
  2. Le déterminant de **A** est égal au produit des valeurs propres de **A** $\prod_{k=1}^{n} \lambda_k = \det\mathbf{A}$

✓ Matrices complexes

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} + i\mathbf{C}$$

- Matrice conjuguée hermitique

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \left(\mathbf{A}^*\right)^t = \left(\mathbf{A}^t\right)^*$$

Elle joue le même rôle que les matrices transposées pour les matrices réelles

- **Matrices hermitiques**

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{A}$$

Une matrice hermitique réelle est une matrice symétrique

- Les valeurs propres d'une matrice hermitique sont réelles
- Les vecteurs propres d'une matrice hermitique d'ordre n forment un système de n vecteurs orthogonaux
- Une matrice hermitique **A** est réduite à sa forme diagonale par le biais d'une transformation unitaire

$$\mathbf{D} = \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{A}\mathbf{U} \qquad \mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1} \quad \textit{(matrice unitaire)}$$