Chimie Quantique

Faculté des sciences et technologies de l'Université de Lorraine

Année académique 2022-2023

Thibaud Etienne Université de Lorraine LPCT (UMR 7019) thibaud.etienne@univ-lorraine.fr thibaudetienne.wordpress.com

Avec la contribution de Claude Millot, Jérôme Dorignac et Nicolas Saby

Mots-clés : Mécanique et chimie quantiques, spectroscopies atomique et moléculaire

Chimie Quantique — Plan du cours et des travaux dirigés

L3 Chimie, Année académique 2022-2023 à l'Université de Lorraine

CHAPITRE 1 — Vecteurs & Opérateurs (2h CM, 2h TD)

- I.1 Vecteurs et bases
 - I.1.1 Bases (non)-dénombrables
 - I.1.2 Orthonormalité
 - I.1.3 Complétude de base
 - I.1.4 Espace dual, produit scalaire et lien avec la norme

Trois dimensions, N dimensions, puis dimension infinie et retour aux points précédents

- I.1.5 Notation de Dirac
- I.2 Les opérateurs
 - I.2.1 Définition
 - I.2.2 Opérateur adjoint, notion d'involution
 - I.2.3 Hermiticité, linéarité, commutation
 - I.2.4 Spectre ponctuel : vecteurs/fonctions/états propres, valeurs propres (+ dégénérescence)
 - I.2.5 Spectre d'opérateurs : le cas particulier des opérateurs hermitiens
 - I.2.6 Propriétés d'opérateurs qui commutent, ECOC
 - I.2.7 Représentation matricielle d'un opérateur (avec la relation de fermeture), cas continu
 - I.2.8 Déterminant séculaire

Chapitre II — Aube de la mécanique quantique (2h CM, 2h TD)

- II.1 Physique théorique classique Matière et lumière
 - II.1.1 Mécanique des corps
 - II.1.2 État dynamique d'un système, localité
 - II.1.3 Principe de moindre action
 - II.1.4 Équations du mouvement (Newton, Lagrange, Hamilton)
 - II.1.5 Déterminisme et systèmes chaotiques
 - II.1.6 Théorie ondulatoire de la lumière Maxwell : électromagnétisme ; interférences, diffraction
 - II.1.7 Relativité (Einstein, Poincaré, Minkowski)
 - II.1.8 Théorie cinétique des gaz, thermodynamique statistique
 - II.1.9 "Programme" classique
- II.2 Expériences de rupture Ondes électromagnétiques et photons, corpuscules et ondes de matière
 - II.2.1 Rayonnement du corps noir
 - II.2.1.A Définition du corps noir
 - II.2.1.B Définition de l'agitation thermique et d'un rayonnement thermique
 - II.2.1.C Spectroscopie d'émission du corps noir
 - II.2.1.D Hypothèse de Planck d'une quantification; émergence de h
 - II.2.2 Effet photoélectrique
 - II.2.2.A Exposition du phénomène
 - II.2.2.B La notion de fréquence seuil
 - II.2.2.C Hypothèse d'Einstein
 - II.2.3 Diffusion Compton
 - II.2.3.A Exposition du phénomène
 - II.2.3.B Billard quantique et collisions élastiques
 - II.2.3.C "Jet" de photons

- II.2.4 L'expérience des fentes de Young
 - II.2.4.A Exposition des expériences
 - II.2.4.B Figure d'interférence
 - II.2.4.C Cas limite de l'expérience
 - II.2.4.D Prédictions des théories corpusculaire et ondulatoire vs. l'expérience
- II.2.5 Dualité onde-corpuscule (de Broglie) et confirmation par diffraction d'ondes de matière
- II.2.6 Intrication, (non-)localité
- II.2.7 Spectroscopie électronique de l'atome d'hydrogène et des hydrogénoïdes
 - II.2.7.A Relation de Balmer
 - II.2.7.B Relation de Rydberg
 - II.2.7.C Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène et lien avec la relation de Rydberg

CHAPITRE III — Postulats de la mécanique quantique et conséquences (2h CM, 2h TD)

III.1 Enoncé des postulats

- III.1.1 Espace des états
- III.1.2 Observables et opérateurs
- III.1.3 Mesures et valeurs propres
- III.1.4 Probabilité de résultat de mesure (spectre discret non-dégénéré)
- III.1.5 Réduction du paquet d'ondes/Collapse de la fonction d'onde
- III.1.6 Evolution du système dans le temps
- III.2 Interprétation physique des postulats sur les observables et leur mesure
 - III.2.1 Interprétation probabiliste de la fonction d'onde (Born) et nécessité de normalisation
 - III.2.2 Quantification de certaines grandeurs physiques
 - III.2.3 Mécanisme de la mesure
 - III.2.4 Espérance d'une observable dans un état donné
 - III.2.5 Ecart quadratique moyen, relations d'incertitude
 - III.2.6 Compatibilité d'observables
 - III.2.7 Propriétés générales de l'équation de Schrödinger
 - III.2.7.A Linéarité, homogénéité
 - III.2.7.B Déterminisme dans l'évolution des systèmes physiques
 - III.2.7.C Principe de superposition
 - III.2.7.D Conservation de la norme dans le temps
 - III.2.7.E Evolution de l'espérance d'une observable, lien avec la mécanique classique
 - III.2.8 Etats stationnaires : l'équation de Schrödinger indépendante du temps

CHAPITRE IV — Potentiels exactement solubles (4h CM, 4h TD)

- IV.1 La particule libre dans une boîte unidimensionnelle
 - IV.1.1 Exposition du problème, bornes
 - IV.1.2 Solution générale de l'équation de Schrödinger correspondante
 - IV.1.3 Recherche de la valeur des constantes
 - IV.1.4 Normalisation
- IV.2 Séparabilité d'un hamiltonien
- IV.3 La particule libre sur un cercle
 - IV.3.1 Equation de Schrödinger
 - IV.3.2 Changement de variable
 - IV.3.3 Introduction du moment cinétique et re-définition de l'opérateur énergie cinétique
 - IV.3.4 Solution générale de l'équation de Schrödinger
 - IV.3.5 Spectre de \hat{L}_z
- IV.4 La particule libre sur une sphère
 - IV.4.1 Coordonnées sphériques, moment cinétique
 - IV.4.2 Le laplacien et l'hamiltonien en coordonnées sphériques
 - IV.4.3 Réduction du laplacien
 - IV.4.4 Séparation des variables

IV.4.5 Solution générale de l'équation de Schrödinger

IV.4.6 Les harmoniques sphériques

Polynômes et fonctions associées de Legendre

(définition, relations de récurrence, normalisation, orthogonalité)

IV.4.7 Spectre de \hat{L}^2

IV.4.8 Propriétés du moment cinétique

IV.4.9 Généralisation de la définition du moment cinétique en mécanique quantique

IV.5 Deux modèles pour la spectroscopie — A. le rotateur rigide

IV.5A.1 Réduction au centre de masse

IV.5A.2 Spectroscopie du rotateur rigide : vers une spectroscopie rotationnelle

IV.5 Deux modèles pour la spectroscopie — B. L'oscillateur harmonique

IV.5B.1 Rappels sur le modèle classique

IV.5B.2 Traitement quantique

IV.5B.3 Polynômes d'Hermite (définition, relations de récurrence, normalisation, orthogonalité)

IV.5B.4 Spectroscopie de l'oscillateur harmonique : vers une spectroscopie vibrationnelle

IV.5B.5 Corrections d'anharmonicité

IV.5B.6 Potentiels réalistes : la fonction de Morse

IV.5B.7 Spectroscopie rovibrationnelle

CHAPITRE V — L'atome d'hydrogène et les hydrogénoïdes (2h CM, 2h TD)

V.1 Mouvement dans un champ central : l'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène

V.1.1 L'hamiltonien de l'atome d'hydrogène en coordonnées sphériques

V.1.2 Commutation de l'hamiltonien avec \hat{L}^2 et \hat{L}_z

V.1.3 Séparation des variables radiales et angulaires

V.1.4 Résolution de l'équation angulaire grâce aux modèles IV.3 et IV.4

V.1.5 Résolution de l'équation radiale

V.1.6 Polynômes de Laguerre (définition, relations de récurrence, normalisation, orthogonalité)

V.2 L'atome d'hydrogène et les hydrogénoïdes

V.2.1 Nombres quantiques

V.2.2 Hydrogénoïdes

V.2.3 Orbitales atomiques

V.2.4 Transitions dipolaires électriques : règles de sélection

CHAPITRE VI — Au-delà des hydrogénoïdes : deux méthodes d'approximation (2h CM, 2h TD)

VI.1 Méthode des perturbations

VI.1.1 Principe illustré

VI.1.2 Perturbation d'un niveau non-dégénéré

Correction au premier ordre : énergie et fonction d'onde

Correction au second ordre : énergie

VI.1.3 Champ de validité de la méthode des perturbations

VI.1.3 Application à l'atome d'hélium

VI.2 Méthode des variations

VI.2.1 Théorème variationnel

VI.2.2 Principe de la méthode variationnelle

VI.2.3 Application à l'atome d'hélium

VI.2.4 Théorème de Ritz

VI.2.5 Equation séculaire

CHAPITRE VII — L'atome polyélectronique et les molécules (4h CM, 4h TD)

VII.1 Le spin de l'électron

VII.1.1 Mise en évidence expérimentale

VII.1.2 L'opérateur de spin

VII.1.3 Fonction d'onde totale d'un électron

VII.2 Particules identiques

VII.2.1 Principes d'indiscernabilité et d'anti-symétrisation de la fonction d'onde

VII.2.2 Application à l'état fondamental de l'hélium

VII.2.3 Le déterminant de Slater

VII.2.4 Configurations électroniques

VII.3 Niveaux d'énergie de l'atome — Vers la spectroscopie atomique

VII.3.1 Composition de deux moments cinétiques

VII.3.2 Couplage LS et termes électroniques de l'atome

VII.3.2.A Termes spectroscopiques

VII.3.2.B Diagrammes de Slater

VII.3.2.C Electrons équivalents

VII.3.2.D Equivalence électron-lacune électronique

VII.3.2.E Couplage spin-orbite

VII.3.2.F Règles de Hund

VII.4 Systèmes moléculaires — Vers une spectroscopie moléculaire électronique

VII.4.1 L'ion moléculaire H_2^+ : un autre exemple du problème à trois corps

VII.4.2 Configurations électroniques

VII.4.3 Spectroscopie moléculaire électronique : termes électroniques, règles de sélection

Chimie Quantique — Travaux dirigés

L3 Chimie, Année académique 2022-2023 à l'Université de Lorraine

I. Vecteurs & opérateurs

NB : dans ce qui suit, a, b, c, ω et α sont des constantes, tandis que x, y, z et t sont des variables (réelles ou complexes selon le contexte).

Problème I.1 – La prise de l'adjoint d'un opérateur est une involution. Expliquer.

Problème I.2 – Qu'est-ce qu'un opérateur hermitien?

Problème I.3 – Qu'est-ce qu'un opérateur linéaire?

Problème I.4 – Quand dit-on que deux opérateurs commutent?

Problème I.5 – Qu'est-ce qu'une équation aux valeurs propres?

Problème I.6 – Citer une propriété d'un ensemble d'opérateurs qui commutent deux à deux?

Problème I.7 – Sachant que $(\hat{A} + \hat{B})^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger} + \hat{B}^{\dagger}$, montrer que $[\hat{C}, \hat{D}]^{\dagger} = -[\hat{C}^{\dagger}, \hat{D}^{\dagger}]$.

Indication : Développer les deux commutateurs de part et d'autre de l'égalité.

Problème I.8 – Sachant que $(\hat{A} + \hat{B})^{\dagger} = \hat{A}^{\dagger} + \hat{B}^{\dagger}$, montrer que $[\hat{C}, \hat{D}]^{\dagger} = [\hat{D}^{\dagger}, \hat{C}^{\dagger}]$.

Indication: Développer les deux commutateurs de part et d'autre de l'égalité.

Problème I.9 – Soit $[\cdot,\cdot]_+$ l'anticommutateur de deux opérateurs, défini comme :

$$[\hat{A}, \hat{B}]_{+} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

On sait qu'en algèbre ordinaire, pour deux scalaires a et b, nous avons $(a - b)^2 = a^2 - 2ab + b^2$. Énoncer dans quelle condition, pour deux opérateurs,

$$(\hat{A} - \hat{B})^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2,$$

et dans quelle condition

$$(\hat{A} - \hat{B})^2 = \hat{A}^2 + \hat{B}^2.$$

Indication: Développer $(\hat{A} - \hat{B})^2$, et envisager les deux possibilités où les deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} commutent ou anticommutent.

Problème I.10 – Vérifier les relations de commutation suivantes :

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad \text{et} \quad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

Indication: Développer tous les commutateurs et simplifier.

Problème I.11 – Montrer l'inégalité de Cauchy-Schwarz : soient u et v deux fonctions à valeur complexe, ou deux vecteurs à composantes complexes. Nous avons

$$|\langle u, v \rangle|^2 \le ||u||^2 ||v||^2.$$

Pour ce faire, on peut commencer par supposer que v est différent du vecteur nul, et généraliser ensuite.

Indication 1 : Méthode 1. Poser

$$z \coloneqq u - \frac{\langle v, u \rangle}{\langle v, v \rangle} v,$$

réécrire u et constater que $\langle v, z \rangle = 0$. Déduire que $\langle z, v \rangle = 0$ et écrire $\langle u, u \rangle$. Conclure. Indication 2 : Méthode 2. Poser, pour tout scalaire t,

$$P(t) \coloneqq ||u + tv||^2.$$

Constater que

$$\forall t \in \mathbb{C}, P(t) \geq 0,$$

ce qui permet de considérer le cas particulier

$$P\left(-\frac{\langle u, v \rangle^*}{\langle v, v \rangle}\right) \ge 0.$$

Développer cette valeur de P et conclure.

Problème I.12 – Montrer que le module du produit scalaire de deux vecteurs normalisés est compris entre 0 et 1. Dans le cas de fonctions à valeurs réelles ou de vecteurs à composantes réelles, montrer que le produit scalaire de deux de ces objets a une valeur comprise entre -1 et 1.

Indication: Appliquer Cauchy-Schwarz.

Problème I.13 – Soient \hat{A} et \hat{B} deux opérateurs. Montrer que

$$(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}.$$

Indication: Utiliser la définition de l'adjoint d'un opérateur, i.e.,

$$\langle u, \hat{O}v \rangle = \langle \hat{O}^{\dagger}u, v \rangle \,,$$

en choisissant $\hat{O} = \hat{A}\hat{B}$.

Problème I.14 – L'inverse d'un opérateur \hat{A} , noté \hat{A}^{-1} , s'il existe, est défini tel que

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}.$$

Soient \hat{A} et \hat{B} deux opérateurs. Montrer que

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}.$$

Indication : Écrire $(\hat{A}\hat{B})^{-1}(\hat{A}\hat{B})$ avec la solution proposée et vérifier que cela redonne bien $\hat{1}$.

Problème I.15 – Evaluer $g(\cdot) = (\hat{A}f)(\cdot)$, où \hat{A} et f sont donnés par

$$\frac{\hat{A}}{\frac{d^3}{dx^3} + x^3 \hat{1}} \qquad \qquad e^{-ax}$$

$$\int_0^1 dx \qquad \qquad x^3 - 2x + 3$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \qquad x^3 y^2 z^4$$

Indication: Appliquer simplement les opérateurs aux fonctions données.

Problème I.16 – Dites si les opérateurs suivants sont linéaires ou non linéaires :

 $\hat{A}f(x) = [f(x)]^2$ [prise du carré]

 $\hat{A}f(x) = f^*(x)$ [prise du complexe conjugué]

 $\hat{A}f(x) = 0$ [multiplication par zéro]

 $\hat{A}f(x) = [f(x)]^{-1}$ [prise de l'inverse]

 $\hat{A}f(x) = f(0)$ [prise de la valeur en zéro]

 $\hat{A}f(x) = \ln f(x)$ [prise du logarithme naturel]

Indication : Appliquer les opérateurs à une combinaison linéaire de fonctions et vérifier si la propriété de linéarité est rencontrée ou non.

Problème I.17 – Dans chaque cas, montrer que f est fonction propre de l'opérateur donné, et trouver la valeur propre.

$$\frac{\hat{A}}{\frac{d^2}{dx^2}} \qquad cos(\omega x)$$

$$\frac{d}{dt} \qquad e^{i\omega t}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{d}{dx} + 3\hat{1} \qquad e^{\alpha x}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \qquad x^2 e^{6y}$$

Indication : Appliquer les opérateurs aux différentes fonctions, montrer que dans chaque cas cela redonne la fonction elle-même multipliée par un scalaire, i.e., la valeur propre.

Problème I.18 – Montrer que $\cos(ax)\cos(by)\cos(cz)$ est fonction propre de

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

appelé opérateur laplacien. Trouver la valeur propre correspondante.

Indication : Appliquer l'opérateur à la fonction, et montrer que cela redonne la fonction elle-même, multipliée par un scalaire, i.e., la valeur propre.

Problème I.19 – Ecrire \hat{A}^2 pour

$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\hat{\mathbb{1}}$$

$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \hat{\mathbb{1}}$$

Indication : Pour un opérateur \hat{A} , écrire $\hat{A}\hat{A}f$ pour f une fonction-test quelconque et observer l'effet de l'action de $\hat{A}\hat{A}$ sur f. Dans certains cas, l'omission de f dans la première étape aurait mené à une mauvaise définition de \hat{A}^2 .

Problème I.20 – Soit $\delta_{n,m}$ le delta de Kronecker, défini comme étant égal à 1 lorsque m=n et à 0 lorsque $m \neq n$. Montrer que

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{n,m} = c_m$$

et que

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n b_m \delta_{n,m} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n b_n.$$

Indication : Dans la somme simple, tous les termes sont nuls sauf un. Dans la double somme, on utilise le résultat relatif à la première somme de ce problème.

Problème I.21 – Déterminer si ces paires d'opérateurs commutent ou pas :

$$\frac{\hat{A}}{\frac{d}{dx}} \qquad \frac{\hat{B}}{\frac{d^2}{dx^2}} + 2\frac{d}{dx}$$

$$x\hat{1} \qquad \frac{d}{dx}$$

$$x^2\frac{d}{dx} \qquad \frac{d^2}{dx^2}$$

Indication: On développe $\hat{A}\hat{B}f$ et $\hat{B}\hat{A}f$ et on observe si les deux sont identiques ou non.

Problème I.22 – En algèbre ordinaire, $(P+Q)(P-Q)=P^2-Q^2$. Développer $(\hat{P}+\hat{Q})(\hat{P}-\hat{Q})$. Dans quelles conditions trouvons-nous le même résultat qu'en algèbre ordinaire? *Indication*: Envisager la commutation d'opérateurs.

Problème I.23 – Évaluer les commutateurs des paires d'opérateurs suivantes :

\hat{A}	\hat{B}
$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$	$x\hat{1}$
$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - x\hat{\mathbb{1}}$	$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\hat{\mathbb{1}}$
$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - x\hat{\mathbb{1}}$	$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x^2 \hat{\mathbb{1}}$

Indication : Développer $\hat{A}\hat{B}f$ et $\hat{B}\hat{A}f$ et les soustraire.

Problème I.24 - **1.** Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermitien non-dégénéré sont réelles et **2.** que ses vecteurs propres sont orthogonaux deux à deux.

Indication : 1. Écrire le problème aux valeurs propres pour un opérateur \hat{A} ; multiplier par la gauche par le complexe conjugué de la fonction propre et intégrer. Répéter l'opération avec l'adjoint du problème aux valeurs propres initial et utiliser l'hermiticité de \hat{A} pour déduire que les valeurs propres sont réelles. 2. Considérer ensuite deux équations aux valeurs propres distinctes pour le même opérateur; (i) multiplier la première par la gauche par le complexe conjugué de la fonction propre de la seconde et intégrer; (ii) prendre

le complexe conjugué de la seconde puis multiplier par la gauche par la fonction propre de la première et intégrer; soustraire les deux équations ainsi obtenues en (i) et en (ii) et conclure.

Problème I.25 – 1. Montrer qu'un opérateur différentiel

$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

vivant dans un espace de fonctions de carré sommable est anti-hermitien. **2.** Montrer ensuite que toute puis-sance impaire (respectivement, paire) d'un tel opérateur est anti-hermitienne (respectivement, hermitienne). *Indication*: **1.** Utiliser

$$\int v \mathrm{d}u = uv - \int u \mathrm{d}v,$$

en choisissant $\psi^* = v$ et

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = \mathrm{d}u,$$

et se souvenir qu'une fonctionne de carré sommable s'annule en l'infini. Pour 2., on utilise simplement la propriété que l'on vient de démontrer, ainsi que le résultat prouvé au problème I.13.

Problème I.26 – Pour l'opérateur \hat{A} de la question I.25, montrer que $-i\hbar \hat{A}$ est hermitien, et que $i\hat{A}^2$ est anti-hermitien.

Indication: Appliquer simplement le résultat du problème I.25.

II. Aube de la mécanique quantique

Indication générale pour ces problèmes : attention aux cohérences de dimensions et aux cohérences d'unités dans vos calculs avant de réaliser l'application numérique.

Problème II.27 – Qu'est-ce qu'un corps noir? Qu'appelle-t-on rayonnement du corps noir?

Problème II.28 – Décrire l'effet photoélectrique. Qu'appelle-t-on fréquence-seuil? Donner la relation entre la fréquence du photon incident et l'énergie cinétique de l'électron émis.

Problème II.29 – Donner la relation de de Broglie liant longueur d'onde et impulsion.

Problème II.30 – Rappeler la relation de Planck liant énergie et fréquence.

Problème II.31 – Donner la relation de Rydberg entre nombre d'onde et nombres quantiques de départ et d'arrivée d'une transition électronique dans l'atome d'hydrogène. On donne la constante expérimentale de Rydberg, 109 677,6 cm⁻¹.

Problème II.32 – Calculer en joule l'énergie d'un photon ayant pour longueur d'onde de de Broglie $\lambda=100~\mathrm{pm}.$

Indication: Appliquer simplement la relation de de Broglie.

Problème II.33 – Calculer la longueur d'onde de de Broglie d'un mobile de 140 g se déplaçant à 40 m s⁻¹. *Indication* : Appliquer simplement la relation de de Broglie.

Problème II.34 — Calculer la longueur d'onde de de Broglie associée à un électron se déplaçant à 1,00 % de la vitesse de la lumière.

Indication: Appliquer simplement la relation de de Broglie.

Problème II.35 – Sachant que l'énergie d'extraction du sodium métallique est égale à 1,82 eV, calculer la fréquence de seuil ν_0 du sodium.

Indication: Utiliser simplement la relation de Planck entre énergie et fréquence.

Problème II.36 – Quand on expose une surface de lithium à un faisceau lumineux, l'énergie cinétique des électrons éjectés est de $2,935\times10^{-19}$ J pour $\lambda=300,0$ nm et de $1,280\times10^{-19}$ J pour $\lambda=400,0$ nm. Calculer, à partir de ces données, **1.** la constante de Planck, **2.** la fréquence de seuil et **3.** l'énergie d'extraction du lithium

Indication : 1. Prendre la différence d'énergie cinétique entre les deux expériences en utilisant la relation entre fréquence et longueur d'onde. 2. Utiliser les résultats numérique d'une des deux expériences au choix pour isoler la fréquence de seuil. 3. L'énergie d'extraction est égale au produit de la constante de Planck par la fréquence de seuil.

Problème II.37 – Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène postule que l'électron de cet atome se meut sur des orbites circulaires dont la circonférence est égale à un nombre entier de fois la longueur d'onde de de Broglie de l'électron. En rendant égales les normes des forces centrifuges et coulombiennes dans ce modèle, donner l'expression quantifiée (i.e., discrétisée) du rayon et de l'énergie de l'électron de l'atome d'hydrogène dans la n^{ième} orbite de Bohr.

Indication : On rappelle que la norme de la force centrifuge est

$$\frac{mv^2}{r}$$
,

avec m la masse, v la vitesse et r le rayon; on rappelle par ailleurs que la norme de la force d'interaction coulombienne entre deux charges électriques de valeur q_1 et q_2 séparées par une distance r est la valeur absolue de

$$\frac{q_1q_2}{4\pi\epsilon_0r}$$

avec ϵ_0 tabulé dans la partie *prérequis* de ce polycopié. Pour le reste, utiliser les informations données dans l'énoncé et vos connaissances en géométrie du cercle, rappelées également dans la partie *prérequis* de ce polycopié, ainsi que le fait que l'énergie totale s'exprime comme la somme d'une énergie cinétique

$$T = \frac{mv^2}{2},$$

et d'une énergie potentielle, avec la propriété que la norme de la force d'interaction coulombienne est l'opposé de la dérivée de celle de l'énergie potentielle d'interaction coulombienne, et que seule cette interaction est présente dans l'expression de l'énergie potentielle du système.

Problème II.38 – Calculer la valeur du rayon de la première orbite de Bohr, ainsi que la valeur de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène selon le modèle de Bohr.

Indication: Utiliser simplement les résultats du problème II.37.

Problème II.39 – Montrer que le modèle de Bohr permet de déduire une formule similaire à celle de Rydberg pour l'énergie des transitions électroniques dans l'atome d'hydrogène. Comparez la valeur de la constante de Rydberg expérimentale ($109~677,6~{\rm cm}^{-1}$) au coefficient prédit par le modèle de Bohr.

Indication : Utiliser l'expression de l'énergie obtenue au problème II.37 et calculer une différence d'énergie entre deux états. Rapprocher cette expression de celle liant l'énergie à la fréquence par l'intermédiaire de la constante de Planck.

Problème II.40 – Calculer l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène depuis son état électronique fondamental selon ce modèle.

Indication : Utiliser l'expression de l'énergie obtenue au problème II.37 et se rappeler du fait que le seuil d'ionisation correspond à l'énergie nulle.

Problème II.41 – Généraliser la quantification de l'énergie électronique de Bohr aux hydrogénoïdes. *Indication* : Re-dériver l'expression de l'énergie obtenue au problème II.37 mais en incluant le numéro atomique dans l'expression de la force d'interaction coulombienne. **Problème II.42** – Calculer l'énergie d'ionisation de He⁺ depuis son état électronique fondamental selon le modèle de Bohr.

Indication: Utiliser la méthode du problème II.40 et les résultats du problème II.41.

Problème II.43 – Calculer le nombre de photons existant dans un jet lumineux de 2,00 mJ à (a) 1,06 μ m, (b) 537 nm, et (c) 266 nm.

Indication : Calculer l'énergie d'un photon, puis diviser l'énergie du jet de photons par l'énergie d'un photon pour obtenir le nombre de photons dans ce jet.

Problème II.44 — Un atome d'hydrogène à l'état fondamental absorbe un photon de lumière dont la longueur d'onde est 97,2 nm. Il émet ensuite un photon dont la longueur d'onde est de 486 nm. Quel est l'état final de l'atome d'hydrogène en question?

Indication : Modéliser la succession de processus et utiliser le résultat du problème II.37 quant à la quantification de l'énergie de l'atome d'hydrogène, ainsi que la relation entre énergie et longueur d'onde.

Problème II.45 – Calculer les longueurs d'onde limites des raies des séries de Lyman, Balmer et Paschen. Indication: La série Lyman est caractérisé par l'état d'arrivée (n=1) admet comme nombres quantiques limites pour les états de départ n=2 et $n\to\infty$; la série Balmer est caractérisé par l'état d'arrivée (n=2) admet comme nombres quantiques limites pour les états de départ n=3 et $n\to\infty$; la série Paschen est caractérisé par l'état d'arrivée (n=3) admet comme nombres quantiques limites pour les états de départ n=4 et $n\to\infty$.

Problème II.46 — Calculer la longueur d'onde de de Broglie 1. d'un électron ayant une énergie cinétique de 100 eV, 2. d'un proton ayant une énergie cinétique de 100 eV et 3. d'un électron situé sur la première orbite de Bohr d'un atome d'hydrogène.

 $Indication: \mathbf{1.}$ et $\mathbf{2.}$ Simple application numérique dans l'énergie cinétique pour trouver la vitesse, à injecter dans l'impulsion qui se trouve dans l'expression de la longueur d'onde de de Broglie. $\mathbf{3.}$ Reprendre le problème II.37 en isolant la vitesse en fonction du rayon; y injecter l'expression quantifiée du rayon et évaluer la vitesse pour la première orbite de Bohr (n=1). Utiliser ensuite le même procédé qu'en $\mathbf{1.}$ et $\mathbf{2.}$

III. Postulats et conséquences

Problème III.47 — Que dit le premier postulat de la mécanique quantique à propos de l'état d'un système physique isolé?

Problème III.48 — Que dit le second postulat de la mécanique quantique à propos du lien entre grandeur physique mesurable et opérateur?

Problème III.49 — Que dit le troisième postulat de la mécanique quantique à propos du résultat de la mesure d'une grandeur physique et des valeurs propres d'un opérateur?

Problème III.50 — Que dit le quatrième postulat de la mécanique quantique à propos de la probabilité d'obtenir comme résultat de mesure la valeur propre non-dégénérée de l'observable correspondant à la grandeur physique mesurée?

Problème III.51 – La mécanique quantique est-elle déterministe quant aux systèmes? Est-elle déterministe quant aux résultats de mesures? Si la mécanique quantique est déterministe quant aux systèmes, justifier pourquoi. Si elle ne l'est pas, justifier pourquoi.

Problème III.52 – Qu'entend-on par "état normalisé" $|\psi\rangle$?

Problème III.53 – Comment s'exprime l'espérance (souvent appelée valeur moyenne) d'une observable dont l'opérateur est \hat{A} , pour un système dans un état normalisé $|\psi\rangle$ donné? Que devient cette valeur si l'état n'est pas normalisé mais possède bien une norme finie (i.e., non-infinie)?

Problème III.54 — Quelle information peut-on tirer du carré du module de la fonction d'onde d'un système à une particule?

Problème III.55 – Dans quelles conditions deux observables sont-elles déclarées compatibles?

Problème III.56 – Citer une grandeur physique dont les valeurs ne sont pas quantifiées.

Problème III.57 – Prenons un opérateur hamiltonien linéaire. Décrire le lien entre l'équation de Schrödinger dépendante du temps et le principe de superposition.

Problème III.58 – Que dit la relation d'incertitude liant l'incertitude sur la position et sur l'impulsion?

Problème III.59 – Partir de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

pour déduire l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

pour les états stationnaires.

Indication: En mécanique quantique non-relativiste, la fonction d'onde totale Ψ peut se factoriser en un facteur spatial et un facteur temporel. Si l'hamiltonien est indépendant du temps, il n'agit que sur le facteur spatial; l'opérateur dérivée temporelle n'agit que sur le facteur temporel de la fonction d'onde. Utiliser ces deux propriétés, puis diviser par la gauche par la fonction d'onde totale. Un membre de l'équation ne dépend plus que du temps, tandis que l'autre ne dépend plus que de l'espace, ces deux membres représentent une constante l'un pour l'autre, que l'on note E. Depuis le membre "espace", on trouve l'équation de Schrödinger stationnaire.

Problème III.60 - **1.** Construire l'expression de l'opérateur hamiltonien dans le cas unidimensionnel et **2.** vérifier que cet opérateur a bien les dimensions d'une énergie. Déduire l'expression de l'opérateur impulsion dans le cas unidimensionnel.

Indication : 1. Avec le membre "temporel" à la fin de la résolution du problème III.59, on trouve que le facteur temporel de la fonction d'onde totale est une exponentielle complexe. On écrit la fonction d'onde totale. Sachant que

$$E = h\nu = \hbar\omega$$
.

où $\omega = 2\pi\nu$, avec $\nu = v/\lambda$ dans le cas d'une onde générale [ν est la fréquence, v la vitesse, λ la longueur d'onde], on introduit les différents éléments dans l'équation d'onde unidimensionnelle

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}.$$

À partir de l'expression générale de l'énergie

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

et de la relation de de Broglie, on déduit l'expression de l'hamiltonien stationnaire. **2.** On rappelle que les dimensions d'une énergie sont ML^2T^{-2} .

Problème III.61 – Démontrer la relation d'incertitude généralisée pour deux observables

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \ge \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_{\Psi}\right)^2.$$

Indication : Si l'on parle de deux observables, c'est que l'opérateur qui leur correspond est hermitien dans les deux cas. Si on pose

$$|f\rangle := (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi}) |\Psi\rangle$$

et

$$|g\rangle := (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_{\Psi}) |\Psi\rangle$$

on voit que $\langle f|f\rangle=\sigma_A^2$ et $\langle g|g\rangle=\sigma_B^2$. On introduit cela dans l'inégalité de Cauchy-Schwarz, et on utilise

$$|z|^2 = [\Re(z)]^2 + [\Im(z)]^2 \ge [\Im(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z-z^*)\right]^2$$

en choisissant $z = \langle f|g\rangle$. On développe par ailleurs $\langle f|g\rangle$ pour le réduire à $\langle \hat{A}\hat{B}\rangle_{\Psi} - \langle \hat{A}\rangle_{\Psi} \langle \hat{B}\rangle_{\Psi}$ et on procède de manière similaire pour $\langle g|f\rangle$. On voit que la différence entre ces deux produits scalaires n'est autre que l'espérance du commutateur des deux opérateurs, et on conclut.

Problème III.62 – À partir de ce résultat, déduire, dans le cas unidimensionnel,

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \ge \frac{\hbar}{2}.$$

Indication : On calcule le commutateur des opérateurs position et impulsion, et on introduit le résultat dans la relation d'incertitude généralisée.

Problème III.63 – Quelle est l'incertitude sur la vitesse d'un objet de 100 kg astreint à se déplacer dans un intervalle de 10 m? Quelle est l'incertitude sur la position d'un mobile de 140 g se déplaçant à 40 ms⁻¹ sachant que son impulsion est mesurée à 10^{-6} % de précision?

Indication : Il s'agit là de simples applications numériques.

Problème III.64 – Quelle est l'incertitude sur la vitesse si nous souhaitons localiser l'électron non-relativiste à l'intérieur de l'atome, c'est-à-dire que l'on fixe un Δx égal à 50 pm et que la masse utilisée est celle de l'électron "au repos"?

Indication: Il s'agit là d'une simple application numérique.

Problème III.65 – Soit une fonction f qui peut se développer en série entière comme

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(0) x^k \text{ avec } f^{(k)}(0) = \left. \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} f(x) \right|_{x=0}.$$

On définit la fonction d'opérateur par ce même développement où on a remplacé la variable de f par un opérateur \hat{A} :

$$f(\hat{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(0) \hat{A}^k,$$

avec les mêmes coefficients $f^k(0)$. Montrer que

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}.$$

Indication : On utilise l'expression de l'exponentielle en somme infinie (voir polycopié de prérequis) et les propriétés de la fonction exponentielle relativement à la dérivation.

Problème III.66 – Montrer également que, dans le cas général, $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$, $e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}$ et $e^{\hat{A}+\hat{B}}$ ne sont pas égaux. À quelle condition ces trois opérateurs sont-ils égaux?

Indication : Pour les deux produits d'exponentielles, on voit que l'on a une double somme de produits de puissances d'opérateurs, et dans le troisième cas on a une somme de puissances entières de la somme de deux opérateurs. La notion cruciale pour relier ces trois expressions est la commutation d'opérateurs.

Problème III.67 – Soit le problème aux valeurs propres suivant : $\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$ avec $n \in \mathbb{N}^*$. Montrer que les φ_n sont également fonctions propres de $f(\hat{A})$ pour une fonction f quelconque. Donner l'expression des valeurs propres de $e^{\hat{A}}$.

Indication: On applique \hat{A} par la gauche de part et d'autre de l'égalité dans le problème aux valeurs propres et on voit l'effet sur les valeurs propres. On répète l'opération un nombre arbitraire de fois pour voir les conséquences sur les valeurs propres. On se souvient ensuite de l'expression de l'exponentielle comme une somme infinie, et on conclut.

Problème III.68 – **1.** Soit \hat{A} un opérateur indépendant du temps. Donner l'expression de la dérivée de $e^{\hat{A}t}$ par rapport au temps. **2.** Vérifier ensuite que, si la fonction d'onde d'un système à l'instant t_0 s'écrit $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, celle à l'instant t s'écrit

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{U}(t,t_0)\Psi(\mathbf{r},t_0)$$
 avec $\hat{U}(t,t_0) = \exp_{\mathbf{e}} \left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0) \right]$.

3. À quelle équation obéit l'opérateur évolution \hat{U} ?

Indication: 1. On dérive simplement l'exponentielle, puis on réécrit les termes de sorte à obtenir un opérateur appliqué à une exponentielle d'opérateur. 2. On introduit le résultat précédent et la donnée de l'énoncé dans l'équation de Schrödinger dépendante du temps et on voit que la fonction d'onde obéit bien à l'équation de Schrödinger dépendante du temps. 3. On réécrit l'équation obtenue en fin de sous-question 2. et on identifie membre à membre les deux opérateurs opérant sur la fonction d'onde afin d'en déduire l'équation qui régit \hat{U} .

Problème III.69 – Connaissant la valeur de la fonction d'onde d'un système au temps t_0 ,

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}),$$

les φ_n étant les fonctions propres de l'hamiltonien, déduire à l'aide de l'opérateur d'évolution ci-dessus la valeur de la fonction d'onde à l'instant t.

Indication: On applique \hat{U} sur les fonctions propres présentes dans la somme, et on somme.

Problème III.70 – Montrer que la norme d'un vecteur d'état dépendant du temps — c'est-à-dire obéissant à l'équation de Schrödinger dépendante du temps, avec un hamiltonien hermitien — ne dépend pas du temps.

Indication : On applique l'opérateur de dérivée temporelle au carré de la norme du vecteur d'état en appliquant la règle de dérivation d'un produit de fonctions, et on introduit l'équation de Schrödinger dépendante du temps, ainsi que son conjugué hermitien.

Problème III.71 – Montrer, dans le cas général d'un état $|\psi\rangle$ non-nécessairement superposé que, pour une observable quelconque,

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle_{\psi}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}(t)]\rangle_{\psi} + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle_{\psi}.$$

Indication : On applique l'opérateur de dérivée temporelle à l'espérance en appliquant la règle de dérivation d'un produit de fonctions, et on introduit l'équation de Schrödinger dépendante du temps, ainsi que son conjugué hermitien. Cela fait apparaître, entre autres, un commutateur.

Problème III.72 — Définir ce qu'est une constante du mouvement en mécanique quantique. Appliquez la relation ci-dessus dans le cas où $\hat{A} = \hat{H}$ avec un potentiel indépendant du temps, ainsi que dans le cas $\hat{A} = \hat{\mathbb{I}}$. Indication : On cherche quelles conditions rendent le terme de droite de l'égalité dans l'énoncé du problème III.71 nul.

Problème III.73 – Déduire du problème III.71 le théorème d'Ehrenfest qui pose, pour un potentiel scalaire

stationnaire,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \hat{\mathbf{R}} \rangle_{\Psi} = \frac{1}{m} \left\langle \hat{\mathbf{P}} \right\rangle_{\Psi} \text{ et } \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle_{\Psi} = - \langle \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{R}}) \rangle_{\Psi}.$$

Indication : On calcule séparément la dérivée temporelle de l'espérance sur l'opérateur position et sur l'opérateur impulsion. Les deux expressions se réduisent à l'inverse de i \hbar que multiplie l'espérance d'un commutateur différent dans chaque cas. On utilise la première relation du problème I.10 pour le premier commutateur, ainsi que

 $\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, f(x)\right] = f'(x)$

dont on fournit la preuve en appliquant le commutateur à une fonction-test, puis que l'on étend à trois dimensions afin de réécrire le second commutateur obtenu, ce qui finit de prouver les relations du théorème d'Ehrenfest.

Problème III.74 – Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ deux états normalisés et orthogonaux. Montrer qu'une superposition linéaire de ces deux états ne s'interprète pas comme un mélange statistique de ces deux états quant à la probabilité d'obtenir un résultat de mesure portant sur une observable.

Indication : On écrit un état comme une superposition linéaire de deux états et on calcule la probabilité d'obtenir un résultat de mesure en utilisant le quatrième postulat de la mécanique quantique. On constate l'apparition d'un terme d'interférence qui empêche d'interpréter cette superposition linéaire comme un mélange statistique.

IV. Modèles simples

Problème IV.75 – Montrer que $[n \in \mathbb{N} \text{ et } \Re(\beta) > 0]$:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \, x^n \mathrm{e}^{-\beta x} = \frac{n!}{\beta^{n+1}}.$$

Une possibilité pour y arriver est d'utiliser une preuve par récurrence.

Indication: Nous allons suivre les étapes d'une preuve par récurrence: on commence par vérifier que la relation est vraie au rang n=0; ensuite, on suppose que la relation est vraie au rang n et on montre qu'elle est vraie au rang n+1. La première étape est triviale. On écrit I_n l'intégrale au rang n, et I_{n+1} celle au rang n+1. On voit que I_n peut être considéré comme une fonction de β . On dérive donc I_n en fonction de β dans l'intégrale et on montre que l'on obtient $-I_{n+1}$. On dérive à nouveau I_n par rapport à β mais dans la relation que l'on doit démontrer, et on confronte les deux résultats afin de montrer que la relation est vraie au rang n+1.

Problème IV.76 – Indiquer, parmi les fonctions suivantes, lesquelles sont normalisables dans l'intervalle précisé :

- (a) $x \longmapsto e^{-x^2/2} \operatorname{sur} \mathbb{R}$
- (b) $x \longmapsto e^x \operatorname{sur} \mathbb{R}_+$
- (c) $\theta \longmapsto e^{i\theta} \operatorname{sur} [0; 2\pi]$
- (d) $x \longmapsto \sinh(x) \operatorname{sur} \mathbb{R}_+$
- (e) $x \longmapsto xe^{-x} \operatorname{sur} \mathbb{R}_+$

Normaliser celles qui peuvent l'être. Les autres fonctions d'onde sont-elles satisfaisantes pour une interprétation physique directe? On donne

$$\int_0^\infty dx \, e^{-ax^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \text{ avec } (a > 0)$$

Indication : Pour normaliser une fonction, il faut la diviser par la racine carrée de l'intégrale du carré de son module. Si une fonction diverge, elle n'est pas normalisable.

Problème IV.77 – Indiquer, parmi les fonctions suivantes, celles qui sont normalisées sur l'espace à deux dimensions précisé :

- $\begin{array}{l} \text{(a) } (x,y) \longmapsto \mathrm{e}^{-(x^2+y^2)/2} \text{ avec } (x,y) \in \mathbb{R}^2_+ \\ \text{(b) } (x,y) \longmapsto \mathrm{e}^{-(x+y)/2} \text{ avec } (x,y) \in \mathbb{R}^2_+ \\ \text{(c) } (x,y) \longmapsto \gamma \sin(\pi x/a) \sin(\pi y/b) \text{ avec } x \in [0;a], \, y \in [0;b], \, \text{et} \end{array}$

$$\gamma = \left(\frac{4}{ab}\right)^{1/2}$$

Normaliser celles qui ne le sont pas. Pour cela, on donne α et α sont deux constantes scalaires :

$$\int dx \sin^2(\alpha x) = \left[x \longmapsto \frac{x}{2} - \frac{\sin(2\alpha x)}{4\alpha} + C \right]$$

Indication: Pour normaliser une fonction, il faut la diviser par la racine carrée de l'intégrale du carré de son module.

Problème IV.78 – Parmi les fonctions suivantes, déterminer lesquelles sont acceptables en tant que fonction pouvant représenter un état quantique physique, dans l'intervalle considéré:

- (a) $x \longmapsto 1/x \text{ sur } \mathbb{R}_+$
- (b) $x \longmapsto e^{-2x} \sinh(x) \operatorname{sur} \mathbb{R}_+$
- (c) $x \longmapsto e^{-x} \cos(x) \operatorname{sur} \mathbb{R}_+$
- (d) $x \longmapsto e^x \operatorname{sur} \mathbb{R}$

Indication: Pour représenter un état physique, une fonction d'onde doit être normalisée ou, a minima, normalisable. Pour normaliser une fonction, il faut la diviser par la racine carrée de l'intégrale du carré de son module. Si une fonction diverge, elle n'est pas normalisable.

Problème IV.79 – Trouver la constante de normalisation des fonctions propres de l'hamiltonien d'une particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire, et montrer que ces fonctions sont orthogonales deux à deux.

Indication: Il faut penser à la formule de duplication trigonométrique menant à

$$\sin^2 z = \frac{1 - \cos(2z)}{2}$$

et à la formule d'addition trigonométrique menant à

$$2\sin(z_1)\sin(z_2) = \cos(z_1 - z_2) - \cos(z_1 + z_2).$$

Ces deux formules peuvent se déduire des formules de trigonométrie rappelées dans la partie prérequis de ce polycopié.

Problème IV.80 – Soit une particule dans une boîte unidimensionnelle de longueur a. Calculer la probabilité de trouver cette particule à une position entre 0 et a/2.

Indication: On intègre le carré du module d'une fonction propre normalisée quelconque (n'importe quelle valeur de nombre quantique, laissée comme paramètre) caractéristique de ce modèle en utilisant les bornes appropriées, et on en déduit une valeur constante, i.e., indépendante du nombre quantique associé à la fonction propre.

Problème IV.81 – À l'aide de l'identité trigonométrique $\sin(2\theta) = 2\sin(\theta)\cos(\theta)$, montrer que

$$\int_0^a \mathrm{d}x \, \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 0.$$

Indication: Simple application du calcul intégral et de la trigonométrie. Se reporter à la partie prérequis de ce polycopié.

Problème IV.82 – Calculer l'espérance et la déviation standard sur la mesure de la position et l'impulsion d'une particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire. Pour cela, on donne $[\alpha$ et C sont deux constantes scalaires]:

$$\int dx \, x \sin^2(\alpha x) = \left[x \longmapsto \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2\alpha x)}{4\alpha} - \frac{\cos(2\alpha x)}{8\alpha^2} + C \right]$$

et

$$\int \mathrm{d}x\, x^2 \sin^2(\alpha x) = \left[x \longmapsto \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4\alpha} - \frac{1}{8\alpha^3} \right) \sin(2\alpha x) - \frac{x \cos(2\alpha x)}{4\alpha^2} + C \right].$$

Indication : On pose et calcule l'intégrale correspondante pour la position, ainsi que son carré, en utilisant les deux relations mathématiques données dans l'énoncé. On en déduit la déviation standard sur la position. Pour l'impulsion, on utilise le résultat prouvé au problème IV.81. On répète le calcul d'espérance pour le carré de l'impulsion, dans lequel on voit apparaître l'intégrale du carré d'un sinus comme lors de la normalisation de la fonction d'onde au problème IV.79.

Problème IV.83 — Calculer le produit des déviations standard sur la position et l'impulsion de la particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire de longueur a, et vérifier que ce produit satisfait bien la relation d'incertitude d'Heisenberg.

Indication: Utiliser simplement les résultats du problème IV.82.

Problème IV.84 – Le potentiel du puits infini est symétrique par rapport à a/2. Vérifier que ses solutions φ_n sont symétriques ou anti-symétriques par rapport à cette valeur selon la parité de l'indice n. *Indication*: Utiliser les formules d'addition et la parité des fonctions cos et sin.

Problème IV.85 – Considérer le problème de la particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire dont les murs sont situés en (x = -a) et en (x = a). Montrer que les énergies sont égales à celles d'une boîte située entre (x = 0) et (x = 2a), mais que les fonctions propres de l'hamiltonien ne sont plus les mêmes et que, dans ce cas, elles s'écrivent

$$\psi_n(x) = \frac{1}{a^{1/2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

lorsque n est pair, et

$$\psi_n(x) = \frac{1}{a^{1/2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

lorsque n est impair.

Indication: On écrit la solution générale de l'équation de Schrödinger ainsi obtenue:

$$A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

avec $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$. On écrit ensuite les deux conditions limites et on soustrait les résultats. La solution générale consiste à poser

$$k = \frac{n\pi}{2a}$$

avec $n \in \mathbb{N}^*$. Les conditions limites sont satisfaites lorsque B=0 si n est impair, et A=0 si n est pair. On écrit les deux solutions correspondantes, que l'on normalise séparément, et on en déduit l'énergie. On voit que l'on obtient la même énergie que celle que l'on obtiendrait avec une particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire de longueur 2a.

Problème IV.86 – On considère une particule de masse m astreinte à se déplacer dans le potentiel $V_{\infty}(x,y)$ égal à zéro si (0 < x < a) et (0 < y < b) et à l'infini dans le contraire. **1.** Vérifier que ce potentiel peut s'écrire sous la forme séparable

$$V_{\infty}(x,y) = V_{\infty}^{x}(x) + V_{\infty}^{y}(y),$$

où l'on explicitera $V_{\infty}^{x}(x)$ et $V_{\infty}^{y}(y)$. 2. En déduire les énergies et les solutions du puits infini bidimensionnel.

3. Si (a = b), calculer en unités $\hbar^2/(2ma^2)$ les quatre premiers niveaux d'énergie, ainsi que leur dégénérescence. On explicitera, pour chacun de ces niveaux, les indices n_x et n_y associés.

Indication : 1. Les conditions sur le potentiel est séparé en deux conditions sur les variables x et y, indépendantes. L'hamiltonien est donc bien séparable. 2. Les énergies sont les sommes d'énergie des cas unidimensionnels constitutifs du problème global. 3. Simple application algébrique dans la sous-question 2. ci-avant.

Problème IV.87 — Donner l'expression des énergies et des fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule libre dans une boîte tridimensionnelle (non-nécessairement cubique).

Indication: Simple extension tridimensionnelle du problème bidimensionnel du problème IV.86.

Problème IV.88 – Soient x, y et z les trois coordonnées cartésiennes et q_1 , q_2 et q_3 trois coordonnées curvilignes. Un élément de volume $\mathrm{d}V$ dans ce système de coordonnées se calcule comme

$$dV = \prod_{i=1}^{3} h_i dq_i,$$

avec

$$h_i^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2.$$

Le laplacien s'écrit, dans le système de coordonnées curvilignes,

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \right].$$

1. Les coordonnées cylindriques circulaires (r, ϕ, z) sont définies comme

$$0 \le r < \infty$$
, $0 \le \phi < 2\pi$, $-\infty < z < \infty$,

avec la correspondance avec les coordonnées cartésiennes suivante :

$$x = r\cos(\phi), y = r\sin(\phi), z = z.$$

Déduire que le laplacien en coordonnées polaires planes (r, ϕ) de celui en coordonnées cylindriques en posant que la valeur de z est constante et égale à zéro.

2. Les coordonnées sphériques polaires (r, θ, ϕ) sont définies comme

$$0 \le r < \infty$$
, $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \phi < 2\pi$,

avec la correspondance avec les coordonnées cartésiennes suivante :

$$x = r\sin(\theta)\cos(\phi), y = r\sin(\theta)\sin(\phi), z = r\cos(\theta).$$

Construire un élément de volume dV en coordonnées sphériques polaires, ainsi que l'opérateur laplacien. Calculer le volume d'une sphère.

Indication : 1. Tout est donné dans l'énoncé. On pourra vérifier le résultat dans la partie *prérequis* du polycopié. 2. Il suffit d'appliquer la formule. En intégrant pour trouver le volume d'une sphère, on pourra vérifier le résultat dans la partie *prérequis* du polycopié.

Problème IV.89 – Sachant que, si s, t, u et v sont quatre vecteurs,

$$\langle s \times t, u \times v \rangle = \langle s, u \rangle \langle t, v \rangle - \langle s, v \rangle \langle t, u \rangle$$

qu'en mécanique classique le vecteur moment cinétique (de norme L) est défini comme le produit vectoriel du vecteur position et du vecteur impulsion ($\mathbf{r} \times \mathbf{p}$) et que, pour une particule de masse au repos m en

mouvement de rotation avec un rayon r variable ou non, son moment d'inertie est défini par $I = mr^2$, montrer qu'en mécanique classique, l'énergie cinétique s'exprime comme

$$T = \frac{L^2}{2I}.$$

Indication : On applique la formule donnée dans l'énoncé, en se souvenant que l'énergie cinétique en mécanique classique s'écrit $p^2/(2m) = mv^2/2$ et que, dans un mouvement de rotation, le vecteur position est orthogonal au vecteur vitesse linéaire et donc, par extension, au vecteur impulsion.

Problème IV.90 – Donner l'expression de l'opérateur moment cinétique orbitalaire en mécanique quantique en coordonnées cartésiennes et montrer qu'il est hermitien.

Indication : On applique simplement la définition du produit vectoriel. En prenant l'adjoint de l'opérateur, on voit que les composantes de celui-ci sont toutes hermitiennes et on conclut.

Problème IV.91 — Calculer le commutateur entre toutes les paires de composantes (x, y et z) de l'opérateur moment cinétique orbitalaire. En déduire l'expression du produit vectoriel de l'opérateur moment cinétique avec lui-même en mécanique quantique.

Indication : Simple application algébrique pour les commutateurs de composantes. Une fois chaque commutateur évalué, et le carré de l'opérateur moment cinétique orbitalaire écrit, on identifie les commutateurs dans les composantes du carré de l'opérateur moment cinétique orbitalaire.

Problème IV.92 – Montrer que chaque composante (x, y et z) de l'opérateur moment cinétique orbitalaire commute avec le carré de l'opérateur moment cinétique orbitalaire.

Indication : Le carré de l'opérateur moment cinétique correspond au carré de la norme de cet opérateur vectoriel, c'est-à-dire à la somme du carré des opérateurs-composantes. On introduit cela dans chaque commutateur à évaluer.

Problème IV.93 – Considérer le problème aux valeurs propres

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} = -m^2\Phi(\phi),$$

m étant un nombre réel (ni imaginaire ni complexe). Les deux fonctions propres dégénérées de $\hat{A} = d^2/d\phi^2$ avec pour valeur propre $-m^2$ sont définies comme

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi} \text{ et } \Phi_{-m}(\phi) = e^{-im\phi}.$$

Montrer que toute combinaison linéaire de ces deux fonctions propres est également une fonction propre de \hat{A} avec la même valeur propre que Φ_m et Φ_{-m} .

Indication: On applique simplement le carré de l'opérateur différentiel à une combinaison linéaire quelconque des deux solutions.

Problème IV.94 – Trouver la constante de normalisation des fonctions propres de l'hamiltonien d'une particule libre sur un cercle.

Indication : Il s'agit d'une simple intégrale à calculer, dont la valeur se révélera être indépendante du nombre quantique caractéristique de la fonction propre normalisée.

Problème IV.95 — Montrer qu'ainsi les fonctions propres de l'hamiltonien d'une particule libre sur un cercle forment une base orthonormée.

Indication : On calcule le produit scalaire entre deux solutions normalisées quelconques et, en développant l'exponentielle à intégrer en une somme simple de sinus et de cosinus, on constate que l'on obtient un delta de Kronecker.

Problème IV.96 – L'équation de Legendre associée s'écrit $[\beta \text{ et } m \text{ sont des constantes}]$:

$$\sin(\theta) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \sin(\theta) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \Theta(\theta) + (\beta \sin^2(\theta) - m^2) \Theta(\theta) = 0$$

avec, dans le cas de la particule sur une sphère ou du rotateur rigide tridimensionnel,

$$\beta = \frac{2IE}{\hbar^2}.$$

Poser $x := \cos(\theta)$ et $P(x) := \Theta(\theta)$ et montrer que l'équation de Legendre associée devient

$$(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} P(x) - 2x \frac{d}{dx} P(x) + \left[\beta - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] P(x) = 0.$$

La résolution de cette équation fait apparaître que β doit être égal à une constante, $\ell(\ell+1)$, avec $\ell \in \mathbb{Z}$. Indication: On développe la dérivation par rapport à θ dans le premier terme du membre de gauche, puis on pose $x := \cos(\theta)$ et $P(x) := \Theta(\theta)$. On écrit ensuite les dérivées première et seconde de Θ par rapport à θ en termes de x, dx et P(x) exclusivement grâce à une chaîne de dérivations. On injecte puis on divise par la gauche par $(1-x^2)$ et on obtient le résultat.

Problème IV.97 – Les harmoniques sphériques non-normalisées sont des fonctions définies par

$$(\theta, \phi) \longmapsto \tilde{Y}_{\ell}^{m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m-|m|)/2} P_{\ell}^{|m|}[\cos(\theta)] e^{im\phi}.$$

avec les $P_\ell^{|m|}$ appelées fonctions de Legendre associées vérifiant la relation d'orthogonalité et les deux relations de récurrence suivantes [on pose $u=\cos(\theta),\,P_0^0(u)=1,$ et $P_1^0(u)=u]$:

Orthogonalité

$$\int_{-1}^{1} du \, P_{\ell}^{|m|}(u) P_{\ell'}^{|m|}(u) = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!} \delta_{\ell,\ell'}.$$

Récurrence I

$$(\ell-|m|+1)P_{\ell+1}^{|m|}(u)=(2\ell+1)uP_{\ell}^{|m|}(u)-(\ell+|m|)P_{\ell-1}^{|m|}(u).$$

Récurrence II

$$P_{\ell}^{|m|+1}(u) = (1-u^2)^{-1/2} [(\ell-|m|)u P_{\ell}^{|m|}(u) - (\ell+|m|) P_{\ell-1}^{|m|}(u)].$$

Montrer que les harmoniques sphériques normalisées s'écrivent

$$(\theta, \phi) \longmapsto Y_{\ell}^{m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m-|m|)/2} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_{\ell}^{|m|}[\cos(\theta)] e^{im\phi}.$$

et donner l'expression des harmoniques sphériques Y_0^0 , Y_1^0 , Y_1^0 , Y_1^{-1} , Y_1^1 , Y_2^0 , Y_2^{-2} , Y_2^{-1} , Y_2^1 et Y_2^2 . Indication : On utilise la relation d'orthogonalité avec $\ell=\ell'$ pour normaliser les harmoniques sphériques, puis on injecte simplement les valeurs de ℓ et m dans l'expression ainsi obtenue et on utilise la première ou bien la seconde relation de récurrence pour déduire les harmoniques sphériques demandées.

Problème IV.98 – Les harmoniques sphériques satisfont la relation d'orthonormalité

$$\left\langle Y_{\ell'}^{m'}|Y_{\ell}^{m}\right\rangle = \delta_{\ell',\ell}\delta_{m',m}.$$

Montrer que

$$\cos(\theta)Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{\ell+m+1}{(2\ell+1)(2\ell+3)(\ell-m+1)}}Y_{\ell+1}^{m}(\theta,\phi) + \sqrt{\frac{(\ell-|m|)(\ell+|m|)}{(2\ell-1)(2\ell+1)}}Y_{\ell-1}^{m}(\theta,\phi),$$

et que

$$\langle Y_{\ell'}^{m'} | \cos(\theta) | Y_{\ell}^{m} \rangle \propto \delta_{|\ell'-\ell|,1} \delta_{m,m'}.$$

Indication : On écrit $\cos(\theta)Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi)$ puis on transforme l'expression en utilisant celle de Y obtenue au problème IV.97 et en posant $u=\cos(\theta)$. On utilise la relation de récurrence I du problème IV.97 et on déduit le premier résultat. Le second se déduit naturellement du premier grâce à la relation d'orthogonalité rappelée en début d'énoncé.

Problème IV.99 – Donner l'équation aux valeurs propres des opérateurs \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z dans le cas — pour \hat{H} — de la particule libre sur une sphère et du rotateur rigide tridimensionnel, en explicitant l'expression des valeurs propres.

Indication: Les fonctions propres sont les harmoniques sphériques dans les trois cas. Pour \hat{H} les valeurs propres sont $\hbar^2\ell(\ell+1)/(2I)$ avec $\ell\in\mathbb{N}$ et $I=\mu r^2$ où μ est la masse réduite. Pour \hat{L}^2 , les valeurs propres sont $\hbar^2\ell(\ell+1)$ et pour \hat{L}_z , les valeurs propres sont $\hbar m_\ell$ (ou, écrit plus simplement, $\hbar m$) avec m_ℓ (ou bien m) tels que $|m| \leq \ell$.

Problème IV.100 – Prouver par l'absurde que $|m| \le \ell$.

Indication: Appliquer $\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$ à une harmonique sphérique quelconque. La somme des deux observables L_x^2 et L_y^2 ne pouvant être négative, on écrit une première inégalité entre $\ell(\ell+1)$ et m^2 . On prouve ensuite par l'absurde le résultat demandé.

Problème IV.101 – Prouver que Y_0^0 , Y_1^0 et $-Y_1^1$ sont normalisées et orthogonales deux à deux.

Indication: En intégrant (on n'oublie pas le $\sin(\theta)$ dans l'intégrale sur θ) pour vérifier la normalisation, on utilise la méthode de changement de variable en posant $x=\cos(\theta)$. Pour l'orthogonalité, le principe est le même sauf pour une intégrale dans laquelle on utilise simplement le fait que l'intégrale de l'exponentielle complexe dans le produit scalaire est nulle en développant cette exponentielle comme une somme simple de sinus et de cosinus.

Problème IV.102 – Prouver que Y_1^{-1} est normalisée et orthogonale à Y_2^1 .

Indication: En intégrant (on n'oublie pas le $\sin(\theta)$ dans l'intégrale \sup pour vérifier la normalisation, on utilise la méthode de changement de variable en posant $x = \cos(\theta)$. Pour l'orthogonalité, on utilise simplement le fait que l'intégrale de l'exponentielle complexe dans le produit scalaire est nulle en développant cette exponentielle comme une somme simple de sinus et de cosinus.

Problème IV.103 – Prouver que Y_0^0 , Y_1^0 , $-Y_1^1$, et Y_1^{-1} sont fonctions propres de \hat{L}^2 . Indication: On applique simplement l'opérateur \hat{L}^2 aux fonctions demandées et on trouve bien que cela

Indication: On applique simplement l'opérateur \hat{L}^2 aux fonctions demandées et on trouve bien que cela retourne les fonctions elles-mêmes multipliées par un scalaire constant.

Problème IV.104 – Montrer que Y_1^{-1} n'est pas fonction propre de

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(-\sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right).$$

Indication: On se souvient que la cotangente est égale au cosinus divisé par le sinus. On applique l'opérateur à Y_1^{-1} et on voit que l'on n'obtient pas Y_1^{-1} multiplié par un scalaire constant.

Indication : On utilise le résultat du problème I.25 pour la partie cinétique, et la partie potentielle est de toute façon réelle.

Problème IV.106 – Montrer que le spectre d'absorption rotationnel d'une molécule diatomique est constitué d'une série de raies équidistantes lorsque modélisé par un rotateur rigide, sachant que dans le cadre d'un tel modèle les transitions se produisent entre niveaux adjacents. Cette dernière affirmation sera démontrée dans un autre exercice.

Indication : On calcule une différence d'énergie avec une valeur quelconque de départ pour le nombre quantique associé au moment cinétique orbitalaire, mais en imposant une variation de ce nombre quantique égale à l'unité.

Problème IV.107 – Montrer que les transitions entre niveaux de rotation d'une molécule diatomique modélisée par un rotateur rigide se produisent dans la région des micro-ondes ou dans l'infrarouge lointain pour une molécule diatomique dont la valeur du moment d'inertie est de 5×10^{-46} kg m².

Indication: Simple application numérique en utilisant le résultat du problème IV.106, pour obtenir une fréquence de l'ordre de 10^{10} s⁻¹.

Problème IV.108 – 1. Construire, à partir du modèle classique, le potentiel harmonique sous la forme

$$V(x) = \frac{\mu \omega^2 x^2}{2}$$

utilisé dans l'hamiltonien quantique de l'oscillateur harmonique linéaire, avec $\omega = (k/\mu)^{1/2}$. 2. Montrer que k s'exprime en J/m^2 .

Indication: On part du potentiel harmonique

$$V(r) = V(r_{eq}) + \frac{1}{2}V''(r_{eq})(r - r_{eq})^2,$$

et on utilise la loi de Newton $F = \mu a = \mu \ddot{r}$ que l'on égale à l'opposé de la dérivée par rapport à r du potentiel. En posant $x = r - r_{eq}$ et $k = V''(r_{eq})$, on trouve

$$-kx(t) - \mu \ddot{x}(t) = 0,$$

qui est une équation différentielle linéaire à coefficients constants du second ordre dont la solution générale s'exprime comme

$$x(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t),$$

avec $\omega = \sqrt{k/\mu}$. On retrouve bien le potentiel de Hooke $kx^2/2$, dont l'opposé de la dérivée donne l'expression de la force de rappel du ressort -kx, en introduisant ω dans l'expression de V fournie dans l'énoncé. 2. On se souvient que $E = \hbar \omega$ et que μ a la dimension d'une masse.

Problème IV.109 – On considère un oscillateur harmonique à deux dimensions décrit par l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\mu\omega^2}{2} (x^2 + y^2) \hat{\mathbb{1}}.$$

1. Quels sont les niveaux d'énergie \mathcal{E}_N de cet oscillateur et leur degré de dégénérescence g_N ? Ici, N est le nombre total de quanta d'excitation. Écrire l'expression des fonctions propres correspondant aux trois premiers niveaux d'énergie. 2. Montrer que l'opérateur

$$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

est hermitien et 3. qu'il commute avec \hat{H} .

Indication: 1. L'hamiltonien est séparable, donc on se sert des résultats sur l'oscillateur harmonique linéaire. 2. \hat{L}_z est le produit de deux opérateurs anti-hermitien. 3. Le commutateur s'écrit comme une somme de deux commutateurs. On rappelle que deux opérateurs qui portent sur des variables différentes commutent, et qu'un opérateur commute avec n'importe laquelle de ses puissances. Problème IV.110 – Les polynômes d'Hermite obéissent à la relation de récurrence

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y)$$
 avec $(n \in \mathbb{N})$

avec la convention $H_0(y) = 1$ et $H_1(y) = 2y$. Trouver H_3 .

Indication : Il s'agit là d'une simple application algébrique. On trouve d'abord H_2 avec la relation de récurrence, puis H_3 .

Problème IV.111 – Les polynômes d'Hermite constituent une famille de polynômes orthogonaux vérifiant la relation

$$\int_{\mathbb{D}} dy H_n(y) e^{-y^2} H_m(y) = 2^n \sqrt{\pi} n! \delta_{n,m}.$$

À partir de ce résultat, normaliser les fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique linéaire

$$x \longmapsto \varphi_n(x) = e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$$

avec

$$\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}.$$

Indication : La fonction est à valeurs réelles. On intègre le carré de la fonction, puis on la normalise en la divisant par la racine carrée de l'intégrale de son carré.

Problème IV.112 – Sachant que, si a est un réel strictement positif,

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x \, x^2 \mathrm{e}^{-ax^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}},$$

prouver que les deux fonctions propres de l'oscillateur harmonique linéaire de plus basse énergie, φ_0 et φ_1 , sont normalisées et orthogonales.

Indication: Simples calculs d'intégrales.

Problème IV.113 – Sachant que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}H_n(y) = 2nH_{n-1}(y),$$

montrer que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}H_n(y) = 2yH_n(y) - H_{n+1}(y).$$

Indication: Immédiat avec la relation de récurrence du problème IV.110.

Problème IV.114 – L'énergie potentielle V(R) de la molécule diatomique HCl peut être décrite par la fonction de Morse :

$$V(r) = D \left(1 - e^{-\alpha (R - R_{eq})} \right)^2 - D,$$

avec $D=7.31\ 10^{-19}\ \mathrm{J},\ \alpha=1.82\ 10^{10}\ \mathrm{m}^{-1}$ et $R_{\mathrm{eq}}=1.25\ 10^{-10}\ \mathrm{m}.$ 1. On effectue un développement au second ordre du potentiel autour de la position d'équilibre R_{eq} :

$$V(R) = V_{\rm eq} + \frac{1}{2}V_{\rm eq}'' \times (R - R_{\rm eq})^2 + \mathcal{O}(R^3).$$

Exprimer V''_{eq} en fonction de D et α . 2. On rappelle que les valeurs propres de l'équation de Schrödinger stationnaire pour l'oscillateur harmonique linéaire a des valeurs propres quantifiées

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ avec } n \in \mathbb{N}.$$

Donner, en eV, l'énergie des quatre premiers niveaux vibrationnels de la molécule. Comparer aux énergies

exactes du potentiel de Morse:

$$E_n = -D\left[1 - \frac{\alpha\hbar}{2\mu D}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2.$$

Indication : 1. Dériver deux fois V par rapport à R. On trouve $V_{\rm eq}$ et $V''_{\rm eq}$ en fonction de α et D. On sait que $\omega = \sqrt{V''_{\rm eq}/\mu}$. 2. Ne pas oublier de retrancher D aux valeurs propres de l'oscillateur harmonique linéaire puisqu'ici $V_{\rm eq}$ n'est pas choisi nul.

Problème IV.115 – On se propose dans cet exercice d'étudier la spectroscopie vibrationnelle de la molécule HCN. 1. Combien de modes normaux cette molécule possède-t-elle? 2. [Facultative car nécessite des connaissances en théorie des groupes] En utilisant la table de caractères de $C_{\infty v}$, déduire les modes de vibration.

$C_{\infty \nu}$	E	2C _φ	$\infty \sigma_{v}$	Λ		
Σ^+	1	1	1	0	z	$x^2 + y^2; z^2$
Σ^-	1	1	-1	0	R_z	
П	2	$2\cos \phi$	0	1	$(x,y),(R_x,R_y)$	(xz, yz)
Δ	2	$2\cos 2\phi$	0	2	-	$(x^2-y^2;xy)$
Φ	2	$2\cos 3\phi$	0	3		

3. En première approximation, on peut décrire le mouvement de pliage de la molécule HCN par celui de l'atome d'hydrogène dans un plan perpendiculaire à l'axe de la molécule, et passant par sa position d'équilibre (x=0,y=0), avec la liaison CN supposée rigide. En coordonnées cartésiennes (x,y), l'hamiltonien associé à ce mouvement s'écrit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm H,CN}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_0 + \frac{1}{2} V_0''(x^2 + y^2).$$

Écrire l'hamiltonien sous une forme séparable et en déduire l'expression de l'énergie totale de ces deux oscillateurs en fonction de n_x et n_y , nombres de quanta de vibration dans chacun d'entre eux (on utilisera la notation $\omega = \sqrt{k/\mu_{\rm H,CN}}$). 4. Quelle est la dégénérescence g_N du niveau associé $N = n_x + n_y$ quanta? 5. [Facultative car nécessite des connaissances en théorie des groupes] D'après la théorie des groupes, chaque niveau d'énergie vibrationnel doit correspondre à une ou plusieurs représentations irréductibles du groupe de symétrie de la molécule. En vous aidant de la forme des fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique linéaire,

$$\varphi_0(x) \propto e^{-\alpha x^2}, \ \varphi_1(x) \propto x e^{-\alpha x^2}, \ \varphi_2(x) \propto (4x^2 - 2)e^{-\alpha x^2},$$

déterminer les représentations irréductibles associées aux trois premiers niveaux d'énergie.

6. On considère maintenant l'anharmonicité qui modifie l'énergie de chaque oscillateur selon

$$E_n^{\mathrm{anh}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 A$$

avec $A \ll \hbar \omega$. Déterminer les énergies, en fonction de \hbar , ω et A, des quatre premiers niveaux.

Indication: 1. Attention, la molécule est linéaire, donc on a 3N-5 modes normaux. 2. On écrit la représentation pour les 3N coordonnées, à laquelle on retranche celle de rotation-translation pour ne conserver que celle de vibration. On trouve deux mouvements de pliage dégénérés et deux mouvements d'élongation. 3. Cette forme est séparable, donc on écrit les fonctions propres comme des produits de fonctions propres d'une variable et les valeurs propres comme des sommes de valeurs propres individuelles. 4. La dégénérescence g_N correspond au nombre de couples (n_x, n_y) tels que $n_x + n_y = N$. 5. L'état fondamental est de symétrie \sum^+ , le premier état excité est de symétrie \prod , et pour le deuxième état excité on doit faire une combinaison linéaire de fonctions propres pour trouver une correspondance dans la table de caractères. 6. On applique simplement la formule.

Problème IV.116 – On considère une molécule diatomique A–B, et une réécriture de l'hamiltonien en

coordonnées sphériques comme

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + \hat{V}(r).$$

Cette forme alternative de la partie radiale du laplacien sera prouvée égale à celle déduite à l'exercice IV.88 dans un exercice ultérieur. 1. Afin d'étudier la spectroscopie de cet hamiltonien, on commence par faire l'approximation

$$1/r^2 \simeq 1/r_{\rm eq}^2$$
.

Écrire le nouvel hamiltonien sous une forme séparable, et en déduire que les solutions peuvent s'écrire sous la forme

$$\Psi_{n,j,m}(r,\theta,\phi) = U_n(r)Y_i^m(\theta,\phi),$$

où l'on spécifiera l'équation différentielle à laquelle doivent satisfaire les fonctions U_n . 2. Si on effectue l'approximation harmonique

$$V(r) = V_{\rm eq} + \frac{\mu\omega^2}{2}(r - r_{\rm eq})^2$$

et que l'on effectue le changement de fonction

$$U_n(r) = \frac{u_n(r)}{r},$$

écrire la nouvelle équation que doivent satisfaire les solutions u_n . À quel cas étudié précédemment correspondelle? Notons au passage que les fonctions propres associées à l'oscillateur harmonique linéaire, qui forment une base orthonormée, vérifient également

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, u_m^*(x) \, x \, u_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right).$$

3. En déduire les énergies de vibration-rotation $E_{n,j}$ et leur dégénérescence $g_{n,j}$. 4. Si maintenant nous souhaitons étudier le spectre de vibration-rotation de la molécule A–B sous l'influence d'un champ électrique \mathbf{E} dirigé selon l'axe Oz, on commence tout d'abord par écrire le moment dipolaire de transition, en première approximation, comme

$$\boldsymbol{\mu} = [\mu_{\mathrm{eq}} + \mu'_{\mathrm{eq}}(r - r_{\mathrm{eq}})] \frac{\mathbf{r}}{r}$$

qui induit le terme de couplage $-\mu \cdot \mathbf{E}$, responsable des transitions possibles. Une transition depuis l'état initial $|\Psi_{n_i,j_i,m_i}\rangle$ vers l'état final $|\Psi_{n_f,j_f,m_f}\rangle$ sera permis si l'élément de matrice suivant est non-nul :

$$\langle \Psi_{n_i,j_i,m_i} | \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E} | \Psi_{n_f,j_f,m_f} \rangle$$
.

Établir les règles de sélection pour ces transitions, c'est-à-dire les relations existant entre les nombres quantiques n_i et n_f ainsi qu'entre les nombres quantiques j_i et j_f pour que la transition rovibrationnelle soit permise. **5.** Exprimer l'énergie des photons qui seront absorbés depuis un état initial $(n = 0, j = j_0)$ donnant lieu à une transition rovibrationnelle. On posera

$$B = \frac{\hbar^2}{2\mu r_{\rm eq}}.$$

6. Esquissez l'allure du spectre d'absorption, c'est-à-dire les différentes raies correspondant aux transitions permises, et ce dans le cas où seuls les niveaux rotationnels initiaux $j_i = 0, 1, 2$ et 3 sont peuplés initialement. On indiquera pour chaque raie la transition correspondante et sa position (en unités B) vis-à-vis de l'énergie $E = \hbar \omega$.

Indication: 1. Le $\frac{1}{r^2}$ dans la partie angulaire de l'hamiltonien devient une constante, l'hamiltonien devient séparable. On a

$$\hat{h}(r)U_n(r) = E_n U_n(r),$$

où $\hat{h}(r)$ correspond à la partie radiale de \hat{H} . La partie angulaire rend simplement un problème aux valeurs propres du rotateur rigide. **2.** Si l'on effectue le changement préconisé, puis qu'on multiplie par la gauche par r, et que l'on sait que le potentiel est harmonique, on se retrouve avec l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique unidimensionnel. **3.** On additionne les énergie de l'oscillateur harmonique et du rotateur rigide. **4.** L'élément de matrice s'écrit comme une somme, et chaque terme de la somme se factorise en une partie radiale pour laquelle la relation d'orthogonalité donnée dans l'énoncé, ainsi que celle donnée au problème IV.98 nous livrent une voie vers deux jeux de règles de sélection : un jeu de règles pour un spectre de rotation pure, et un jeu de règles de sélection pour le spectre de rotation-vibration. On voit notamment que la molécule doit être polaire pour avoir un spectre de rotation pure, et que la transition doit s'accompagner d'une variation de moment dipolaire pour une transition de rotation-vibration **5.** On écrit l'énergie de départ et d'arrivée dans le cas où j augmente d'une unité et dans le cas où j diminue d'une unité. On voit que le ΔE est égal à $\hbar\omega + 2B(j_0+1)$ dans un cas (on parle de branche "R" du spectre) et à $\hbar\omega - 2Bj_0$ dans l'autre (on parle de branche "P" du spectre). **6.** Reporter simplement les résultats de **5.** sur un spectre.

V. Atome d'hydrogène et hydrogénoïdes

Problème V.117 – Prouver que les trois formes suivantes pour la partie radiale du laplacien en coordonnées sphériques sont égales :

$$\hat{\Delta}_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

Indication : On développe la première forme en n'oubliant pas d'appliquer l'opérateur à une fonction-test, et on tombe sur la troisième. On fait pareil pour la deuxième forme et on retombe sur la troisième forme. Problème V.118 – L'opérateur énergie cinétique pour une particule de masse m en coordonnées sphériques en mécanique quantique, i.e.,

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

peut s'écrire avec une structure similaire à celle rencontrée en mécanique classique, c'est-à-dire

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\hat{\Delta}_r + \frac{1}{r^2} \hat{\Delta}_{\theta,\phi} \right) = \frac{1}{2m} \hat{P}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2},$$

avec $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Delta}_{\theta,\phi}$ et $\hat{P}_r^2 = -\hbar^2 \hat{\Delta}_r$: nous avons, par identification,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

que nous avons déjà rencontré, et

$$\hat{P}_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right).$$

On voit donc que \hat{P}_r^2 correspond à la partie radiale du laplacien multipliée par $-\hbar^2$. Nous allons montrer qu'en revanche, \hat{P}_r n'est pas la composante radiale du gradient multipliée par $(-\hbar i)$: en mécanique classique, la composante radiale de l'impulsion, i.e.,

$$p_r = \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r},$$

fait intervenir un produit scalaire qui est commutatif :

$$\mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{p}.$$

Le choix de l'ordre des vecteurs dans ce produit scalaire est donc arbitraire. En mécanique quantique, étant

donné la non-commutativité des opérateurs position et impulsion, son expression doit donc être symétrisée:

$$\hat{P}_r = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{P}} \, \cdot \, \frac{\hat{\mathbf{R}}}{R} + \frac{\hat{\mathbf{R}}}{R} \, \cdot \, \hat{\mathbf{P}} \right).$$

En effet, ni

 $-\hbar\mathrm{i}\left(\hat{\boldsymbol{\nabla}}\,\cdot\,\frac{\hat{\mathbf{R}}}{R}\right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2,$

ni

$$-\hbar \mathrm{i} \left(\frac{\hat{\mathbf{R}}}{R} \, \cdot \, \hat{\boldsymbol{\nabla}} \right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial r}$$

ne rend la bonne expression pour \hat{T} lorsque mis au carré et divisé par 2m. 1. Montrer que, en revanche,

$$\hat{P}_r = \frac{\hbar}{2i} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 + \frac{\partial}{\partial r} \right]$$

car cette expression mène bien à

$$\hat{P}_r^2 = -\hbar^2 \hat{\Delta}_r.$$

2. Montrer ensuite qu'une telle précaution de symétrisation d'une expression classique avant substitution des variables par les opérateurs quantiques correspondants n'est pas nécessaire pour obtenir l'expression de l'opérateur vectoriel $\hat{\mathbf{L}}$ en mécanique quantique, c'est-à-dire, étant donné l'anti-commutation du produit vectoriel, que, bien que, en mécanique classique,

$$\mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{r} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{r} \right),$$

nous avons cette fois-ci

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}} = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{P}} \times \hat{\mathbf{R}} \right).$$

Indication : On applique $\hat{P}_r\hat{P}_r$ à une fonction test et on voit qu'on retombe en effet sur la forme désirée. 2. On voit que l'opérateur quantique $\hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}}$ met en jeu des produits d'opérateurs qui commutent car ils sont composés de facteurs qui portent sur des variables différentes. On a donc $\hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}} = -\hat{\mathbf{P}} \times \hat{\mathbf{R}}$ (on peut s'en rendre également compte en écrivant explicitement les composantes) et la symétrisation est donc superflue. Problème V.119 – Soient $f_{k,\ell}$ les fonctions à valeurs réelles définies par

$$y \longmapsto f_{k,\ell}(y) = e^{-y/2} y^{\ell+1} \mathcal{L}_{k}^{(2\ell+1)}(y)$$

avec $(k \in \mathbb{N})$, $(\ell \in \mathbb{Z})$, $(y \in \mathbb{R}_+)$, et les fonctions de Laguerre associées de degré k et d'ordre $2\ell + 1$ définies par

$$\mathcal{L}_{k}^{(2\ell+1)}(y) = \sum_{p=0}^{k} \frac{(-1)^{p+1}[(k+2\ell+1)!]^{2}y^{p}}{(k-p)!(2\ell+1+p)!p!}$$

et la relation d'orthogonalité

$$\int_0^\infty dy \, f_{k,\ell}(y) f_{k',\ell}(y) = \frac{(2k+2\ell+2)[(k+2\ell+1)!]^3}{k!} \delta_{k,k'}.$$

En résolvant la partie radiale de l'équation de Schrödinger pour les hydrogénoïdes, nous avons fait émerger des fonctions-solutions qui s'écrivaient

$$\tilde{R}_{n,\ell}(r) = -e^{-\alpha_n r/2} (\alpha_n r)^{\ell} \mathcal{L}_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\alpha_n r),$$

avec

$$\alpha_n = \frac{2Z}{na_0}.$$

avec une puissance lième en $\alpha_n r$ dans la définition brute des $\tilde{R}_{n,\ell}$ tandis que nous avions une puissance

 $(\ell+1)$ ième en y dans la définition brute des $f_{k,\ell}$. Montrer qu'après normalisation, on obtient

$$R_{n,\ell}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} e^{-Zr/(na_0)} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{\ell} \mathcal{L}_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right).$$

Indication: En intégrant le carré de $\tilde{R}_{n,\ell}$ (sans oublier de multiplier par r^2 puisqu'on est en coordonnées sphériques), on effectue un changement de variable $y = \alpha_n r$ avec $\alpha_n = 2Z/(na_0)$ et on utilise la relation d'orthogonalité donnée dans l'énoncé (où l'on aura mis k = k'), on trouve le facteur de normalisation et on obtient bien la forme finale donnée dans l'énoncé.

Problème V.120 – Déterminer l'expression des fonctions $R_{n,\ell}$ pour n allant de un à trois et pour ℓ allant de zéro à deux avec $(n > \ell)$.

Indication: Simple application algébrique.

Problème V.121 – Montrer que

$$\forall (n, n') \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*, \, \int_0^\infty \mathrm{d}r \, r^2 R_{n,\ell}(r) R_{n',\ell}(r) = \delta_{n,n'}.$$

Indication : On effectue le changement de variable $y = 2zr/(na_0)$ et on utilise l'orthogonalité des fonctions f où on a bien remplacé k par $n - \ell - 1$ et k' par $n' - \ell - 1$.

Problème V.122 – Les solutions normalisées de l'équation de Schrödinger stationnaire pour les systèmes hydrogénoïdes s'écrivent :

$$(r, \theta, \phi) \longmapsto \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell}^{m}(\theta, \phi),$$

avec les $R_{n,\ell}$ et Y_{ℓ}^m déjà rencontrés. Montrer que ces fonctions forment une base orthonormée.

Indication : Le produit scalaire se factorise en une partie radiale et une partie angulaire. La partie angulaire donne un produit de deux deltas de Kronecker. Celui sur ℓ impose une condition sur le produit scalaire de la partie radiale, et on se retrouve avec un produit de trois deltas de Kronecker : un par nombre quantique.

Problème V.123 – Donner l'expression de toutes les fonctions hydrogénoïdes 1s, 2s, 2p, 3s, 3p et 3d.

Indication: Simple application algébrique.

Problème V.124 – Parmi les combinaisons suivantes :

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{2,1,1}-\psi_{2,1,-1}\right)$$

et

$$-\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\psi_{2,1,-1}+\psi_{2,1,1}\right),\,$$

identifier les fonctions communément appelées $2p_x$ et $2p_y$. Montrer également que la $2p_z$ correspond simplement à la fonction $\psi_{2,1,0}$. Montrer que les fonctions $2p_x$ et $2p_y$ sont également solutions de l'équation de Schrödinger, et déterminer l'énergie qui leur est associée.

Indication: On se rappelle de la définition du cosinus et du sinus en fonctions d'exponentielles complexes. On regarde quelles combinaisons font apparaître x ou y explicitement depuis les coordonnées sphériques. L'énergie associée est simplement celle 2p.

Problème V.125 – Parmi les combinaisons suivantes :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{3,2,-1} - \psi_{3,2,1}),$$

$$-\frac{1}{i\sqrt{2}}(\psi_{3,2,-1} + \psi_{3,2,1}),$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{3,2,-2} + \psi_{3,2,2}),$$

$$\frac{1}{i\sqrt{2}}(\psi_{3,2,2} - \psi_{3,2,-2}),$$

déterminer quelles sont celles que l'on identifie communément comme $3d_{xz}$, $3d_{yz}$, $3d_{x^2-y^2}$ et $3d_{xy}$ Montrer également que la $3d_{z^2}$ correspond à la fonction $\psi_{3,2,0}$.

Indication: On se rappelle de la définition du cosinus et du sinus en fonctions d'exponentielles complexes. On regarde quelles combinaisons font apparaître les variables cartésiennes désirées.

Problème V.126 – Donner le degré de dégénérescence d'un niveau d'énergie hydrogénoïde. On donne pour cela

$$\sum_{k=0}^{K} k = \frac{K(K+1)}{2}.$$

Indication: Il y a n valeurs possibles pour ℓ sachant n. Pour une valeur de ℓ donnée, il y a $2\ell+1$ valeurs de m possibles. L'énergie hydrogénoïde ne dépend que de n.

Problème V.127 — L'espérance se définit de manière intuitive comme la valeur attendue (expectation value en anglais) lorsque l'on moyenne le résultat d'un ensemble de nombreuses expériences portant sur une variable aléatoire. Nous allons ici comparer les notions d'espérance et de maximum de probabilité d'une mesure. L'espérance de la valeur du rayon (distance électron-noyau) d'un électron dans un hydrogénoïde s'écrit comme

$$\langle r \rangle_{n,\ell,m} = \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r \int_0^\pi \sin(\theta) \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \, \psi_{n,\ell,m}^*(r,\theta,\phi) \, r \, \psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi).$$

Montrer que cela peut se réduire à

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \, r D_{n,\ell}(r),$$

où l'on donnera l'expression de $D_{n,\ell}$, définie comme la densité de probabilité radiale, i.e., la densité de probabilité de présence de l'électron entre une sphère de rayon r et une sphère de rayon r+dr. À quoi correspond

$$\int_0^a \mathrm{d}r \, D_{n,\ell}(r)$$

si a est un réel positif, et que vaut la valeur de cette intégrale lorsque a tend vers l'infini?

Indication: La valeur de l'intégrale donne la probabilité de trouver l'électron à l'intérieur d'une boule (sphère pleine) de rayon a. Si le rayon tend vers l'infini, la probabilité vaut un.

Problème V.128 – Trouver à la main les valeurs de $\langle r \rangle_{1,0,0}$ et $\langle r \rangle_{2,0,0}$ – Nous vérifierons ces deux valeurs au problème suivant – et localiser le maximum de densité de probabilité de présence pour les fonctions 1s, 2p et 3d, pour lesquelles on sait que la dérivée première s'annule en un maximum pour un unique point correspondant à une valeur de $D_{n,\ell}$ non-nulle, ce qui évite d'avoir à calculer une dérivée seconde.

Indication : On écrit l'espérance de, et on développe en utilisant le résultat du problème IV.75. Pour trouver le maximum de densité de probabilité, on annule la dérivée première.

Problème V.129 – En utilisant la relation

$$\langle r \rangle_{n,\ell,m} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right) \right],$$

valable pour les hydrogénoïdes, calculer l'espérance sur la valeur du rayon électron-noyau dans H, He^+ et Li^{2+} pour des valeurs de n allant de un à trois.

Indication: Simple application algébrique.

Problème V.130 — Calculer explicitement la valeur de l'espérance sur les opérateurs énergie potentielle et énergie cinétique pour les états 1s, 2s et 3s de l'atome d'hydrogène.

Indication: Application algébrique. On utilisera le résultat du problème IV.75.

Problème V.131 – Soit ψ une fonction propre normalisée de \hat{H} . On a

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi} = \langle \hat{T} \rangle_{\psi} + \langle \hat{V} \rangle_{\psi}$$

où \hat{T} et \hat{V} sont les opérateurs énergie cinétique et énergie potentielle, respectivement. Si le potentiel dépend de N coordonnées (q_1, \ldots, q_N) , et que, pour un s positif, on a

$$V(sq_1,\ldots,sq_N)=s^pV(q_1,\ldots,q_N),$$

on dit que le potentiel est positivement homogène de degré p. Une conséquence d'un théorème appelé

théorème du Viriel stipule que si le potentiel est homogène de degré p, alors

$$\langle \hat{T} \rangle_{\psi} = \frac{p}{p+2} \langle \hat{H} \rangle_{\psi} \quad \text{et} \quad \langle \hat{V} \rangle_{\psi} = \frac{2}{p+2} \langle \hat{H} \rangle_{\psi}.$$

1. Déterminer le degré d'homogénéité du potentiel d'un oscillateur harmonique linéaire et du potentiel coulombien dans l'atome d'hydrogène. Montrer dans le cas de l'oscillateur harmonique linéaire que

$$\langle \hat{T} \rangle_{\psi} = \langle \hat{V} \rangle_{\psi} = \frac{\langle \hat{H} \rangle_{\psi}}{2}$$

2. Montrer également dans le cas de l'atome d'hydrogène que

$$\langle \hat{T} \rangle_{\psi} = - \, \langle \hat{H} \rangle_{\psi} \quad \text{et} \quad \langle \hat{V} \rangle_{\psi} = 2 \, \langle \hat{H} \rangle_{\psi} \, .$$

3. Comparer avec les résultats de l'exercice précédent.

Indication : 1. On effectue tout simplement ce qui est donné dans l'énoncé. Pour l'oscillateur harmonique linéaire, on trouve p = 2. Pour l'atome d'hydrogène, on trouve p = -1. 2. En injectant ces résultats dans ce qui est donné dans l'énoncé, on voit qu'on satisfait bien le résultat attendu. 3. Les résultats coïncident.

VI. Méthodes d'approximation

Problème VI.132 – On considère à nouveau le cas de la particule libre dans une boîte unidimensionnelle linéaire de longueur *a* perturbé par le potentiel linéaire

$$w(x) = \frac{V_0 x}{a}$$

avec V_0 une valeur constante. En utilisant la méthode des perturbations, calculer au premier ordre le déplacement de chaque niveau d'énergie de cette particule.

Indication : La correction à l'énergie au premier ordre s'obtient en calculant l'espérance du terme de perturbation en utilisant les solutions non-perturbées. On aura besoin d'une intégrale donnée dans l'énoncé du problème IV.82.

Problème VI.133 – Soit un oscillateur harmonique linéaire décrit par l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} \hat{\mathbb{1}}$$

que l'on perturbe par le terme quadratique $\hat{\Omega}(x) = \frac{1}{2}\mu\Omega^2x^2\hat{\mathbb{1}}$. Montrer que les nouvelles valeurs propres ont pour expression analytique

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\omega^2 + \Omega^2}.$$

Indication: On ajoute simplement le terme à l'hamiltonien et on voit que la forme reste celle d'un oscillateur harmonique linéaire, on ajoute donc simplement le terme correspondant dans la pulsation, que l'on écrira comme la racine carrée de la somme de deux carrés.

Problème VI.134 – On considère un atome d'hydrogène placé dans un champ électrique uniforme \mathbf{E} , parallèle à l'axe Oz, ce champ étant considéré comme une perturbation vis-à-vis du champ électrique exercé par le proton. L'énergie d'interaction est de la forme $(-\mu \cdot \mathbf{E})$, où μ est le vecteur moment dipolaire électrique. 1. Écrire l'hamiltonien de perturbation \hat{H}' . 2. Quel est le premier déplacement non-nul de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène quand on applique ce champ électrique? 3. On considère le premier niveau électronique excité de l'atome d'hydrogène. Montrer que l'hamiltonien de perturbation commute avec $\hat{\ell}_z$. Que peut-on en déduire pour les éléments de matrice de \hat{H}' ? Quel est le déplacement au premier ordre de ce niveau ? La perturbation a-t-elle levé complètement la dégénérescence ?

Indication : 1. On ajoute simplement le terme de perturbation à l'hamiltonien non-perturbé. 2. On calcule la correction à l'ordre 1. Si celle-ci est nulle, on considère celle au deuxième ordre. 3. L'hamiltonien de perturbation dépend de r et de θ , tandis que ℓ_z dépend de ϕ . Les fonctions propres avec une valeur de m différente donneront lieu à des éléments de matrice nuls. On aura également besoin du résultat du problème IV.75 et celui du problème IV.98 pour calculer les intégrales. On obtient une matrice de perturbation avec

uniquement deux entrées non-nulles. Une fois diagonalisée, cette matrice donne pour valeurs propres 0, 0 et $3qEa_0$, ainsi que $-3qEa_0$. La dégénérescence n'est donc que partiellement levée.

Problème VI.135 – En partant des deux fonctions d'onde d'essai

$$(r;\lambda) \longmapsto r e^{-\lambda r} \operatorname{et}(r;\lambda) \longmapsto e^{-\lambda r^2}$$

avec λ une constante, déterminer l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène en fonction de cette constante, et déterminer la valeur de λ rendant cette énergie minimale. Exprimer la fonction d'onde normalisée correspondant à cette valeur minimale.

Indication: On a besoin du résultat du problème IV.75. Dans les deux cas, on calcule puis minimise

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

par rapport à λ . Le dénominateur nous donne d'ailleurs l'inverse du carré du facteur de normalisation, que l'on choisira avec le paramètre λ optimisé pour normaliser la fonction propre. L'énergie minimale dévie de l'énergie exacte de 25 pourcents pour la première forme, de 15 pourcents pour la seconde.

Problème VI.136 – En partant d'une fonction d'onde d'essai de la forme

$$(r;\lambda) \longmapsto e^{-\lambda r}$$

retrouver l'énergie fondamentale pour l'atome d'hydrogène, ainsi que la fonction d'onde normalisée associée. *Indication*: On a besoin du résultat du problème IV.75. On calcule puis minimise

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

par rapport à λ . Le dénominateur nous donne d'ailleurs l'inverse du carré du facteur de normalisation, que l'on choisira avec le paramètre λ optimisé pour normaliser la fonction propre. L'énergie minimale coïncide avec l'énergie exacte.

Problème VI.137 – En utilisant la méthode variationnelle, estimer l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique linéaire en partant des fonctions d'onde d'essai

$$(x;\beta) \longmapsto \frac{1}{1+\beta x^2} \text{ et } (x;\beta) \longmapsto \frac{1}{(1+\beta x^2)^2}$$

et normaliser les fonctions d'onde correspondantes. On donne pour cela :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{(1+\beta x^2)^n} = \frac{\pi}{\beta^{1/2}} \frac{\prod_{k=1}^{n-2} (2k+1)}{\prod_{k=1}^{n-1} (2k)}, \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 \mathrm{d}x}{(1+\beta x^2)^n} = \frac{\pi}{\beta^{3/2}} \frac{\prod_{k=1}^{n-3} (2k+1)}{\prod_{k=1}^{n-1} (2k)}.$$

Indication: Dans les deux cas, on calcule puis minimise

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

par rapport à β . Le dénominateur nous donne d'ailleurs l'inverse du carré du facteur de normalisation, que l'on choisira avec le paramètre β optimisé pour normaliser la fonction propre.

Problème VI.138 – On considère l'oscillateur harmonique linéaire de pulsation ω . **1.** Appliquer la méthode des variations en partant d'une fonction d'essai de la forme

$$(x;\lambda) \longmapsto \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{\lambda}\right)\right]$$

définie sur l'intervalle $[-\lambda;\lambda]$ et nulle en-dehors. En déduire l'énergie associée à l'état fondamental. 2. Partir de la fonction variationnelle

$$(x;\lambda) \longmapsto \sin\left(\frac{\pi x}{\lambda}\right),$$

définie sur l'intervalle $[-\lambda;\lambda]$ et nulle en-dehors, pour approximer le premier état excité. On donne pour

cela:

$$\int \mathrm{d}x\,x^2\cos\left(\beta x\right) = \left[x\,\longmapsto\,\frac{2x}{\beta^2}\cos(\beta x) + \left(\frac{x^2}{\beta} - \frac{2}{\beta^3}\right)\sin(\beta x) + C\right].$$

3. En utilisant une fonction d'essai de forme gaussienne

$$(x;\lambda) \longmapsto e^{-\lambda x^2},$$

retrouver la solution exacte fondamentale de l'oscillateur harmonique linéaire.

Indication : On aura besoin de relations de trigonométrie données dans la partie prérequis du polycopié. 1. On calcule puis minimise

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

par rapport à λ . Le dénominateur nous donne d'ailleurs l'inverse du carré du facteur de normalisation, que l'on choisira avec le paramètre λ optimisé pour normaliser la fonction propre. **2.** On effectue le même processus en vertu du théorème de Ritz, et parce que la forme proposée ne risque pas de se retrouver égale à celle de l'état fondamental pendant la minimisation car la fonction choisie pour l'état excité est impaire alors que celle de l'état fondamental est paire (leur produit scalaire est donc nul). **3.** Même processus qu'en **1.**

Problème VI.139 – On désire étudier par des méthodes d'approximation l'état fondamental de l'atome d'hélium. Les résultats obtenus sont également valables pour les ions à deux électrons, tels que H⁻, Li⁺, Be²⁺, etc. On écrit pour cela l'hamiltonien à deux électrons sous la forme

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}^{(0)}(1,2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}\hat{\mathbb{1}}.$$

1. Écrire la fonction d'onde de l'état fondamental lorsqu'on néglige le terme de répulsion inter-électronique. Quelle est l'énergie associée? Comparer avec les valeurs expérimentales : -14,31 eV pour H⁻, -78,98 eV pour He, -198,05 eV pour Li⁺, -371,10 eV pour Be²⁺, -599,4 eV pour B³⁺, et -881,5 eV pour C⁵⁺. 2. Calculer la correction au premier ordre par la méthode des perturbations. Pour cela, on donne

$$\frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} \int_0^\infty \mathrm{d}r_1 r_1^2 \int_0^\pi \mathrm{d}\theta_1 \sin(\theta_1) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_1 \int_0^\infty \mathrm{d}r_2 r_2^2 \int_0^\pi \mathrm{d}\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\theta_2) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_2 \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \exp_\mathrm{e} \left[-\left(\frac{2Zr_1}{a_0} + \frac{2Zr_2}{a_0}\right) \right] d\theta_2 \sin(\phi_2) d\phi_2$$

est égal à

$$\frac{5}{8} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

Comparer avec les valeurs expérimentales. 3. On utilise la fonction d'onde d'ordre zéro comme fonction d'onde variationnelle en permettant au paramètre Z qui y figure de varier $(Z \longrightarrow \lambda)$, mais en conservant le Z apparaissant dans l'hamiltonien fixé à sa valeur physique. Calculer l'énergie (espérance de \hat{H}) en utilisant cette fonction d'onde variationnelle. 4. Déterminer en fonction de Z la valeur du paramètre λ qui minimise cette valeur d'énergie. Comparer avec les valeurs expérimentales.

Indication: 1. Si on néglige la répulsion inter-électronique, le problème est séparable en deux problèmes hydrogénoïdes. 2. On donne la valeur de la correction au premier ordre dans l'énoncé. On ajoute cela à l'énergie non-perturbée et on compare avec l'expérience. 3. On normalise la fonction variationnelle et on voit qu'elle est normalisée quelle que soit la valeur du paramètre variationnel; on utilise une astuce : on écrit

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\lambda e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{(Z-\lambda)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

En notant $E_1(H)$ l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, on réécrit en cours de développement

$$2E_1(H)\lambda^2 - 2(Z - \lambda)e^2 \frac{\lambda}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 2E_1(H)(2Z - \lambda)\lambda$$

pour faciliter les écritures. Cette quantité correspond à l'énergie variationnelle non-perturbée. On utilise le terme de correction au premier ordre donné pour la partie 2. mais en remplaçant Z par λ afin de trouver

l'énergie corrigée au premier ordre qui (4.), lors qu'on la minimise relativement au paramètre λ , nous donne une valeur de λ optimale égale à Z-5/16.

VII. Le spin

Problème VII.140 – On considère un système à deux électrons. 1. Écrire les quatre fonctions de spin qu'on peut former pour ce système. 2. Identifier parmi ces fonctions celles qui sont symétriques et sans symétrie dans l'échange des deux électrons. 3. À partir des deux fonctions qui ne présentent aucune symétrie, fabriquer par combinaison linéaire une fonction symétrique et une antisymétrique dans l'échange de deux électrons. Normaliser ces nouvelles fonctions. 4. Quelle est la valeur de la projection S_z du spin total pour la fonction antisymétrique? 5. De même, quelle est la projection S_z associée à chacune des trois fonctions symétriques? 6. En déduire l'énergie d'interaction associée à chacune de ces quatre fonctions avec un champ magnétique orienté selon l'axe Oz. 7. On considère maintenant les fonctions d'espace également. Quels sont tous les déterminants de Slater différents que l'on peut fabriquer pour ce système? 8. On suppose maintenant que les fonctions d'espace sont identiques. Que deviennent les déterminants trouvés précédemment? 9. Pour deux électrons indépendants (par exemple, appartenant à une sous-couche différente), le moment cinétique de spin total S résultant de l'addition de deux moments cinétiques de spin s_1 et s_2 peut prendre toutes les valeurs possibles entre $|s_1 - s_2|$ et $s_1 + s_2$ par pas de 1. À chaque valeur S ainsi trouvée sont associées les 2S + 1 composantes $M_S\hbar$ comprises entre $-S\hbar$ et $+S\hbar$ par incrémentations d'une valeur \hbar . Vérifier cette règle sur les résultats obtenus en 4. et 5.

Indication: 1. On a les combinaisons $\alpha\alpha$, $\beta\beta$, $\alpha\beta$ et $\beta\alpha$. 2. Deux sont symétriques et deux sont sans symétrie. 3. La somme normalisée de $\alpha\beta$ et de $\beta\alpha$ est symétrique, tandis que leur différence normalisée est anti-symétrique dans l'échange. 4. Zéro 5. $-\hbar$, $+\hbar$ et zéro. 6. $-2\mu_B B$, $2\mu_B B$ et zéro. 7. $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_1^{\beta}|$, $|\varphi_2^{\alpha}\varphi_2^{\beta}|$, $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_2^{\alpha}|$, $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_2^{\alpha}|$, $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\alpha}|$, $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\alpha}|$, $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\alpha}|$, 8. $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$, le seul déterminant de Slater possible est $|\varphi^{\alpha}\varphi^{\beta}|$. 9. Pour S = 0, une seule composante $M_S = 0$, celle du singulet (question 4.) et pour les trois fonctions de la question 5., on a effectivement: une à $M_S = -1$, une à $M_S = 0$ et une à $M_S = 1$.

Problème VII.141 – On considère un système de deux spins s = 1/2. Nous allons vérifier que les fonctions de spin symétrique et antisymétriques du point 1. du problème VII.140 sont bien fonctions propres des opérateurs \hat{S}^2 et \hat{S}_z associés au spin total :

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2.$$

1. Montrer que l'opérateur $\hat{\mathbf{S}}$ ainsi défini obéit bien à la relation de commutation fondamentale d'un moment cinétique. 2. Appliquer l'opérateur \hat{S}_z sur chacune des quatre fonctions du point 1. du problème VII.140 et noter la valeur propre $M_S\hbar$ résultante. 3. Dans l'expression

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2,$$

éliminer les termes \hat{s}_{ix} et \hat{s}_{iy} pour faire apparaître les opérateurs d'échelle

$$\hat{s}_{i\pm} = \hat{s}_{ix} \pm i\hat{s}_{iy}.$$

4. Utiliser les propriétés :

$$\hat{s}_{+} | s, m_s \rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} \hbar | s, m_s + 1 \rangle$$

et

$$\hat{s}_{-}|s, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s - 1)}\hbar |s, m_s - 1\rangle$$

pour évaluer l'effet de \hat{S}^2 sur chacune des quatre fonctions de ce problème. On déterminera le nombre quantique S positif ou nul associé aux valeurs propres écrites sous la forme $S(S+1)\hbar^2$ et tel que

$$-S < M_S < S$$
.

Indication: 1. On calcule le produit vectoriel de $\hat{\mathbf{S}}$ avec lui-même, et on voit que comme les opérateurs individuels portent sur des particules différentes, la relation d'anti-commutation du produit vectoriel (voir partie prérequis du polycopié) sont valables, et il reste $\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = i\hbar \hat{\mathbf{S}}$. 2. On obtient les mêmes résultats qu'au

problème VII.140. 3. On trouve que la composante en x est la demi-somme des opérateurs de montée (+) et de descente (-), tandis que la composante selon y est leur demi-différence. 4. On réécrit \hat{S}^2 uniquement en fonction de \hat{s}_1^2 , \hat{s}_2^2 , $\hat{s}_{1,+}$, $\hat{s}_{1,-}$, $\hat{s}_{2,+}$, $\hat{s}_{2,-}$, \hat{s}_{1z} et \hat{s}_{2z} . On connaît l'effet de tous ces opérateurs sur les fonctions des points 4. et 5. du problème VII.140, on trouve donc que les valeurs propres de \hat{S}^2 appliquées sur ces quatre fonctions sont soit $2\hbar^2$, correspondant à une valeur de S de 1, soit $0\hbar^2$, correspondant à une valeur de S de 0.

Problème VII.142 – On rappelle la définition du déterminant d'une matrice numérique 2×2 :

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc.$$

Écrire les fonctions d'onde d'un système à deux particules de spin s=1/2 chacune pour un spin total S=0 et S=1 en utilisant des déterminants de Slater 2×2 .

Indication : Lorsque les fonctions d'espace coïncident, on a nécessairement S=0, et une seule possibilité $(|\varphi_1^{\alpha}\varphi_1^{\beta}|)$; lorsque les deux fonctions d'espace ne coïncident plus, on peut avoir S=0 ou S=1. Le déterminant $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_2^{\alpha}|$ correspond à la composante $M_S=1$ du triplet, le déterminant $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\beta}|$ correspond à la composante $M_S=0$ du triplet. La somme normalisée de $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_2^{\beta}|$ et $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\alpha}|$ correspond à la composante $M_S=0$ du triplet, tandis que la différence normalisée de $|\varphi_1^{\alpha}\varphi_2^{\beta}|$ et $|\varphi_1^{\beta}\varphi_2^{\alpha}|$ correspond à l'unique composante $M_S=0$ du singulet.

Problème VII.143 – [Facultatif : niveau perfectionnement] On considère deux électrons sans interaction et astreints à exister dans une boîte unidimensionnelle linéaire de longueur a : leur potentiel est nul à l'intérieur de la boîte et infini au-delà. **1.** On commence par ignorer le spin de ces électrons. Déterminer les trois premiers niveaux d'énergie, en unité

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a},$$

leur degré de dégénérescence, et les fonctions d'onde associées. 2. On tient maintenant compte du fait que chaque électron est une particule de spin s=1/2. Quelles modifications cela entraîne-t-il? 3. Reprendre les questions 1. et 2. en considérant alors le terme d'interaction inter-électronique qu'on traitera par perturbation au premier ordre, et en utilisant exclusivement un langage symbolique – on ne demande pas ici de calculer explicitement des valeurs numériques — mais en considérant que les intégrales bi-électroniques mises en jeu ont toutes une valeur numérique positive. 4. Pour les résultats obtenus par perturbation en considérant le spin des électrons, identifier la nature (singulet ou triplet de spin) de chaque niveau d'énergie. Indication: 1. Le problème est séparable. 2. Pour le premier niveau : un seul déterminant de Slater; pour le deuxième niveau : quatre déterminants de Slater; pour le troisième niveau : un seul déterminant de Slater. 3. On écrit J_{11} et J_{22} les intégrales biélectroniques trouvées pour le terme de correction de l'énergie au premier ordre du premier et troisième niveau, respectivement. 3. On trouve deux sortes d'intégrales, J_{12} et J_{21} d'une part (qui sont d'ailleurs égales) pour lesquelles les fonctions d'espace sont dans le même ordre dans le bra et le ket, et K_{12} et K_{21} d'autre part (qui sont d'ailleurs égales) pour lesquelles les fonctions d'espace sont dans un ordre différent dans le bra et le ket. La matrice de perturbation 4×4 n'a donc que deux sortes de termes et se diagonalise facilement. 4. On procède similairement mais en factorisant les intégrales sur l'espace et sur le spin. On voit que le premier niveau est un singulet, que le deuxième niveau voit sa dégénérescence partiellement levée en un niveau singulet et trois niveaux triplets, et que le troisième niveau est un singulet.

VIII. Termes spectroscopiques atomiques

Problème VIII.144 – On rappelle que l'hamiltonien d'un hydrogénoïde a pour expression

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{\ell}^2}{2m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Des corrections d'ordre relativiste font apparaître un terme supplémentaire de couplage spin-orbite de la forme

$$\hat{H}_{SO}(r) = \xi(r) \hat{\overrightarrow{\ell}} \cdot \hat{\overrightarrow{s}},$$

où $\hat{\vec{s}}$ est le moment cinétique de spin de l'électron. Vérifier que la composante selon z du moment cinétique total

$$\hat{j}_z = \hat{\ell}_z + \hat{s}_z$$

commute avec l'hamiltonien total $\hat{H} + \hat{H}_{SO}$.

Problème VIII.145 — On se propose dans cet exercice de montrer que, dans l'atome d'hélium, l'opérateur moment cinétique total

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{\ell}_1} + \hat{\vec{\ell}_2}$$

commute avec l'hamiltonien. Nous montrerons ce résultat pour la composante x uniquement. 1. Montrer dans un premier temps que le commutateur se réduit à

$$\left[\hat{\overline{L}}, \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \right].$$

2. Montrer que

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, f(x)\right] = f'(x).$$

3. Évaluer

$$\frac{\partial}{\partial z_1} \frac{1}{r_{12}} \text{ et } \frac{\partial}{\partial z_2} \frac{1}{r_{12}},$$

ainsi que

$$\frac{\partial}{\partial y_1} \frac{1}{r_{12}} \text{ et } \frac{\partial}{\partial y_2} \frac{1}{r_{12}}.$$

4. Évaluer

$$\left[\hat{\ell}_{1,x},\frac{1}{r_{12}}\right] \text{ et } \left[\hat{\ell}_{2,x},\frac{1}{r_{12}}\right].$$

5. Conclure quant à la commutation de l'opérateur composante selon x du moment cinétique total avec l'hamiltonien pour l'atome d'hélium. 6. Un résultat similaire peut être obtenu pour la composante selon y et celle selon z de l'opérateur moment cinétique total. Conclure quant à la commutation de l'opérateur moment cinétique total avec l'hamiltonien pour l'atome d'hélium.

Problème VIII.146 – Montrer que le nombre de termes spectroscopiques issus d'une configuration électronique $\cdots (n\ell)^x$ est donné par le nombre de couples

$$(M_L, M_S) = (0, 0)$$

si x est pair, et par le nombre de couples

$$(M_L, M_S) = \left(0, \frac{1}{2}\right)$$

si x est impair.

Problème VIII.147 — On se propose de déterminer les termes spectroscopiques issus de la configuration électronique fondamentale $1s^22s^22p^3$ de l'atome d'azote sans examiner tous les déterminants associés. 1. Combien existe-t-il de termes spectroscopiques associés à cette configuration électronique? 2. Combien y at-il de façons différentes de répartir trois électrons dans la sous-couche 2p en respectant le principe d'exclusion de Pauli? 3. En utilisant les cases quantiques, quelle est la plus grande valeur possible pour M_S ? À quelle valeur de M_L est-elle associée? En déduire un premier terme spectroscopique. 4. À l'aide d'un second diagramme de cases quantiques, quelle est la plus grande valeur possible pour M_L ? À quelle valeur de M_S est-elle associée? En déduire le second terme spectroscopique. 5. En soustrayant les multiplicités des deux termes spectroscopiques déduits plus haut, déduire le dernier terme spectroscopique, qui sera nécessairement un doublet de spin. 6. Classer les termes spectroscopiques issus de la configuration électronique fondamentale de l'atome d'azote par ordre croissant d'énergie.

Problème VIII.148 – Considérons une sous-couche $(n\ell)$ occupée par x électrons, avec $x < 4\ell + 2$. Montrer que la même sous-couche occupée par $4\ell + 2 - x$ électrons engendre les mêmes termes spectroscopiques.

Problème VIII.149 – Trouver le terme spectroscopique de plus basse énergie, les états associés, et le

nombre de termes spectroscopiques de tous les atomes de la seconde période, ainsi que des atomes suivants : Sc $(\cdots 3d^1)$, Ti $(\cdots 3d^2)$, V $(\cdots 3d^3)$, Mn $(\cdots 3d^5)$, Cr $(\cdots 4s^13d^5)$, Fe $(\cdots 3d^6)$ et Co $(\cdots 3d^7)$. Indication : procéder dans l'ordre indiqué ci-dessus, et ne pas hésiter à utiliser des résultats relatifs à certains atomes pour en traiter d'autres. Ne pas oublier l'équivalence électron-lacune montrée au problème VIII.147. Problème VIII.150 — Sans utiliser de diagramme de Slater, mais en utilisant le théorème d'addition des moments cinétiques d'électrons indépendants, déterminer tous les termes spectroscopiques associés à la configuration excitée $1s^22s^22p^13p^1$ de l'atome de carbone, et leur multiplicité.

PRÉREQUIS

CETTE contribution introduit le lecteur aux notions d'analyse dimensionnelle qui permettent de comprendre et de caractériser ce que représente physiquement une grandeur. Cela s'avère particulièrement utile lorsqu'un phénomène physique fait apparaître une quantité (grandeur) dont on ne cerne pas aisément a priori la signification. Les prérequis mathématiques à ce cours de chimie quantique sont ensuite repris depuis les bases les plus fondamentales, avec des rappels tels que les ensembles de nombres, la priorité des opérations, les simplifications de fractions et de puissances,... Parmi les préliminaires, le langage mathématique est démystifié en fournissant les clés de compréhension/décodage et d'écriture de propositions mathématiques.

Après des rappels d'algèbre parmi lesquels figurent les opérations et leur priorité, mais également les (in)équations et les systèmes d'équations, les bases de la géométrie et du calcul vectoriel. Pour ce faire, les notions les plus élémentaires telles que les angles géométriques et les propriétés des principales formes géométriques rencontrées en science sont reprises. Les vecteurs dans le plan et l'espace ont ensuite été introduits, avec leurs propriétés, avant de considérer des angles orientés et les rudiments de trigonométrie circulaire. Les coordonnées polaires, cylindriques et sphériques sont exposées. Le produit scalaire et le produit vectoriel ont finalement été abordés pour clore ce chapitre. Les nombres complexes sont ensuite décrits.

Dans le dernier chapitre de ce polycopié, les bases de l'analyse sont redonnées en posant quelques rappels relatifs aux suites numériques avant d'aborder les fonctions réelles d'une variable réelle (leur définition, leur représentation, leur manipulation, leurs propriétés). La notion de limite est également introduite, ce à quoi succède le calcul différentiel et intégral. Avec ces outils en main, le polycopié livre finalement une présentation des fonctions courantes utilisées en sciences naturelles (physique, chimie, géosciences et sciences de la vie), avant de se clore avec une section sur les équations différentielles linéaires à coefficients constants.

Chapitre I

GRANDEURS PHYSIQUES, DIMENSIONS ET UNITÉS

L'a mesure d'une grandeur physique G est sa détermination quantitative par une expérience qui permet de la comparer à l'étalon de cette grandeur. C'est cet étalon qui définit l'unité de la grandeur G que l'on notera u(G). Ainsi, si on note $\{G\}$ la valeur numérique de G dans l'unité u(G), on a

$$G = \{G\} u(G).$$

Exemple I.1

Supposons qu'une masse soit de 1,17 kilogramme. Appelons m la grandeur « masse ». Comme nous le verrons ci-après, le symbole caractérisant l'unité de la masse dans le système international est u(m) = kg. La valeur de la masse est ici $\{m\} = 1,17$. On écrit donc simplement : m = 1,17 kg.

I.1 Les unités de base du système international (SI)

Le Système international d'unités (SI) est le système d'unités le plus employé en sciences. Il est fixé par la Conférence générale des poids et mesures, qui le révise tous les quatre ans. Il correspond à la norme internationale ISO 1000 (ICS 01 060). Ce système comprend sept unités de base (ou fondamentales) qui quantifient toutes les grandeurs physiques indépendantes. Le tableau I.1 présente le nom des grandeurs fondamentales, leur unité, le symbole de cette unité ainsi que le symbole de leur dimension.

39 I.2. Dimension

Grandeur	Unité	Symbole d'unité	Symbole de dimension
Longueur	mètre	m	L
Masse	kilogramme	kg	${ m M}$
Temps	seconde	S	T
Courant éléctrique	ampère	A	I
Température	kelvin	K	Θ
Quantité de matière	mole	mol	N
Intensité lumineuse visuelle	candela	cd	J

Tableau I.1 – Les sept grandeurs SI fondamentales.

I.2 Dimension

La **dimension** d'une grandeur physique G indique, indépendamment de ses unités, de quelle puissance des grandeurs fondamentales celle-ci se compose. On la note généralement [G]. Les symboles usuels des dimensions des grandeurs fondamentales sont indiqués dans le tableau précédent.

Exemple I.2

La vitesse v, définie par le rapport d'une distance et d'un temps, a la dimension $[v] = L \cdot T^{-1}$. On dit encore qu'elle est *homogène* à une distance divisée par un temps. Son unité SI est donc le mètre par seconde, $u(v) = m \cdot s^{-1}$.

Grandeur sans dimension

Lorsqu'une grandeur physique G n'a pas de dimension, on note [G] = 1. De la sorte, le produit $G \times A$ a manifestement la même dimension que celle de A. En effet, $[G \times A] = [G] \times [A] = 1 \times [A] = [A]$. Attention! Le fait qu'une grandeur n'ait pas de dimension n'implique pas qu'elle n'ait pas d'unité! En effet, un angle est défini comme le rapport de la longueur de l'arc de cercle qu'il sous-tend au rayon de ce cercle : il est donc sans dimension. Néanmoins, son unité SI est le radian. De même, sa généralisation à trois dimensions, l'angle solide, qui est un rapport de deux surfaces, est lui aussi sans dimension mais s'exprime dans une unité SI appelée stéradian.

I.3 Unités dérivées du système international

Toutes les quantités (grandeurs) physiques dimensionnées ont une unité. Toutefois, seules les sept quantités citées précédemment sont fondamentales. Toute autre grandeur physique a une **unité dérivée** de ces dernières même si certaines quantités physiques possèdent un nom d'unité de mesure qui leur est propre. C'est, par exemple, le cas de la force dont l'unité SI est le newton (N) ou encore de la pression, qui représente une force par unité de surface et dont l'unité SI est le pascal (Pa). Ces unités proviennent généralement du nom du scientifique qui en a formalisé le concept. On peut toujours en donner une expression en terme des unités de bases en utilisant une expression les reliant aux quantités fondamentales.

Exemple I.3

La relation fondamentale de la dynamique de Newton, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, permet de trouver que le newton est équivalent au produit d'une masse par une accélération, soit $\mathbf{N} = \mathbf{kg} \cdot \mathbf{m} \cdot \mathbf{s}^{-2}$.

Les tableaux I.2 et I.3 fournissent les unités SI et l'équivalent en unités SI fondamentales de quelques grandeurs physiques importantes. Enfin, quelques conversions d'usage, importantes en science au quotidien, sont compilées dans la table I.4.

I.4 Détermination de l'unité SI d'une grandeur

Pour déterminer l'unité SI d'une grandeur physique, il suffit d'en connaître une expression en terme des sept grandeurs fondamentales, c'est-à-dire de connaître une loi physique qui exprime sa relation à ces grandeurs.

Exemple I.4

L'intensité F de la force de rappel d'un ressort peut se mettre sous la forme F = kx où x représente l'élongation du ressort et k sa constante de raideur. L'unité SI de la constante k est déterminée par la relation u(k) = u(F)/u(x) soit, $u(k) = N \cdot m^{-1}$. En unités SI fondamentales, on a $N = kg \cdot m \cdot s^{-2}$ et donc, $u(k) = kg \cdot s^{-2}$.

Grandeur (symbole usuel)	Unité	SI fondamental	Interprétation
$\frac{\text{Grandeur (symbole usuer)}}{\text{Fréquence }(\nu)}$	hertz (Hz)	$ \frac{\text{SI foliamental}}{\text{s}^{-1}} $	inverse de la période
Force (F)	newton (N)	$\mathrm{m}\cdot\mathrm{kg}\cdot\mathrm{s}^{-2}$	masse × accélération
Pression (P)	pascal (Pa = N · m ⁻²)	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$	force/surface
	$pascar (Fa = N \cdot III)$		
Énergie (E)		2 1 _2	
Travail (W)	joule $(J = N \cdot m)$	$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{kg}\cdot\mathrm{s}^{-2}$	$force \times distance$
$\begin{array}{cccc} & \text{Chaleur } (Q) \\ & \end{array}$			
Puissance (P)	$watt (W = J \cdot s^{-1})$	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$	travail/temps
Charge électrique (q)	coulomb (C)	$A \cdot s$	$courant \times temps$
Tension électrique (U)	$ \text{volt } (V = W \cdot A^{-1})$	$\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{kg} \cdot \mathrm{s}^{-3} \cdot \mathrm{A}^{-1}$	travail/charge
Résistance électrique (R)	ohm ($\Omega = V \cdot A^{-1}$)	$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{kg}\cdot\mathrm{s}^{-3}\cdot\mathrm{A}^{-2}$	tension/courant
Capacitance (C)	farad (F = C V^{-1})	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$	charge/tension
Conductance électrique (G)	siemens ($S = V A^{-1}$)	${\rm m}^{-2}~{\rm kg}^{-1}~{\rm s}^3~{\rm A}^2$	inverse de résistance
Flux magnétique (Φ)	weber $(Wb = V s)$	$m^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ A}^{-1}$	$ ext{tension} \times ext{temps}$
Inductance (L)	henry $(H = Wb A^{-1})$	$m^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ A}^{-2}$	$tension \times temps/courant$
Activité d'un radionuclide	becquerel (Bq)	s^{-1}	désintégration/temps
Champ magnétique (B)	tesla (T = V · s · m ⁻²)	$ m kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$	tension \times temps/surface
Nombre d'onde (k)	mètre moins un	m^{-1}	inverse d'une longueur
Aire (S)	mètre carré	m^2	surface
Volume (V)	mètre cube	m^3	volume
Vitesse (\vec{v})	mètre par seconde	$\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	distance/temps
Accélération (\vec{a})	mètre par seconde carrée	$\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-2}$	vitesse/temps
Masse volumique (ρ)	kilogramme par mètre cube	$ m kg \cdot m^{-3}$	masse/volume
Densité de courant (j)	ampère par mètre carré	$ ext{A} \cdot ext{m}^{-2}$	courant/surface
Concentration (c)	mole par mètre cube	$\mathrm{mol} \cdot \mathrm{m}^{-3}$	quantité de matière/volume
Concentration massique (c_m)	kilogramme par mètre cube	$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$	masse/volume

Tableau I.2 – Principales grandeurs et unités courantes.

Grandeur	Unité	Conversion	Equivalent SI
Viscosité	pascal seconde	Pa s	${ m m}^{-1} { m ~kg ~s}^{-1}$
Moment de force	newton mètre	N m	$\mathrm{m^2~kg~s^{-2}}$
Tension de surface	newton par mètre	$ m N~m^{-1}$	${ m kg~s^{-2}}$
Vitesse angulaire	radian par seconde	$\rm rad~s^{-1}$	s^{-1}
Accélération angulaire	radian par seconde carré	$\rm rad~s^{-2}$	s^{-2}
Densité de flux de chaleur	watt par mètre carré	${ m W~m^{-2}}$	$\mathrm{kg}\;\mathrm{s}^{-3}$
Capacité calorifique, entropie	joule par kelvin	$ m J~K^{-1}$	$m^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$
Energie spécifique	joule par kilogramme	$ m J~kg^{-1}$	${ m m}^2 { m s}^{-2}$
Conductivité thermique	watt par mètre kelvin	${ m W} { m m}^{-1} { m K}^{-1}$	${ m m~kg~s^{-3}~K^{-1}}$
Force d'un champ électrique	volt par mètre	$ m V~m^{-1}$	${ m m \ kg \ s^{-3} \ A^{-1}}$
Densité de charge	coulomb par mètre cube	${ m C~m^{-3}}$	$\mathrm{m}^{-3} \mathrm{s} \mathrm{A}$
Densité de flux électrique	coulomb par mètre carré	${ m C~m^{-2}}$	$\mathrm{m}^{-2} \mathrm{s} \mathrm{A}$
Permittivité	farad par mètre	$\mathrm{F}~\mathrm{m}^{-1}$	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$
Perméabilité	henry par mètre	${ m H~m^{-1}}$	$m \text{ kg s}^{-2} \text{ A}^{-2}$
Energie molaire	joule par mole	$\rm J~mol^{-1}$	${ m m}^2 { m kg \ s}^{-2} { m mol}^{-1}$
Capacité calorifique molaire	joule par mole par kelvin	$\rm J~mol^{-1}~K^{-1}$	$m^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Tableau I.3 – Principales grandeurs et unités courantes (fin).

Grandeur	Unité	Symbole	Valeur dans SI
	minute	min	$1 \min = 60 s$
Temps	heure	h	1 h = 60 min = 3600 s
	jour	j	1 j = 24 h = 86 400 s
Angle	degrés		$1^{\circ} = \pi/180 \text{ rad}$
Aire	hectare	ha	$1 \text{ ha} = 1 \text{ hm}^2 = 10^4 \text{ m}^2$
Volume	litre	L	$\bar{1} \ \bar{L} = 1 \ \bar{dm}^3 = 10^3 \ \bar{cm}^3 = 10^{-3} \ \bar{m}^3$
Magga	tonne	t	$1 \text{ t} = 10^3 \text{ kg}$
Masse	dalton	Da	$1 \text{ Da} = 1,660 539 \times 10^{-27} \text{ kg}$
	électronvolt	eV	$1 \text{ eV} = 1,602 \ 176 \times 10^{-19} \ \text{J}$
Energie	Calorie	cal	1 cal = 4,184 J
	erg	erg	$1 \text{ erg} = 10^7 \text{ J}$
	bar	bar	$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa} = 100 \text{ kPa} = 10^5 \text{ Pa}$
Pression	millimètre de mercure	mm Hg	1 mm Hg = 133,322 Pa = 1 Torr
	atmosphère	atm	$1 \text{ atm} = 101 \ 325 \text{ Pa}$
Longueur	Ångström	Ă	$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm} = 100 \text{ pm} = 10^{-10} \text{ m}$
Température	degré Celsius	~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~	$\bar{T}(\bar{C}) = \bar{T}(\bar{K}) + 273.15$
	degré Farenheit	°F	$T(^{\circ}F) = \frac{9}{5}T(^{\circ}C) + 32$

Tableau I.4 – Quelques conversions d'usage entre unités.

I.5 Les préfixes d'unités et les ordres de grandeur

Les **préfixes** d'unités sont des préfacteurs numériques qui permettent d'adapter l'unité d'une grandeur à l'échelle de l'objet ou du phénomène considéré. Ils représentent l'**ordre de grandeur** des résultats de mesure attendus lors d'expériences sur cette grandeur. Les principaux préfixes sont rappelés au tableau I.5.

Facteur	Préfixe	Symbole	Facteur	Préfixe	Symbole
10^{18}	exa-	E	10^{-1}	déci-	d
10^{15}	péta-	P	10^{-2}	centi-	\mathbf{c}
10^{12}	téra-	${ m T}$	10^{-3}	milli-	m
10^{9}	giga-	G	10^{-6}	micro-	μ
10^{6}	méga-	${ m M}$	10^{-9}	nano-	\mathbf{n}
10^{3}	kilo-	k	10^{-12}	pico-	p
10^{2}	hecto-	h	10^{-15}	femto-	f
10^{1}	déca-	da	10^{-18}	atto-	a

Tableau I.5 – Les principaux ordres de grandeurs utilisés en science.

Chapitre II

HOMOGÉNÉITÉ DES EXPRESSIONS EN SCIENCES

II.1 Homogénéité d'une somme

Le simple constat qu'on « ne peut ajouter des pommes à des poires », indique que lorsque l'expression d'une quantité physique est une somme de termes, tous ces termes doivent avoir la même dimension.

Exemple II.1

si x est une distance et v une vitesse, le résultat d = x + v n'a **aucun sens**: on ne peut ajouter une distance à une vitesse! En revanche, le résultat d = x + vt, où t représente un temps a un sens, car tous les termes de l'expression représentent des distances: en effet, [x] = L et $[v][t] = L \cdot T^{-1} \times T = L$.

II.2 Fonctions de grandeurs physiques

Soit f une fonction et f(x) sa valeur au point x. On appelle x l'argument de la fonction f.

Dimension des fonctions

Les fonctions qui ne sont pas du type « puissance », c'est-à-dire telles que $f(x) = kx^a$ où k et a sont deux nombres sans dimension, doivent être sans dimension ainsi que leur argument. En particulier, si x n'a pas de dimension ([x]=1) alors $\exp(x)$, $\ln(x)$, $\cos(x)$, $\sin(x)$, $\tan(x)$ etc. sont bien définies et sont également sans dimension : $[\exp(x)]=1$ ou encore $[\sin(x)]=1$, par exemple.

Exemple II.2

Déterminons les dimensions des quantités A, k et ω dans une onde plane de pression $p = A\cos(kx - \omega t)$ où p représente la pression dans un fluide au point x à l'instant t. À l'évidence, [x] = L et [t] = T. Comme le cosinus n'a pas de dimension, [A] = [p]. La quantité A est donc homogène à une pression. D'autre part, comme l'argument du cosinus est aussi sans dimension, $[kx - \omega t] = 1$. Or, dans une somme, tous les termes ont la même dimension. Donc [kx] = 1 et $[\omega t] = 1$. Soit finalement, $[k] = 1/[x] = L^{-1}$ et $[\omega] = 1/[t] = T^{-1}$.

II.3 Remarque sur les grandeurs vectorielles

Les grandeurs vectorielles peuvent avoir une dimension. Dans ce cas, la dimension est la même pour toutes les composantes (coordonnées) du vecteur. Par exemple, le vecteur position \mathbf{r} est tel que toutes ses composantes (x, y, z) représentent des distances. Dans ce sens, on peut écrire $[\vec{r}] = \mathbf{L}$.

II.4 Remarque sur les dérivées et les intégrales

La dimension des grandeurs physiques obtenues par dérivation ou intégration s'obtient très simplement en considérant la dérivation comme une division et l'intégration comme une somme de produits. En effet, par définition, la dérivation est la limite d'un quotient entre deux quantités et d'autre part, l'intégration est la limite d'une somme de produits.

Si
$$A = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}s}$$
 alors $[A] = [f]/[s]$ et si $B = \int f(x)\mathrm{d}x$ alors $[B] = [f][x]$.

Par exemple, la définition de la vitesse,

$$\mathbf{v} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t},$$

implique $[\mathbf{v}] = \mathbf{L} \cdot \mathbf{T}^{-1}$.

II.5 Vérification d'une expression

Il est indispensable, à la fin de tout calcul, de vérifier que le résultat obtenu est bien homogène à la quantité cherchée. Cela implique de vérifier que les dimensions de part et d'autre d'une égalité (ou d'une inégalité) sont bien les mêmes mais cela implique aussi de vérifier que la nature des expressions est bien la même.

Exemple II.3

Une relation du type $\mathbf{F} = ma$ où \mathbf{F} est un vecteur force, m une masse et a une accélération est bien homogène quant à ses dimensions mais elle n'a aucun sens car le membre de gauche de l'égalité est un vecteur tandis que celui de droite est un scalaire (nombre). Une relation correcte est $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$.

Enfin, comme livres, cours et articles scientifiques, sont rarement exempts de coquilles dans les formules, il est indispensable d'en faire une lecture critique et de vérifier l'homogénéité des résultats annoncés avant de les appliquer.

Chapitre III

CONSTANTES UNIVERSELLES ET UNITÉS ATOMIQUES

Quantité	Unité	Symbole	Valeur
Célérité dans le vide	$\mathrm{m}\;\mathrm{s}^{-1}$	c_0	299 792 458
Nombre d'Avogadro	mol^{-1}	\mathscr{N}_A	6.022×10^{23}
	$\bar{m}^2 \bar{k} g s^{-2} \bar{K}^{-1} = J \bar{K}^{-1}$	k_B	1.3807×10^{-23}
Constante de Boltzmann	$eV K^{-1}$	k_B	8.617×10^{-5}
	$ m cal~K^{-1}$	k_B	3.300×10^{-24}
Constante sea perfeits	$\bar{J} \text{ mol}^{-1} \bar{K}^{-1}$	$\bar{R} = \bar{\mathcal{N}}_A \bar{k}_B$	8.314
Constante gaz parfaits	${ m m}^{3} \ { m Pa} \ { m mol}^{-1} \ { m K}^{-1}$	R	8.314
Constante de Faraday	$J\bar{V}^{-1}$ mol ⁻¹ = C mol ⁻¹	$F = N_A e$	$-96\overline{485}$
Constants de Disselle	J s	- $ h$	6.626×10^{-34}
Constante de Planck	eV s	h	4.1357×10^{-15}
Constante gravitationnelle	$\bar{N} \bar{m}^2 \bar{k} g^{-2}$	G	6.673×10^{-11}
Permittivité du vide	$ m kg^{-1} \ m^{-3} \ A^2 \ s^4$	$arepsilon_0$	$\mu_0^{-1}c_0^{-2} = 8.85 \times 10^{-12}$
Perméabilité du vide	$kg m A^{-2} s^{-2}$	μ_0	$4 \pi \times 10^7$
Rydberg	eV	R_Y	13.6058
Constante de structure fine		α	7.2973×10^{-3}
Energie ($T = 298.15 \text{ K}$)	J	$\bar{k}_B T$	4.11×10^{-21}
Energie $(T \equiv 298.13 \text{ K})$	cal	k_BT	9.83×10^{-22}
E	$\bar{\mathbf{kJ}}$ $\bar{\mathbf{mol}}^{-1}$	$\bar{R}\bar{T} = \bar{\mathcal{N}}_A \bar{k}_B \bar{T}$	2.479
Energie molaire $(T = 298.15 \text{ K})$	$kcal mol^{-1}$	$RT = \mathscr{N}_A k_B T$	5.920×10^{-1}
Volume gaz parfait $(T = 298.15 \text{ K}, P = 1 \text{ atm})$	L mol ⁻¹	V_m	22.414
Magnéton de Bohr	$ m J~T^{-1}$	μ_B	9.2741×10^{-24}

Tableau III.1 – Constantes fréquemment utilisées au début des études scientifiques.

Quantité	Nom	Symbole	Valeur dans SI
Action	Quantum d'action	\hbar	$1.054\ 571 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\ s}$
Action	Quantum d'action	\hbar	$6.5822 \times 10^{-16} \text{ eV s}$
Longueur	Rayon de Bohr	a_0	$4\pi\varepsilon_0 \hbar^2/(m_e e^2) = 0.52918 \text{ Å}$
Masse	Masse de l'électron	m_e	$9.109~383 \times 10^{-31}~\mathrm{kg}$
Enougie	Hartree	\mathscr{E}_H	$\bar{h}^2/(m_e \bar{a}_0^2) = 4.359744 \times 10^{-18} \text{J}$
Energie	Hartree	\mathscr{E}_H	27.211 eV
Energie molaire	Hartree/mol	$\hbar\mathscr{E}_{H}^{-1}$	$627.51 \text{ kcal mol}^{-1}$
Temps	Unité atomique de temps		$2.418~884 \times 10^{-17} \text{ s}$
Charge	Charge de l'électron		$1.602\ 176 \times 10^{-19}\ \mathrm{C}$
Moment dipolaire	C m	μ^{-}	$ea_0 = 8.4784$
Moment dipolaire	Debye	μ	2.5418
Champ électrique $V m^{-1}$		E^{-}	$\mathcal{E}_H e^{-\bar{1}} a_0^{-1} = 5.1423$
Polarisabilité électrique $C^2 m^2 J^{-1}$		α	$\mathcal{E}_H^{-1}e^2a_0^2 = 1.6488$
Fonction d'onde m ^{-3/2}		ψ	$a_0^{-3/2} = 2.5978$

Tableau III.2 – Principales unités atomiques.

LES NOMBRES ET LE LANGAGE MATHÉMATIQUE

CE premier chapitre récapitule quelques informations relatives aux nombres et aux notations symboliques utilisées pour écrire des énoncés mathématiques. Le lecteur s'habituera progressivement aux symboles et à la syntaxe des énoncés mathématiques durant sa lecture.

Cette première contribution doit beaucoup aux enseignements de M. René Cori.

Avertissement important

Les mathématiques sont un monde peuplé d'êtres qui peuvent paraître mystérieux — on ne les rencontre pas dans la nature objective — et sur lesquels on énonce des faits et des propositions dans une langue qui diffère de la langue naturelle. Bien entendu, la plupart du temps, la langue utilisée pour faire des mathématiques est la langue naturelle, le français dans le cas de cette contribution, mais les mathématiciens et les logiciens ont développé des outils pour faciliter la compréhension des énoncés. Cette première contribution est probablement la plus longue et la plus aride de cette formation car elle aborde le formalisme mathématique depuis les toutes premières bases, et comprend des notations symboliques peut-être malaisées à approcher si l'on n'en a pas ou plus l'habitude. Cependant, nous pensons que prendre le temps nécessaire pour maîtriser ce chapitre est un investissement excellent. Vous aurez probablement besoin d'y revenir régulièrement. Cette maîtrise d'un formalisme doit vous faciliter la compréhension des mathématiques. En aucun cas il ne s'agira d'écrire les mathématiques dans la langue formelle, cela n'étant accessible qu'aux machines. En revanche, il est d'une grande utilité de savoir décomposer un énoncé en des éléments imbriqués les uns dans les autres, pour isoler ceux sur lesquels porter son attention.

Notre conseil pour bien aborder ce chapitre est tout d'abord de comprendre et d'accepter qu'il vous prendra du temps à lire. Du temps et de l'effort. Nous vous conseillons évidemment de le lire de manière linéaire, c'est-à-dire paragraphe après paragraphe : chaque information nécessaire à la compréhension d'un paragraphe aura, sauf mention contraire, été expliquée dans un paragraphe qui lui est antérieur. C'est ainsi que tout notre programme a été réfléchi et conçu.

Vous comprendrez progressivement dans les chapitres suivants à quel point votre effort sera payant car, ayant appris à bien lire et à écrire correctement et rigoureusement les mathématiques dans un langage symbolique, l'aspect formel de ce qui suivra cette première étape ne sera plus une difficulté. Votre travail ici allégera considérablement celui de compréhension des prochains chapitres, qui pourront être abordés bien plus sereinement.

S'il se produisait que vous rencontriez un mot qui vous est inconnu, qu'il soit propre aux mathématiques ou non, nous vous encourageons très vivement à en chercher la signification par ailleurs et à ne pas laisser ce mot inconnu de vous. Cette démarche active vous est d'ailleurs recommandée au-delà du présent contenu et au-delà des seuls mots : cela concerne aussi des expressions ou des notions qui vous sont inconnues. Bien que dans ces pages nous ayons oeuvré pour limiter le nombre de telles occurrences, elles demeurent possibles.

IV.1 Les nombres

Cette première section récapitule brièvement quelques être du monde des mathématiques dont l'usage est important dans toutes les sciences : les différents types de nombres, classés en ensembles de nombres. Nous verrons comment ces ensembles se notent, se comparent et se manipulent. Les notations ensemblistes utiles en mathématiques et en sciences appliquées sont également reprises.

IV.1.1 Ensembles de nombres

Les nombres sont omniprésents en mathématiques pour les sciences appliquées. Il est usuel de les classer dans des *ensembles* ¹ *de nombres* en fonction de leurs propriétés fondamentales qui les typent (les nombres entre crochets sont des exemples) :

- l'ensemble \mathbb{N} des **entiers naturels** [0; 1; 7];
- l'ensemble \mathbb{Z} des **entiers relatifs** [-3; 12];
- l'ensemble \mathbb{D} des **décimaux** [-1,789; 3,0; 5,0124];
- l'ensemble \mathbb{Q} des **rationnels** [(7/9); (-11/3); (1/10)];
- l'ensemble \mathbb{R} des **réels** $[\sqrt{3}; e; 1; (-5/2); 3,12; (11/7); \pi];$
- l'ensemble C des **complexes** [un chapitre entier leur sera dédié ultérieurement].

Il est important de comprendre que si un nombre entier peut aussi être vu comme un nombre rationnel ou un nombre réel, il n'est pas du même type. Ainsi, les entiers naturels ont la particularité d'avoir un «zéro absolu» ou plus petit élément, ce que n'ont pas les entiers relatifs qui eux ont la propriété supplémentaire que tout nombre a un opposé. De même, un nombre rationnel peut ne pas être un nombre décimal : un nombre décimal peut toujours s'écrire comme le quotient d'un entier relatif par une puissance naturelle de \mathbf{dix} (0,523 est bien le quotient de 523 par 1000 par exemple), tandis qu'un nombre \mathbf{ration} nel peut toujours s'écrire comme le quotient (c'est-à-dire le \mathbf{ratio}) de deux entiers relatifs a et b, avec b non-nul. Les décimaux ont une écriture en numération décimale de position avec un nombre fini de chiffres, ce qui n'est pas le cas de nombres tels que 4/3, qui est un nombre rationnel dont l'écriture décimale est $1,333\cdots$, où « · · · » désigne le fait que l'on a un nombre infini de chiffres 3 après la virgule. Les nombres rationnels ne vérifient pas la propriété de la borne supérieure, contrairement aux nombres réels.

En littérature anglo-saxonne, le séparateur d'un nombre « à virgule » est le plus souvent un point plutôt qu'une virgule.

On pourra noter qu'un nombre appartient (\in) ou n'appartient pas (\notin) à un ensemble ². Par exemple, π n'est pas un entier naturel $(\pi \notin \mathbb{N})$, mais 5 en est un $(5 \in \mathbb{N})$.

La table IV.1 récapitule la valeur approchée de plusieurs nombres couramment rencontrés en sciences appliquées.

Nombre	Valeur	Nombre	Valeur
	approchée		approchée
$\overline{}$	2,718	ln 10	2,303
$\sqrt{2}$	1,4142	$\sqrt{3}$	1,7321
ln 2	0,693	π	3,141593
$\log_{10} e = (\ln 10)^{-1}$	$0,\!434$	$\log_{10} 2$	0,301

TABLEAU IV.1 – Quelques nombres courants en sciences et leur valeur approchée.

IV.1.2 Écriture des ensembles

Il existe plusieurs manières d'écrire des ensembles, en particulier les ensembles de nombres :

— la notation en extension, où les éléments de l'ensemble sont explicitement écrits entre des accolades et séparés par une virgule, comme dans cet ensemble de trois nombres :

$$\mathcal{E} = \left\{ e, \, \frac{1}{22}, \, \sqrt{2} \right\}$$

Il est important de noter que la notion d'ensemble exclut toute considération d'ordre et de répétition de ses éléments. Par exemple,

$$\left\{\pi,\,\sqrt{3}\right\} = \left\{\sqrt{3},\,\pi\right\},\,$$

^{1.} Les ensembles en mathématiques sont des collections d'objets mathématiques sans considération d'ordre ni de répétition.

^{2.} Attention à ne pas confondre inclusion et appartenance. L'inclusion ensembliste est pour sa part définie plus loin dans ce chapitre.

3 IV.1. Les nombres

et

$$\{2, 5, 5, 7\} = \{2, 5, 7\}.$$

— la notation en compréhension, où les éléments sont définis comme vérifiant une ou plusieurs propriétés. Par exemple, l'ensemble des réels positifs ou nuls, noté \mathbb{R}_+ , peut s'écrire comme l'ensemble des réels tels que leur valeur est supérieure ou égale (\geq) à zéro :

$$\mathbb{R}_+ = \{ x \in \mathbb{R} : x \ge 0 \}$$

où le symbole « : » signifie « tel que » (accordé en genre – masculin/féminin – et en nombre – singulier/pluriel – en fonction de ce qui le précède bien entendu). Vous trouverez aussi comme synonyme de « : » dans la littérature le symbole « | ». Notez bien que dans l'exemple ci-dessus, l'utilisation de x plutôt qu'un autre symbole n'a aucune importance : nous aurions très bien pu le remplacer par une autre lettre :

$$\mathbb{R}_+ = \{ y \in \mathbb{R} : y \ge 0 \}$$

et cela se lirait toujours « l'ensemble des nombres réels tels que leur valeur est supérieure ou égale à zéro ». On dit que x et y sont mutifiés (rendus muets). Nous verrons d'autres exemples de mutification plus loin.

— Puisqu'il s'agit d'un ensemble de nombres réels, \mathbb{R}_+ peut également s'écrire comme un intervalle réel :

$$\mathbb{R}_+ = [0, +\infty[$$

où l'infini, qui n'est pas un nombre réel, est toujours rejeté de l'intervalle (d'où le crochet de droite qui pointe vers l'extérieur de l'intervalle réel) tandis que zéro est inclus dans \mathbb{R}_+ (le crochet de gauche pointe vers l'intérieur de l'intervalle réel).

L'apposition exclusive d'un signe + en indice pour désigner la restriction d'un ensemble de nombres à ses éléments positifs ou nuls n'est pas exclusif aux réels : par exemple, \mathbb{Q}_+ désigne l'ensemble des rationnels positifs ou nuls. L'apposition exclusive d'un signe - en indice de \mathbb{Z} , \mathbb{D} , \mathbb{Q} ou \mathbb{R} désigne la restriction à leurs éléments négatifs ou nuls. Par exemple,

$$\mathbb{R}_{-} = \{x \in \mathbb{R} : x \le 0\} =]-\infty, 0].$$

IV.1.3 Union et intersection d'ensembles de nombres

L'union (\cup) des deux ensembles \mathbb{R}_+ et \mathbb{R}_- , c'est-à-dire l'ensemble des éléments appartenant à \mathbb{R}_+ ou \mathbb{R}_+ , n'est autre que l'ensemble des réels

$$\mathbb{R}_{-} \cup \mathbb{R}_{+} = \mathbb{R},$$

c'est-à-dire

$$]-\infty, 0] \cup [0, +\infty[=]-\infty, +\infty[.$$

On notera que dans ce qui est écrit ci-dessus le nombre zéro appartient à la fois à \mathbb{R}_+ et à \mathbb{R}_- .

Nous venons de voir ci-dessus un exemple d'union de deux ensembles. Cette notion d'union de deux ensembles s'étend au-delà de l'union de deux ensembles de nombres réels, et il convient donc de la définir : l'union de deux ensembles A et B, notée $A \cup B$, est l'ensemble qui contient tous les éléments qui appartiennet à A ou qui appartiennent à B. Nous rappelons ici que le « ou » n'est à nouveau pas exclusif.

L'intersection de deux ensembles A et B est l'ensemble noté $A \cap B$ qui ne contient que les éléments communs à A et B.

^{3.} Ce « ou » n'est pas exclusif (Voir plus loin).

Remarque IV.1

L'intersection de deux intervalles réels est toujours un intervalle réel. Par exemple,

$$[-3, 7] \cap [-8, -1] = [-3, -1]$$

En revanche, l'union de deux intervalles réels n'est pas toujours un intervalle réel. Par exemple, si $]-3,2] \cup [-1,4[$ est effectivement un intervalle réel (il s'agit de [-1,2]), ce n'est pas le cas de $]-8,-1] \cup [2,8]$ qui est bien un ensemble mais n'est pas un intervalle réel. Intuitivement et informellement, on dira qu'un intervalle réel « n'a pas de trou ». Notons que l'intersection de deux ensembles de nombres ou de deux intervalles peut parfois se réduire à un seul nombre. Par exemple,

$${x \in \mathbb{R} : x \le 1} \cap {x \in \mathbb{R} : x \ge 1} = {1}.$$

IV.1.4 Inclusion ensembliste

Les cinq grands ensembles de nombres cités au début de cette section sont différenciés par leur type (entier, décimal, rationnel, réel) et liés deux par deux par une relation d'inclusion ensembliste qui relie ces types entre eux : les entiers naturels sont des entiers relatifs ; les entiers relatifs sont des décimaux ; les nombres décimaux sont rationnels ; les rationnels sont des réels.

Plus précisément, on dira que l' « ensemble des entiers relatifs est inclus (\subset) dans l'ensemble des nombres décimaux » ou, en langage mathématique, on écrira $\mathbb{Z} \subset \mathbb{D}$. Cela nous donne donc un exemple d'un ensemble *inclus* dans un autre. Nous pouvons étendre cette considération aux cinq ensembles mentionnés plus haut :

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

De manière générale, on dira qu'un ensemble A est inclus dans un ensemble B si tous les éléments de A sont aussi des éléments de B. Cette relation se note $A \subset B$. La non-inclusion de A dans B se note quant à elle $A \not\subset B$.

Par exemple, nous avons

$$\{1,2,3\} \subset \{1,2,3,4\}$$
.

En revanche,

$$\{1,2,3,4\} \not\subset \{1,2,3\}$$
.

IV.1.5 Différence de deux ensembles

Il y a une différence entre un nombre négatif et un nombre strictement négatif. De même, il existe une différence entre un nombre positif et un nombre strictement positif. Dans les deux cas, le mot « strictement » exclut le zéro tandis que son absence implique tacitement le zéro. Pour éviter toute ambiguïté d'interprétation, nous nous efforcerons de dire le plus souvent (en accordant en nombre – singulier/pluriel) « positif ou nul », « négatif ou nul », « strictement positif » et « strictement négatif ».

L'ensemble des réels non-nuls 4 se note 5 $\mathbb{R}^* = \mathbb{R} \setminus \{0\}$. L'utilisation du symbole ensembliste « \ » est cependant plus générale : l'expression $A \setminus B$, où A et B sont deux ensembles, se lit « A moins B » ou « A privé de B » et c'est l'ensemble des éléments de A qui n'appartiennent pas à B. L'exemple de \mathbb{R}^* ci-dessus est donc celui de l'ensemble des réels moins l'ensemble qui a zéro pour seul élément. Par exemple, l'ensemble des réels moins l'ensemble des nombres rationnels s'écrit $\mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ et s'appelle l'ensemble des irrationnels. Par exemple, $\sqrt{2}$, le nombre π et le nombre e sont trois nombres irrationnels : ce sont des nombres réels qui ne sont pas des nombres rationnels car ils ne peuvent pas s'écrire sous la forme d'un ratio (quotient) d'entiers relatifs.

IV.1.6 Intervalles d'entiers relatifs

Nous avons vu ci-dessus comment noter et utiliser des intervalles réels. Il est également possible d'écrire des intervalles d'entiers relatifs avec une notation que nous utiliserons ci-dessous et dans les prochains chapitres.

Soient a et b deux entiers relatifs. Dans ce qui suit, l'écriture de l'intervalle fermé d'entiers relatifs $[\![a,b]\!]$ se comprendra comme

$$[a, b] = \{n \in \mathbb{Z} : a \le n \le b\}.$$

^{4.} L'apposition d'un astérisque est également utilisée pour d'autres ensembles de nombres que celui des réels.

^{5.} Attention à ne pas confondre \emptyset et $\{0\}$: le premier est l'ensemble vide; le second n'est pas l'ensemble vide puisqu'il contient zéro, qui est un nombre.

Par exemple,

$$[-2, 3] = \{-2, -1, 0, 1, 2, 3\}.$$

Cette utilisation est transposable au cas d'intervalles d'entiers relatifs ouverts (les deux crochets pointent vers l'extérieur de l'intervalle) et semi-ouverts (un des deux crochets pointe vers l'extérieur et l'autre vers l'intérieur) de la même manière que pour les réels.

IV.2 Le langage mathématique : la notation symbolique

Comme nous l'avons dit dans l'introduction, le monde des mathématiques est peuplé d'objets pour lesquels nous décrivons des faits et sur lesquels nous formulons des propositions. Ces propositions sont énoncées dans une langue, qui la plupart du temps fait appel à la langue naturelle, mais qui nécessite d'autres éléments de langage, dont des symboles (par exemple $+, =, \times, \ldots$), des noms d'objets, appelés constantes (par exemple π , 123, $\sqrt{2},\ldots$) mais aussi des variables — sur lesquelles nous nous attarderons un peu plus —, des connecteurs (« et », « ou », « non », « implique »,...) et des quantificateurs (« pour tout », « il existe au moins un »,...). Comme toute langue, la langue mathématique ne peut pas se contenter d'un lexique, elle a aussi une « grammaire » qui décrit les règles permettant d'écrire des propositions acceptables, ainsi qu'une « sémantique » qui permet de donner un sens aux propositions. Il ne s'agit pas dans la suite de proposer un cours de logique, mais de formuler quelques principes de l'usage de la langue mathématique. L'avantage attendu est qu'elle est supposée lever les ambiguïtés d'interprétation des propositions, et rendre univoque la signification de celles-ci. Nous avons déjà vu au paragraphe précédent quelques symboles, pour la plupart ensemblistes. Ceux-ci sont récapitulés à la table IV.2. Nous y avons ajouté le symbole « \emptyset » de la note 5 en-bas de la page 4. Ce symbole dénote l'ensemble vide.

```
{}
           délimiteurs d'un ensemble (\{e, \sqrt{2}, \pi\})
                                                                                                                  ensemble vide
                                « appartient à » (2 \in \mathbb{N})
\in
                                                                    \subset
                                                                                                « est inclus dans » (\mathbb{N} \subset \mathbb{Q})
                 « moins » (A \setminus B), se lit A moins B)
                                                                    \cap
                                                                               intersection de deux ensembles (A \cap B)
\cup
                  union de deux ensembles (A \cup B)
                                                                                             « tel que » (\{x \in \mathbb{R} : x > 1\})
 et
         délimiteurs d'intervalles réels (-\pi, \pi)
                                                                    \llbracket \text{ et } \rrbracket
                                                                               délimiteurs d'intervalles sur \mathbb{Z} ([-3, 4])
```

Tableau IV.2 – Symboles ensemblistes (Le contenu entre parenthèses à côté de chaque symbole de cette table est soit un exemple illustratif de ce sur quoi s'applique le symbole, soit un exemple illustratif de l'application du symbole).

Outre les symboles ensemblistes, chaque discipline mathématique a développé un vocabulaire symbolique qui lui est propre, et dont une partie peut être commune à d'autres disciplines. Bien connaître ce vocabulaire de base est un prérequis essentiel pour comprendre sans équivoque ce qui est signifié par une proposition. Au-delà des conventions usuelles (utiliser f pour désigner une fonction, x pour désigner une variable, etc.) dont il faut cependant être capable de s'affranchir, il est important de retenir que la nature de chaque objet mathématique dont on parle dans un énoncé doit être identifiée : si x et y sont deux réels et que l'on se contente d'écrire « 2x + 3 = y » sans préciser que x et y sont deux réels, notre énoncé sera lacunaire.

IV.2.1 La notion de proposition en mathématiques

Une proposition mathématique est un énoncé 6 qui porte sur des objets mathématiques et relate des faits à leur propos : la proposition dit quelque chose de ces objets. Les objets en question peuvent être des nombres, des variables, des fonctions, des vecteurs, etc. Par exemple, $x^2 + 5y$ n'est pas une proposition mathématique mais simplement une expression, car elle ne dit rien de la somme de x^2 et de 5y. Dans tout ce qui suit, P et Q désignent deux propositions.

Nous venons de citer les variables. Leur cas est intéressant car une même proposition contenant une (ou plusieurs) variable(s) peut avoir une signification, donc une valeur de vérité (voir ci-dessous), susceptible d'être différente en fonction de la valeur que prendra la (les) variable(s).

Une chose importante à retenir lorsque l'on travaille avec une ou plusieurs variables, c'est qu'il faut toujours chercher à savoir (si l'on est lecteur) ou préciser (si l'on rédige) à quel ensemble est *astreinte* cette variable. Dans l'exemple ci-dessus, on cherchera par exemple à savoir si x et y sont astreintes à l'ensemble des réels, des naturels, ou à tout autre ensemble, possiblement exprimé sous la forme d'intervalle.

Une variable est le plus souvent désignée par une lettre en alphabet latin ou grec, possiblement affectée d'un indice $(x_1 \text{ ou } \theta_k \text{ par exemple})$. On évitera d'identifier une variable en utilisant un exposant $(x^2 \text{ ou } \alpha^m \text{ par exemple})$ afin d'éviter toute ambiguïté avec l'opération d'exponentiation que nous verrons plus en détails dans le chapitre suivant. De même, on fera toujours attention à ne pas se retrouver avec une variable écrite comme k_k par exemple, car cela peut se révéler problématique en menant à certaines ambiguïtés ou impossibilités d'interprétation.

Puisque les lettres grecques sont régulièrement utilisées pour désigner des variables, nous les récapitulons à la table IV.3.

Α	alpha	α	N	nu	ν
В	bêta	β	Ξ	xi	ξ
Γ	gamma	γ	О	omicron	0
Δ	delta	δ	Π	pi	π
\mathbf{E}	epsilon	ϵ	P	rhô	ρ
\mathbf{Z}	zêta	ζ	$\begin{array}{ c c } \sum \\ T \end{array}$	$_{ m sigma}$	σ
Η	êta	η	Γ	tau	au
Θ	thêta	θ	Y	upsilon	v
I	iota	ι	Φ	phi	φ
K	kappa	κ	\mathbf{C}	chi	χ
Λ	lambda	λ	Ψ	psi	ψ
Μ	mu	μ	Ω	omega	ω

Tableau IV.3 – Alphabet grec.

En logique classique, une proposition sera soit vraie, soit fausse ⁷, mais pas les deux en même temps ⁸. Par exemple, l'énoncé « Tout nombre naturel est impair » est une proposition, et elle est fausse ; l'énoncé « Tout nombre pair est divisible par deux » est une proposition, et elle est vraie. Cette classification vaut également lorsque les propositions sont écrites en langage symbolique. Une proposition vraie s'appelle une assertion. Lorsque celle-ci est d'importance et prouvable, elle porte le nom de théorème.

La valeur de vérité des propositions mathématiques ne fera pas l'objet d'un développement poussé. Cette notion est abordée dans ce chapitre pour initier de bonnes pratiques d'écriture et pour souligner le danger d'une rédaction symbolique négligée.

IV.2.2 Connecteurs

Pour produire de nouveaux énoncés mathématiques, on utilise des connecteurs : des propositions peuvent être « connectées » entre elles pour en former de nouvelles, plus complexes. Les connecteurs les plus courants sont décrits dans ce paragraphe. Notons qu'un symbole d'(in)égalité $(=, \neq, \leq, <, \geq, >)$ n'est pas un connecteur logique puisqu'il ne connecte pas des propositions entre elles mais sert à lier deux expressions pour former une proposition.

IV.2.2.A Conjonction, disjonction, négation

En mathématiques, comme en sciences appliquées, les symboles logiques du « ET » (conjonction, symbole \land , binaire 9), du « OU » (disjonction, symbole \lor , binaire), ainsi que du « NON » (négation, symbole \neg , unaire 10) sont assez peu utilisés dans les écritures symboliques. Nous les écrivons en majuscule pour les distinguer en sens du « et », du « ou » et du « non » de la langue naturelle (voir plus loin).

IV.2.2.B Implication

Le connecteur « SI..., ALORS... », aussi dénommé « IMPLIQUE » (implication, symbole ⇒, binaire) pose souvent des difficultés et il est régulièrement mal utilisé. La proposition

$$P \Longrightarrow Q$$
 (IV.1)

^{7.} On comprend donc bien pourquoi $x^2 + 5y$ n'est pas une proposition.

^{8.} On parle du principe du *tiers* exclu. Il ne s'agit pas ici d'un tiers au sens du tiers de l'unité (1/3), mais au sens d'une tierce (troisième) possibilité en plus des deux possibilités « valeur de vérité : vrai » et « valeur de vérité : faux ».

^{9.} Lie deux propositions entre elles.

^{10.} N'agit que sur une seule proposition.

se traduit par « Si P, alors Q » ou encore par « P implique Q ».

IV.2.2.C Équivalence

Le « ÉQUIVAUT À » (équivalence, symbole \iff , binaire), se traduit également par « SI ET SEULEMENT SI ». Deux propositions équivalentes sont dites synonymes l'une de l'autre, ce qui s'écrit parfois $(P \equiv Q)$, où P et Q sont deux propositions équivalentes.

IV.2.3 Valeurs de vérité, sémantique

Ce qui fait le charme et la difficulté des mathématiques est de donner du sens aux propositions que l'on peut écrire. On peut accorder plusieurs niveaux d'interprétation du « sens ». Celui qui ne nous intéressera pas dans ce chapitre, qui rend compte des aspects formels des mathématiques, est celui du sens des objets et du discours sur ces objets : on ne discutera pas du sens des nombres, ni des adjectifs ou qualificatifs des nombres. Le « sens » dont il va être question est de savoir si une proposition est *Vraie* ou *Fausse*. Comme nous l'avons déjà signalé, le langage que nous avons choisi n'a que deux *valeurs de vérités* : une proposition est soit Vraie, soit Fausse. Elle n'est pas un peu des deux et une proposition qui n'est pas Vraie est Fausse et réciproquement. La grande difficulté des mathématiques est de savoir décider face à une proposition bien formulée si elle est Vraie ou Fausse. Il faudra prendre garde aussi de différencier le Vrai de l'Utile. Une proposition peut être Vraie, mais parfaitement inutile pour les mathématiques.

IV.2.3.A Connecteurs et valeurs de vérité

- La proposition « P ET Q » est Vraie si et seulement si P et Q sont simultanément Vraies. Elle est Fausse dans tous les autres cas.
- La proposition « P ou Q » est vraie si et seulement si au moins une des deux proposition (P ou Q) est Vraie. Elle est Fausse si P et Q sont simultanément Fausses.
- Si P est une proposition Vraie, alors « NON P » est une proposition Fausse. Si P est une proposition Fausse, alors « NON P » est une proposition Vraie.
- La proposition « $P \Longrightarrow Q$ » n'est Fausse que si P est Vraie et Q est Fausse. Elle est Vraie dans tous les autres cas.
- La proposition « $P \iff Q$ » est Vraie si et seulement si P et Q ont même valeur de vérité, c'est-à-dire lorsqu'elles sont soit simultanément Vraies, soit simultanément Fausses.

On aura observé que le « OU » en mathématiques est non-exclusif 11 : en mathématiques, « P OU Q » ne signifie pas « Soit P est vraie, soit Q est vraie, mais pas les deux » mais bien « Au moins une des deux propositions parmi P et Q est vraie ». Le « OU » mathématique n'a donc pas le même sens que celui que l'on attribue régulièrement à ce mot dans le langage courant : quand on dit dans le langage courant qu'un objet est bleu ou rouge, on exclut qu'il soit les deux à la fois. Pour une disjonction exclusive en mathématiques phrasées en français, on utilisera la locution « ou bien ».

Remarque IV.2

Le symbole d'implication est trop souvent utilisé à tort pour désigner un rapport de cause à effet comme dans le langage courant (pour signifier « donc »), ou alors pour passer d'une étape à l'autre dans un raisonnement (pour signifier « Ainsi, »). Il perd ainsi son statut de connecteur pour un statut flou d'abréviation. Les symboles de la logique n'ont pas pour objectif d'être des raccourcis sténographiques.

Par souci de lisibilité, nous abandonnerons désormais l'utilisation de majuscules pour désigner les connecteurs logiques dans la langue naturelle.

Remarque IV.3

Attention à ne pas utiliser abusivement le symbole d'équivalence. Prenons par exemple la variable x astreinte à l'ensemble des réels. Dans ce cas, la proposition

$$(x \ge 1) \Longleftrightarrow (x^2 \ge x)$$

est fausse. On peut la réécrire schématiquement

$$P[x] \iff Q[x]$$

où l'on aura facilement identifié la proposition P et la proposition Q. Le symbole x entre crochets est là pour rappeler que P et Q sont deux propositions portant sur x. Pour que l'équivalence soit vraie, il faut que P et Q soient soit toutes les deux vraies, soit toutes les deux fausses. Or, par exemple, pour (x=0), on a P[x] est fausse tandis que Q[x] est vraie. Idem lorsque x est strictement négatif. En revanche, l'équivalence sera vraie lorsque la variable x sera astreinte à l'ensemble des réels strictement positifs.

On comprend dès lors mieux grâce à cet exemple pourquoi le symbole d'équivalence était traduit plus haut par « si et seulement si ».

IV.2.4 Quantificateurs

Ce qui distingue la langue naturelle des énoncés mathématiques est que ces derniers utilisent très souvent des variables. On a déjà rencontré par exemple la proposition « n est pair ». Cette proposition contient une variable n dont on peut supposer qu'elle parle d'un entier nommé n et dont la proposition dit qu'il est pair. Tant qu'on ne sait rien sur cet entier, on ne peut pas s'engager sur la vérité de cette proposition. Non pas qu'elle ait une valeur de vérité intermédiaire entre le Vrai et le Faux : on ne peut pas lui accorder de valeur de vérité. Les mathématiciens n'aiment pas ces situations et les quantificateurs vont permettre de se décider sur le Vrai et le Faux. Ces quantificateurs peuvent être plus ou moins explicites. Par exemple, dans la proposition « Tout nombre naturel pair est divisible par deux », le mot « Tout » sous-entend fortement déjà une quantification. Nous verrons comment les identifier.

IV.2.4.A Quantificateur universel

Parmi ces quantificateurs, nous mentionnerons le « Pour tout ..., nous avons » (quantificateur universel, symbole \forall). Il se traduit également par « Quel que soit ..., nous avons ». Par exemple, la proposition

$$\forall x, P[x]$$
 (IV.2)

se lit « Pour tout x, nous avons P[x] », où P[x] est une proposition portant sur x. On pourra simplifier la lecture en « Pour tout x, P[x] ».

La virgule que nous avons introduite dans l'écriture (IV.2) est en réalité dispensable, et souvent omise dans les textes mathématiques. Nous l'introduisons ici pour faciliter la lecture mentale de la proposition.

Dans la pratique des mathématiques pour les sciences appliquées, on utilise souvent des quantifications universelles $relativis\acute{e}es^{12}$, c'est-à-dire que l'on astreint la ou les variable(s) quantifiée(s) à un ensemble lors de la quantification, comme à l'exemple $\overline{IV}.1$.

Exemple IV.1

La proposition « Tout nombre naturel est un entier relatif » se traduit mathématiquement par

$$\forall n \in \mathbb{N}, (n \in \mathbb{Z}),$$

dont la traduction textuelle, c'est-à-dire mot-à-mot (plutôt déconseillée à partir d'un certain niveau de complexité) serait « Pour tout n appartenant à l'ensemble des entiers naturels, on a n qui appartient à l'ensemble des entiers relatifs. »

Revenons sur l'exemple de la remarque IV.3. Étant donné ce qui en a été dit, nous comprenons qu'il s'agit d'une implication, que nous pouvons écrire grâce à une quantification relativisée :

$$\forall x \in \mathbb{R}, (x \ge 1) \Longrightarrow (x^2 \ge x)$$

^{12.} Le terme « bornée » est également couramment usité.

L'écriture dans la remarque IV.3 remplaçait le symbole d'implication par un symbole d'équivalence, et était donc fausse.

La proposition suivante est, quant à elle, une équivalence, et elle est vraie :

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, (x \ge 1) \iff (x^2 \ge x).$$

Notez donc l'importance du choix de l'ensemble auquel la variable est astreinte. On l'écrira souvent sous une forme qui rend invisible l'implication, mais cela continue à dire la même chose :

$$\forall x \ge 1, x^2 \ge x.$$

IV.2.4.B Quantificateur existentiel

Parmi les quantificateurs, nous mentionnerons également le « Pour au moins un ..., nous avons » (quantificateur existentiel, symbole \exists). Il est le plus souvent traduit par « Il existe au moins un ... tel que ». Par exemple, la proposition

$$\exists x, P[x]$$

se lit « Pour au moins un x, nous avons P[x] ». La lecture simplifiée de cette proposition sera « Pour au moins un x, P[x] », et nous remarquons qu'une telle lecture suit la même syntaxe que celle de la quantification universelle.

IV.2.4.C Quantification d'existence et d'unicité

Finalement, le quantificateur « Pour un unique ..., nous avons » (quantificateur d'existence et d'unicité, symbole \exists !) se traduit plus souvent par « Il existe un et un seul ... tel que ». Par exemple, la proposition

$$\exists !x, P[x]$$

se lit « Pour un unique x, nous avons P[x] ». La lecture simplifiée de cette proposition sera « Pour un unique x, P[x] ».

IV.2.4.D Quantification existentielle ou quantification d'existence et d'unicité?

Dans une proposition mathématique écrite en français comprenant la locution « Il existe ... tel que », cette locution est synonyme de « Il existe au moins un ... tel que » ou, comme nous l'avons vu plus haut, « Pour au moins un ..., nous avons... », et ce, même si le « au moins » n'est pas écrit dans « Il existe ... tel que ». En effet, déclarer l'existence de quelque chose ne consiste pas à en présumer l'*unicité* (le fait que cette chose soit unique).

Exemple IV.2

La proposition « Il existe au moins un entier naturel strictement plus grand que 1 et plus petit ou égal à 3 » se traduit mathématiquement par

$$\exists n \in \mathbb{N}, (1 < n \le 3)$$

dont la traduction textuelle serait « Pour au moins un n appartenant à l'ensemble des entiers naturels, nous avons n qui est strictement plus grand que 1 et plus petit ou égal à 3. » Notez bien que si les mots « plus petit ou égal » avaient été remplacés par « strictement plus petit » dans l'énoncé français, nous aurions un symbole « \exists ! » à la place de « \exists » car le seul entier naturel strictement plus grand que 1 et strictement plus petit que 3 est 2 :

$$\exists ! n \in \mathbb{N}, (1 < n < 3).$$

Nous attirons l'attention sur le fait que la locution « Il existe au plus un ..., tel que » n'est pas synonyme de « Il existe un et un seul » et n'est en réalité pas une quantification existentielle. En effet, dire qu'il existe au plus un x tel que P[x] n'exclut pas qu'il y en ait zéro, alors que cette possibilité est exclue lors d'une quantification existentielle.

IV.2.4.E Usage des quantificateurs dans une proposition

Précisons d'abord que les quantificateurs portent exclusivement sur des variables : on n'écrit jamais $\exists f(x)$ ni $\forall \log y$ par exemple.

Remarque IV.4

Dans une proposition sans connecteur, si quantification il y a, elle est placée en début de proposition. On évitera donc d'écrire des choses comme

$$f(x) = g(x) \ \forall x$$

car le « $\forall x$ » est placé à la fin de la proposition. On comprend donc qu'il ne faut pas toujours chercher à faire une traduction littérale lors de l'écriture de propositions mathématiques en langage symbolique.

Si la proposition contient des connecteurs binaires (comme celui d'équivalence par exemple), et que les sous-propositions qui la composent comportent des quantifications, la même règle s'applique à ces sous-propositions.

Nous mentionnions plus haut la quantification relativisée. Celle-ci est souvent utilisée pour astreindre une variable à un ensemble présenté sous forme d'intervalle réel

$$\forall x \in [-\pi, \pi[, P(x)])$$

ou entier

$$\forall n \in [3, 7], Q[n]$$

Ces exemples peuvent également être repris avec une quantification existentielle, et pour des intervalles ouverts et semi-ouverts.

On retrouve souvent des quantifications relativisées de la forme

$$\exists x > a, P[x]$$

où il aura été important de définir à quel ensemble appartiennent x et a. Si x et a sont deux réels par exemple, il faut comprendre que cette proposition signifie

$$\exists x \in \mathbb{R}, (x \in]a, +\infty[\text{ et }P[x]),$$

ce qui signifie également

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ x \in]a, +\infty[\Longrightarrow P[x].$$

On prendra garde dans ces quantifications lorsqu'on sera appelé à les nier, ce qui n'est pas l'objet de cette contribution.

La quantification relativisée peut astreindre la variable à un ensemble écrit en extension. Par exemple,

$$\forall n \in \{-2, 0, 2\}, P[n].$$

Finalement, nous voudrions rapporter ici que l'on peut permuter deux quantifications universelles consécutives et de même nature (variable astreinte au même ensemble par exemple) pour, à partir d'une proposition, obtenir une proposition synonyme. De même, on peut permuter deux quantifications existentielles consécutives de même nature. En revanche, on ne s'autorisera pas à permuter une quantification universelle et une quantification existentielle consécutives : les deux propositions

$$\forall x, \exists y, P[x, y]$$

et

$$\exists y, \, \forall x, \, P[x, y]$$

ne seront en général pas synonymes. On évitera également de permuter deux quantifications d'existence et d'unicité $(\exists !)$ pour les mêmes raisons : la proposition

$$\exists !x, \exists !y, P[x, y]$$

n'est généralement pas synonyme de

$$\exists ! y, \exists ! x, P[x, y].$$

Les connecteurs et quantificateurs relevés ci-dessus sont récapitulés dans la table IV.4. On a également dans cette table le symbole $\ll :=$ » qui s'utilise pour définir. Par exemple, dire que A est défini comme étant B

s'écrira A := B.

```
\forall \qquad \qquad \text{``end Pour tout ..., on a que ``} \qquad \exists \qquad \text{``end Pour au moins un ..., on a que ``} \\ \Rightarrow \qquad \text{``end implique ``, ``end si ..., alors ``} \qquad \Leftrightarrow \qquad \text{``equivaut à ``, ``end it seulement si ``} \\ \exists! \qquad \text{``end Pour un et un seul ..., on a que ``} \qquad \qquad \Leftrightarrow \qquad \text{``est défini comme ``}
```

Tableau IV.4 – Connecteurs et quantificateurs courants; symbole de définition.

Vous aurez peut-être noté que les quantificateurs universel et existentiels sont également des mutificateurs : dans les exemples IV.1 et IV.2, remplacer le signe 13 n par m n'aurait en rien changé la signification des deux propositions prises comme exemple. Nous y reviendrons dans une section ultérieure.

IV.2.5 Écrire une proposition

Nous passons ici en revue quelques règles d'usage, ainsi que quelques conseils pour écrire des propositions, que ce soit en français ou en langage symbolique.

IV.2.5.A Commentaires généraux

Avant toute chose, il convient de rappeler qu'il est souvent dangereux d'utiliser des symboles en lieu et place de ceux que nous avons définis ci-dessus. On évitera donc d'utiliser \longrightarrow (ou pire \longmapsto) à la place de \Longrightarrow , et de même on évitera d'utiliser \longleftrightarrow pour \Longleftrightarrow .

De manière générale, on fera attention à ne jamais écrire en langage symbolique ni les quantificateurs ni les connecteurs dans des phrases écrites en français. Ces symboles sont strictement réservés aux écritures symboliques. Finalement, l'utilisation de « : » (parfois remplacée par « | ») est réservée à l'écriture d'ensembles en compréhension. On évitera donc de les écrire au milieu d'une expression ou proposition mathématique en langage symbolique pour signifier « tel que » à la lecture mentale. Il faut également comprendre que le langage symbolique ne peut avoir un usage exclusif pour écrire des mathématiques, car il en rendrait la lecture impossible sauf pour une machine. Il faut considérer qu'il s'agit d'une aide pour comprendre des énoncés complexes lorsqu'ils sont formulés en français et on doit s'astreindre à les manipuler avec les règles que nous avons ébauchées. Il est hors de question de les utiliser comme des abréviations, placées à des emplacements inadaptés et dans un ordre fantaisiste au risque d'écrire des propositions incohérentes comme « phrase sens n'qui une pas a ».

En guise d'ultime commentaire pour ce paragraphe, nous souhaiterions recommander au lecteur de ne jamais commencer une phrase en français par un symbole du langage symbolique mathématique, ou de faire suivre une virgule dans une phrase en français par un tel symbole. Nous lui faisons également part d'un conseil (qui ne concerne d'ailleurs pas que les mathématiques) qui dit qu'il faut toujours écrire pour quelqu'un. Une anticipation active des difficultés d'un lecteur à déchiffrer et comprendre ce que vous avez écrit vous aidera à mieux écrire. Cela est également utile si vous écrivez pour vous-même.

IV.2.5.B Combinaison de quantificateurs et parenthésage implicite

Les quantificateurs peuvent être combinés dans des propositions plus élaborées. Par exemple, si l'on souhaite écrire que « pour tout entier naturel, il en existe un et un seul autre tel qu'il est la somme du premier et du nombre 1 », on écrira

$$\forall n \in \mathbb{N}, \exists ! m \in \mathbb{N}, m = n + 1. \tag{IV.3}$$

Sans parenthésage, chaque quantification est suppos'ee porter sur le reste de la proposition. Il y a donc un parenthésage implicite dans l'écriture IV.3, équivalente à 14

$$\forall n \in \mathbb{N}, [\exists! m \in \mathbb{N}, (m = n + 1)],$$
 (IV.4)

où l'on voit que la quantification d'existence et d'unicité porte sur le contenu des parenthèses, tandis que la quantification universelle porte sur tout le contenu des crochets.

^{13.} Le mot « signe » n'est pas réservé exclusivement à + et à - (ou à « positif » et « négatif ») mais désigne toute unité d'expression du langage.

^{14.} Attention à ne pas confondre cette écriture, faisant appel à des crochets, à celle des intervalles réels.

IV.2.5.C Parenthésage d'expressions dans des propositions simples

Lorsqu'une proposition est composée de deux propositions connectées entre elles par un connecteur logique binaire (par exemple, d'implication ou d'équivalence), il est parfois plus prudent de mettre les deux propositions connectées entre parenthèses. Par exemple,

$$3y = 1 \Longleftrightarrow y = \frac{1}{3}$$

peut également s'écrire

$$(3y=1) \Longleftrightarrow \left(y=\frac{1}{3}\right).$$

Même si cela n'est pas indispensable, il s'agit d'une bonne habitude à prendre pour éviter toute ambiguïté lorsque les propositions deviennent plus complexes. Des crochets peuvent également être utilisés. L'utilisation de parenthèses est également recommandée lorsque l'on écrit des relations en langage symbolique dans du texte en français, comme par exemple l'équivalence $(P \equiv Q)$ ou l'égalité (x = 0). Bien que non-indispensable, cette habitude permettra aussi d'éviter toute ambiguïté d'interprétation lorsque le langage symbolique pourrait être interprété en français alors qu'il est mathématique. Elle permettra également d'aider à identifier l'expression ou la proposition comme une entité individuelle au sein de la phrase.

IV.2.5.D Parenthésage dans des propositions complexes

Même si l'insertion d'un parenthésage peut parfois se révéler fortuit, il est des occurrences où son bon placement se révèle crucial. Prenons par exemple la proposition suivante :

$$\forall n \in \mathbb{N}, (n \text{ pair}) \iff (\exists k \in \mathbb{N}, n = 2k)$$
 (IV.5)

qui est la définition d'un nombre naturel pair : « n est un nombre naturel pair si et seulement si il existe un autre 15 entier naturel k tel que n peut se réécrire comme le double de k ». Puisqu'il s'agit d'une équivalence, on peut la réécrire

$$\forall n \in \mathbb{N}, (\exists k \in \mathbb{N}, n = 2k) \iff (n \text{ pair}).$$
 (IV.6)

Modification hasardeuse du parenthésage

Modifier le parenthésage peut avoir de graves conséquences. Par exemple,

$$(\forall n \in \mathbb{N}, \exists k \in \mathbb{N}, n = 2k) \iff (n \text{ pair})$$
 (IV.7)

pose plusieurs soucis : les parenthèses cernant la proposition à gauche du connecteur d'équivalence font que l'on peut légitimement se demander si la quantification sur n s'arrête au-delà de la parenthèse fermée à gauche du connecteur. La question ne se posait pas pour la proposition (IV.6) qui est implicitement équivalente à

$$\forall n \in \mathbb{N}, [(\exists k \in \mathbb{N}, n = 2k) \iff (n \text{ pair})]$$
 (IV.8)

où l'on voit que la quantification sur n porte sur tout ce qui est contenu entre crochets, ce qui inclut également la proposition à droite du connecteur d'équivalence.

Avec un parenthésage tel que celui de l'écriture (IV.7), au-delà du fait que l'on ne sait rien de l'ensemble auquel n est astreint (ou tout au moins qu'il y a une ambiguïté à ce sujet) alors que c'était l'objet de la quantification universelle dans l'écriture (IV.6), la proposition à gauche du connecteur d'équivalence dans l'écriture (IV.7) devient de toute façon fausse puisqu'elle prétend que tout entier naturel peut s'écrire comme le double d'un autre entier naturel. Cela est bien évidemment faux puisqu'il existe des entiers naturels impairs.

Dangers de l'omission du parenthésage

Finalement, notons qu'omettre tout parenthésage peut également modifier une proposition (et donc possiblement sa valeur de vérité). On s'en convaincra avec l'exemple suivant : la proposition suivante est vraie :

^{15.} Lorsque l'on dit un « autre », cela ne signifie pas qu'il doit obligatoirement être différent du premier.

$$\forall x \in \mathbb{R}, \left(\forall y \in \mathbb{R}, x^2 \le y^2\right) \Longleftrightarrow (x = 0)$$
 (IV.9)

On s'en convaincra par une rapide étude de cas. En effet, la quantification universelle sur x nous permet d'écrire deux situations : soit x est un réel nul, soit il est un réel non-nul.

 $\mathbf{Cas}\ x = 0$

On voit alors que la proposition

$$\left(\forall y \in \mathbb{R}, \ x^2 \le y^2\right) \Longleftrightarrow (x=0)$$
 (IV.10)

devient

$$(\forall y \in \mathbb{R}, \ 0 \le y^2) \iff (0 = 0).$$

Sachant que le carré de tout nombre réel est supérieur ou égal à zéro, on voit que les deux propositions de part et d'autre du connecteur d'équivalence sont vraies simultanément, et donc que la proposition est vraie.

Cas $x \neq 0$

Étant donné ce qui précède, on voit que dans le cas où $(x \neq 0)$ les deux propositions de part et d'autre du connecteur d'équivalence dans l'écriture (IV.10) sont fausses simultanément, ce qui signifie que l'équivalence est vraie.

En conclusion, quel que soit le x réel choisi (nul ou non-nul), l'équivalence qui suit la quantification universelle dans la proposition (IV.9) est vraie, donc la proposition (IV.9) est vraie.

En omettant tout parenthésage, c'est-à-dire en écrivant

$$\forall x \in \mathbb{R}, \forall y \in \mathbb{R}, \ x^2 \le y^2 \Longleftrightarrow x = 0, \tag{IV.11}$$

on obtient une proposition synonyme par parenthésage implicite à

$$\forall x \in \mathbb{R}, \left[\forall y \in \mathbb{R}, \left[\left(x^2 \le y^2 \right) \Longleftrightarrow (x = 0) \right] \right]$$

ou, comme nous le verrons plus loin, à

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, (x^2 \le y^2) \Longleftrightarrow (x=0)$$

où la quantification universelle se lit "Pour tout couple (x, y) de nombres réels". L'existence d'un simple contre-exemple, celui où (x = 1) et où (y = 2), nous montre que la proposition

$$\left(x^2 \le y^2\right) \Longleftrightarrow (x=0)$$

n'est pas vraie pour tout couple (x, y) de nombres réels, et donc que la proposition (IV.11) est fausse. L'omission de parenthèses a donc bien eu pour conséquence de modifier la valeur de vérité de notre proposition initiale.

IV.2.5.E Couples de nombres

Continuons ce premier chapitre par deux exemples un peu plus élaborés où la notion de couple de nombres est introduite :

Exemple IV.3

La proposition « Pour tout couple d'entiers naturel, leur somme est paire si et seulement si elle est divisible par 2. » peut se traduire symboliquement par

$$\forall (\mathbf{m}, \mathbf{n}) \in \mathbb{N}^2$$
, $[(m+n) \text{ pair}] \iff [\exists k \in \mathbb{N}, (m+n=2k)]$

Exemple IV.4

La proposition « Le cube de tout entier naturel peut s'écrire comme la différence du carré de deux entiers naturels » peut se traduire symboliquement par

$$\forall n \in \mathbb{N}, \ \exists (i, j) \in \mathbb{N}^2, \ \left(n^3 = i^2 - j^2\right).$$

L'exemple IV.3 fait simplement appel à la définition d'un nombre pair (un entier naturel divisible par deux, donc qui peut se réécrire sous la forme 2k où k est un entier naturel).

IV.2.6 Mutification

Nous avons vu plus haut qu'une variable pouvait être rendue *muette* par mutification. Comme ce concept est important et souvent mal compris dès l'entrée en licence de sciences appliquées, nous voudrions apporter quelques précisions sur le sujet.

IV.2.6.A Mutification d'une variable dans une expression

Soit E[x] une expression faisant intervenir la variable réelle x:

$$E[x] = x^2 - 3x.$$

Dans la définition de E[x], nous avons astreint la variable x à l'ensemble des réels. Selon la valeur de x, nous aurons que E[x] aura une valeur réelle différente. Cela étant entendu, on est en droit de se demander si le fait de choisir une autre variable que x peut présenter un risque de modification de l'expression.

Si une variable est muette dans une expression (ce qui n'est pas le cas de E[x] ci-dessus), cela a pour conséquence que son choix (choisir x plutôt que y par exemple) n'influence pas l'identité d'une expression (sa valeur numérique, la définition d'un objet,...) pourvu que la variable choisie demeure astreinte au même ensemble : on remplace une variable réelle par une autre variable réelle par exemple. Ces considérations s'étendent donc évidemment au-delà du cadre des expressions faisant intervenir une variable réelle, qui n'était considéré ci-dessus qu'à titre d'exemple.

Nous utiliserons dans les chapitres suivants des *symboles mutificateurs* intervenant dans des expressions. Les détails relatifs à la définition et l'usage de ces outils seront donnés ultérieurement, mais nous jugeons bon de déjà les citer.

Dans ce qui suit, a, x et y sont des réels et j, k, n, p et q sont des entiers naturels.

— La variable sur laquelle porte un symbole de sommation (\sum) est muette : dans l'égalité

$$\sum_{k=1}^{3} k^2 = \sum_{j=1}^{3} j^2,$$

on voit que la variable muette du membre de gauche est k, et celle du membre de droite est j. On voit bien que remplacer k par j ne change pas l'identité (dans ce cas-ci, la valeur) de notre expression : le membre de gauche est bien égal à $1^2 + 2^2 + 3^2$ (c'est-à-dire 14), et le membre de droite également. Notons que si on remplace 3 par une variable n dans l'égalité ci-dessus, on a

$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = \sum_{j=1}^{n} j^2,$$

où n n'est pas une variable muette dans les deux expressions qui composent cette égalité. Notez que la borne inférieure (ici 1) peut également être une variable non-mutifiée, comme dans

$$\sum_{k=p}^{n} (2k+7).$$

— L'idée est la même pour le symbole de multiplication (\prod) que dans le cas du symbole de sommation.

Par exemple,

$$\prod_{k=1}^{7} 2k = (2 \times 1) \times (2 \times 2) \times \dots \times (2 \times 7) = \prod_{q=1}^{7} 2q,$$

avec les mêmes commentaires que pour les bornes dans le symbole de sommation.

— Le symbole de la limite mutifie la variable sur laquelle elle s'exprime

$$\lim_{x \to a} x^2 = \lim_{y \to a} y^2$$

avec a une variable qui n'est pas muette, comme dans le cas des bornes pour les symboles de sommation et de multiplication.

— La flèche d'application dans la définition d'une fonction

$$[x \longmapsto x^2 + 3] = [y \longmapsto y^2 + 3].$$

— Le symbole de dérivation en notation de Leibniz :

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y}.$$

En effet, dans une telle notation, x dans le membre de gauche et y dans le membre de droite sont deux variables qui ne sont pas affectées. Nous en parlerons dans le chapitre sur la dérivation.

— Lorsque l'on intègre une fonction d'une seule variable ou que l'on en cherche la primitive, le symbole d'intégration (intégrale définie ou indéfinie) et le d sont des mutificateurs :

$$\int_2^3 f(x) dx = \int_2^3 f(y) dy,$$

avec le même commentaire que le symbole de sommation et de multiplication à propos des bornes.

— Les prémisses dans l'écriture en extension d'un ensemble, ou plus simplement l'écriture

$$\{\cdots:\}$$
.

Nous avons déjà vu un exemple de ce type de mutification lorsque nous définissions des intervalles réels. Prenons l'ensemble des réels solutions de l'équation $x^2 + x - 6 = 0$:

$$\left\{ x \in \mathbb{R} : x^2 + x - 6 = 0 \right\} = \left\{ y \in \mathbb{R} : y^2 + y - 6 = 0 \right\},\,$$

ce qui nous permet d'ailleurs de faire remarquer que la locution « l'équation » est également un mutificateur. En effet, nous aurions pu remplacer notre phrase ci-dessus par « Prenons l'ensemble des réels solutions de l'équation $y^2 + y - 6 = 0$ » sans en changer la signification.

IV.2.6.B Mutification d'une variable dans une proposition

Considérons maintenant une proposition P[n] portant sur un entier naturel n:

$$P[n] = n$$
 pair.

Selon la valeur de n, nous aurons que P[n] sera vraie ou bien fausse. Nos considérations sur le lien entre mutification d'une variable dans une expression mathématique et son identité s'étendent au cas des propositions, avec la valeur de vérité en lieu et place de l'identité. Dans ce contexte, et nos considérations s'étendant au-delà du cadre des propositions portant sur une variable appartenant à l'ensemble des entiers naturels, les trois quantificateurs que nous avons rencontrés plus haut sont tous les trois des mutificateurs.

Afin de ne pas troubler le lecteur d'une proposition, nous veillerons à éviter autant que possible des écritures où une même variable a une ou plusieurs occurrences dans laquelle/lesquelles elle est mutifiée et une ou plusieurs autres où elle ne l'est pas, comme par exemple dans

$$k^{2} = -\sum_{k=0}^{2n+1} \left(7k^{3} + k - 2\right)$$

où k n'est pas muette dans le membre de gauche de l'égalité alors que ses occurrences dans le membre de droite le sont. Si c'est en tant que lecteur que nous rencontrons cette situation, nous garderons à l'esprit cette information importante.

IV.2.6.C Comment reconnaître une variable muette?

La manière la plus sûre de savoir si une variable est muette est de la remplacer par (1/2), ou n'importe quelle constante du langage, dans l'expression (respectivement, la proposition) considérée : s'il s'agit toujours d'une expression (respectivement, une proposition), la variable n'est pas muette. Par exemple, demandons-nous si la variable réelle x est muette dans l'expression

$$E[x] = x^2 - 3x.$$

Remplaçons x par (1/2). Cela donne

$$E\left[\frac{1}{2}\right] = \left(\frac{1}{2}\right)^2 - 3 \times \frac{1}{2}$$

qui est toujours une expression mathématique. La variable x n'est donc pas muette dans l'expression E[x]. Opérons similairement avec la variable k dans l'expression

$$\sum_{k=1}^{3} k^2,$$

ce qui donne

$$\sum_{(1/2)=1}^{3} \left(\frac{1}{2}\right)^2,$$

qui n'est pas une expression (la sommation n'a aucun sens). La variable k est donc bien muette. Prenons maintenant la proposition portant sur un x réel

$$x \ge 2 \Longleftrightarrow x + 1 \ge 2 \tag{IV.12}$$

et remplaçons x par (1/2):

$$\left(\frac{1}{2} \geq 2\right) \Longleftrightarrow \left(\frac{1}{2} + 1 \geq 2\right).$$

Il s'agit toujours bien d'une proposition, qui porte sur les nombres (1/2), 2, et [(1/2)+1]. Faisons remarquer au passage que le fait que la proposition (IV.12) est fausse (un contre-exemple simple est le cas où x est égal à 1) ne change rien au fait que la variable x est muette dans cette proposition.

Prenons finalement la proposition

$$\forall n \in \mathbb{N}, \ n+1 \in \mathbb{N} \tag{IV.13}$$

et remplaçons n par (1/2). Cela donne

$$\forall \frac{1}{2} \in \mathbb{N}, \, \frac{1}{2} + 1 \in \mathbb{N}$$

qui n'est pas une proposition (à cause du « $\forall \frac{1}{2}$ »). La variable n est donc muette dans la proposition (IV.13).

Remarque IV.5

Ce n'est pas parce qu'on mutifie une variable qu'elle doit nécessairement apparaître dans le reste de l'expression. Par exemple, on voit que dans

$$\prod_{k=1}^{3} m^2$$

 m^2 ne dépend pas de la variable muette k. De même, dans

$$\int_0^1 f(t) \mathrm{d}x,$$

f(t) ne dépend pas de x.

Remarque IV.6

Lorsqu'on renomme une variable muette, il est préconisé d'en utiliser une nouvelle qui n'est pas encore utilisée, pour éviter de se retrouver dans une situation telle que celle-ci : imaginons que nous souhaitions remplacer la variable muette k dans

$$\sum_{k=1}^{n} k^{m}$$

où k, m et n sont des entiers naturels. Il serait mal venu de remplacer k par m ou par n pour des raisons évidentes. L'expression ci-dessus est par contre synonyme de

$$\sum_{j=1}^{n} j^{m}.$$

Chapitre V

OPÉRATIONS

Les quatre opérations élémentaires sont naturellement l'addition, la soustraction, la multiplication et la division. Les deux premières opérations font intervenir des **termes** (on additionne/soustrait plusieurs termes) tandis que les deux dernières font intervenir des **facteurs**.

Suivant l'ensemble de nombres sur lequel on les considère, les opérations n'ont pas toutes le même statut. Ainsi, si l'addition et la multiplication sont toujours des opérations **binaires**, c'est-à-dire, qu'à tout couple de nombres, elles renvoient un nouveau nombre (par exemple 2+3=5 ou $13\times 4=52$), il n'en est pas de même pour la soustraction ou la division. Cette lacune peut être vue comme l'origine de l'extension des ensembles de nombres et de la définition des rationnels $\mathbb Q$ ou des réels $\mathbb R$ dans lesquels la soustraction est une opération binaire et la division l'est presque, puisque **seule la division par** 0 **n'est pas possible**.

Remarque V.1

On veillera naturellement à ne pas confondre **opposé** et **inverse** : l'opposé d'un nombre a est -a, tandis que son inverse est 1/a, pour autant que a soit non nul.

Notations

Dans une expression algébrique, le produit se notera par une croix « × », un point médian « · » ou simplement en accolant les deux facteurs multipliés ensemble : $a \times b = a \cdot b = ab$. Il est difficile d'énoncer une règle générale d'usage de ces notations qui dépendent du contexte ou de l'ambiguïté de l'écriture. Pour la multiplication de valeurs numériques décimales, par exemple 2,31 et 4,56, on évitera de les multiplier en utilisant un point. On choisira de les écrire séparées par une croix, comme dans « 2,31 × 4,56 ». Cela est également vrai pour les produits de valeurs numériques sans décimale.

V.1 Les propriétés de l'addition de nombres réels

- L'addition est **commutative** : soient x et y deux réels. Alors, x + y = y + x;
- L'addition est **associative** : soient x, y, et z trois réels. Alors, x + (y + z) = (x + y) + z;
- Le nombre 0 est **neutre** : si x est un réel, alors x + 0 = 0 + x = x.

V.2 Les propriétés de la multiplication de nombres réels

- Le produit est **commutatif** : soient x et y deux réels, $x \times y = y \times x$;
- Le produit est **associatif**: soient x, y, et z trois réels, $x \times (y \times z) = (x \times y) \times z$;
- Le nombre 0 est **absorbant** : si x est un réel, alors $0 \times x = x \times 0 = 0$;

V. Opérations 18

— Le nombre 1 est **neutre** : si x est un réel, alors $1 \times x = x \times 1 = x$

Voici également quelques propriétés simples mais utiles : pour tous w, x et y réels, avec w non nul,

$$\frac{1}{w}(wxy) = \frac{1}{w}(wyx) = \frac{1}{w}(xwy) = \frac{1}{w}(ywx) = \frac{1}{w}(xyw) = \frac{1}{w}(yxw) = xy = yx,$$
 (V.1)

$$-x = -(x) = (-1) \times x,$$
 (V.2)

$$-(-x) = (-1)(-x) = x, (V.3)$$

$$(-x)(-y) = xy, (V.4)$$

$$-(x+y) = -x - y, (V.5)$$

où l'on fera attention à ne pas confondre -(x+y) et (-x+y). Nous avons également la règle du produit nul qui dit que, pour tout réel x et tout réel y,

$$(xy = 0) \iff (x = 0 \text{ ou } y = 0), \tag{V.6}$$

où le « ou » est non exclusif, c'est-à-dire que x et y peuvent tout à fait être nuls tous les deux.

V.3 La manipulation des fractions

Voici quelques propriétés des fractions dont la maîtrise est indispensable lors d'étapes calculatoires en sciences, notamment la simplification de calculs ¹.

1. L'opposé dans les fractions : soit x un réel et y un réel non nul, on a

$$-\left(\frac{x}{y}\right) = -\frac{x}{y} = \frac{x}{-y} = \frac{-x}{y}.\tag{V.7}$$

2. Simplification: soient a, b et k trois réels (b et k non nuls). Alors,

$$\frac{a \times k}{b \times k} = \frac{a \cdot k}{b \cdot k} = \frac{ak}{bk} = \frac{a}{b}.$$
 (V.8)

3.1 Addition 1: soient a et c deux réels quelconques et b un réel non nul. Alors,

$$\frac{a}{b} + \frac{c}{b} = \frac{a+c}{b}. (V.9)$$

3.2 Addition 2: soient a et c deux réels quelconques et soient b et d deux réels non nuls. Alors,

$$\frac{a}{b} + \frac{c}{d} = \frac{ad}{bd} + \frac{cb}{bd} = \frac{ad + cb}{bd}.$$
 (V.10)

Attention cependant aux simplifications généralement fausses :

$$\frac{a}{b} + \frac{c}{d} \neq \frac{a+c}{b+d}.\tag{V.11}$$

4. Multiplication: dans les mêmes conditions,

$$\frac{a}{b} \times \frac{c}{d} = \frac{a \times c}{b \times d} = \frac{ac}{bd}.$$
 (V.12)

^{1.} Dans les exemples de cette section, les réels se retrouvant au dénominateur, c'est-à-dire sous la barre de fraction (le numérateur étant au-dessus de celle-ci), sont non nuls.

5. Quotient de quotients : soit a un réel quelconque et soient b, c et d trois réels non nuls. Alors,

$$\frac{a/b}{c/d} = \frac{ad}{bc}. (V.13)$$

Notons que

$$\frac{a/b}{c} = \frac{a/b}{c/1} = \frac{a}{bc} \qquad \text{et} \qquad \frac{a}{b/c} = \frac{a/1}{b/c} = \frac{ac}{b}. \tag{V.14}$$

Prenons également garde à des erreurs d'interprétation dans les fractions écrites directement dans du texte : $a/bc \neq (a/b)c$. En effet, on a, par la priorité des opérations (voir ci-dessous) l'identité (a/b)c = (ac)/b. De manière générale, l'utilisation du trait oblique est **déconseillée** pour éviter ce genre d'ambiguïté, et pour éviter de se retrouver avec des expressions comme a/b/c, qui n'ont pas de sens, au même titre que l'écriture

$$x = \frac{a}{b}$$

ce qui nous donne l'occasion de rappeler que le trait de fraction principal doit toujours se trouver au niveau du signe « = »

V.4 Priorité des opérations

Considérant la soustraction comme l'addition de l'opposé d'un nombre, et la division comme le produit par l'inverse d'un nombre, nous allons réviser ici la priorité des opérations simples :

- A) Parenthèses, crochets, racine, barre de fraction;
- **B)** Puissances;
- C) Produits:
- **D)** Sommes.

Afin de ne pas alourdir le parenthésage, il est d'usage de réduire le nombre de parenthèses en imposant des règles de priorité de la multiplication sur l'addition. On vous conseille de commencer par lire l'expression et d'identifier si des éléments de type **A** sont présents. Si tel est le cas, il faudra commencer par effectuer les opérations présentes à l'intérieur de ces éléments, en respectant la hiérarchisation du parenthésage (parenthèses dans des parenthèses). Par exemple,

$$1 + (2 - (3 + 4)) = 1 + (2 - (7)) = 1 + (-5) = -4.$$

L'étape suivante consiste à tenir compte des éventuelles puissances. Finalement, on retiendra que les produits et quotients sont prioritaires sur les sommes et les différences.

V. Opérations 20

Exemple V.1

Simplifions $\frac{6-5}{4+3} (1+3\times 2)^2 - \sqrt{25} (\sqrt{50-1}+1) \left[\frac{1}{2} - \frac{2}{5}\right].$

Dans l'ordre, nous avons :

(A) Les deux racines carrées

$$\sqrt{25} = 5$$
; $\sqrt{50 - 1} = \sqrt{49} = 7$;

(A) L'intérieur des parenthèses et des crochets

$$\sqrt{50-1}+1=7+1=8$$
; $\frac{1}{2}-\frac{2}{5}=\frac{5}{10}-\frac{4}{10}=\frac{1}{10}$

et, en respectant la priorité du produit sur la somme

$$1 + 3 \times 2 = 1 + (3 \times 2) = 7$$
;

(A) Le numérateur et dénominateur de la première fraction

$$\frac{6-5}{4+3} = \frac{(6-5)}{(4+3)}$$
 avec $6-5=1$ et $4+3=7$;

(B) L'exposant sur les parenthèses

$$(1+3\times2)^2 = (7)^2 = 7^2 = 49;$$

(C) Le produit de la première fraction par le carré du contenu des parenthèses

$$\frac{6-5}{4+3}(1+3\times 2)^2 = \frac{1}{7}\times 7^2 = 7;$$

(C) Le produit du résultat de $\sqrt{25}$ par le contenu des parenthèses et des crochets

$$\sqrt{25}\left(\sqrt{50-1}+1\right)\left[\frac{1}{2}-\frac{2}{5}\right]=5\,(8)\left[\frac{1}{10}\right]=4\,;$$

(D) La différence des deux termes résultants

$$\frac{6-5}{4+3} (1+3\times 2)^2 - \sqrt{25} \left(\sqrt{50-1}+1\right) \left[\frac{1}{2} - \frac{2}{5}\right] = 7-4 = 3.$$

On remarquera dans le développement ci-dessus que l'on aura bien fait attention à faire la distinction suivante :

$$\sqrt{50-1} \neq \sqrt{50} - 1$$

On sera également attentif au fait que

$$1 + 3 \times 2 \neq 4 \times 2$$

ainsi que l'on pourrait être tenté de l'écrire en lisant l'expression de gauche à droite sans prendre garde à la priorité du produit sur la somme.

Remarque V.2

Voici également une liste d'erreurs ^a très courantes dans les simplifications d'expressions algébriques liant

1. Opposé et fraction :

$$-\frac{x+y}{z} \neq -\frac{x}{z} + \frac{y}{z} ;$$

$$x(y-z)^w \neq (xy-xz)^w$$
;

3. Exposants et associativité de la somme :

$$(2x + y^3) - w^3 = 2x + (y^3 - w^3) \neq 2x + (y - w)^3;$$

4. Exposants et associativité du produit :

$$(2x)(y^3)(-w)^3 \neq 2xy^3 - w^3.$$

 $(2x)(y^3)(-w)^3 \neq 2xy^3 - 4xy^3 - 4x$

V.5 Symboles de sommation et de produit

Ces deux symboles, notés respectivement \sum pour la somme et \prod pour le produit, s'utilisent d'une manière particulière qu'il convient de maîtriser afin de comprendre précisément la signification de certaines propositions mathématiques.

Tout d'abord, nous noterons que le symbole de sommation se développe généralement sous la forme

$$\sum_{i=n}^{N} a_i = a_n + a_{n+1} + a_{n+2} + \dots + a_{N-1} + a_N, \tag{V.15}$$

ce qui se lit "somme des a_i pour i allant de n à N". De manière similaire, on trouve

$$\prod_{i=n}^{N} a_i = a_n \times a_{n+1} \times a_{n+2} \times \dots \times a_{N-1} \times a_N \tag{V.16}$$

qui se lit "produit des a_i pour i allant de n à N"

Ces a_i sont les éléments d'un ensemble (discret) de N-n+1 valeurs, et le i est donc interprété comme une étiquette que l'on appose à chaque terme selon l'ordre que l'on impose en développant cette somme ou ce produit. Cet ordre n'a pas d'importance étant donné la commutativité de la sommation et du produit.

En particulier, on voit que l'opérateur produit permet de définir une notion importante en mathématiques et en sciences, la "factorielle" N! d'un nombre N :

$$N! = \prod_{i=1}^{N} i = 1 \times 2 \times \dots \times (N-1) \times N$$
 (V.17)

avec notamment $N! = N \times (N-1)!$ et 0! = 1 comme propriétés intéressantes.

L'indice i est dit "muet", c'est-à-dire que l'on peut le changer sans modifier la valeur de la somme ou du produit. En effet, il ne s'agit jamais que d'étiquettes que l'on met à ces nombres, termes ou facteurs, pour les discerner dans la somme ou, respectivement, le produit :

$$\sum_{i=n}^{N} a_i = \sum_{j=n}^{N} a_j \quad ; \quad \prod_{i=n}^{N} a_i = \prod_{j=n}^{N} a_j. \tag{V.18}$$

Notez bien que l'on voit souvent une somme sur i commencer pour i=0 ou i=1, mais que ceci n'est pas une généralité et qu'il faut donc toujours bien lire les "bornes" de la somme. Il peut d'ailleurs arriver que la borne supérieure d'une somme soit tout simplement $+\infty$.

L'opérateur de sommation est linéaire (il se distribue lorsqu'il agit sur une somme de termes), et si, dans l'expression de la somme, ce sur quoi l'opérateur de sommation agit ne dépend pas explicitement de l'indice V. Opérations 22

sur lequel on somme, il peut être sorti de la somme :

$$\sum_{i=n}^{N} (a_i + b) = \sum_{i=n}^{N} a_i + \sum_{i=n}^{N} b = \sum_{i=n}^{N} a_i + b \sum_{i=n}^{N} 1 = \sum_{i=n}^{N} a_i + (N - n + 1)b.$$

On peut également retrouver la mise en évidence grâce à cet opérateur :

$$\sum_{i=n}^{N} b a_i = b \sum_{i=n}^{N} a_i. (V.19)$$

Notez également que l'on peut écrire

$$\sum_{i=n}^{N} (a_i + b_i) = \sum_{i=n}^{N} a_i + \sum_{i=n}^{N} b_i,$$
 (V.20)

mais que cette flexibilité ne s'étend pas à une somme de produits :

$$\sum_{i=n}^{N} a_i b_i \neq \sum_{i=n}^{N} a_i \sum_{i=n}^{N} b_i.$$
 (V.21)

Pour sa part, l'"opérateur produit" se comporte différemment. On a tout d'abord que

$$\prod_{i=n}^{N} b(a_i) = b^{N-n+1} \prod_{i=1}^{N} a_i = b^{N-n+1} \left(a_n \times a_{n+1} \times \dots \times a_{N-1} \times a_N \right)$$
 (V.22)

et ensuite

$$\prod_{i=1}^{N} (a_i + b) = (a_1 + b) \times (a_2 + b) \times \dots \times (a_{N-1} + b) \times (a_N + b) \neq \prod_{i=1}^{N} a_i + b = \left(\prod_{i=1}^{N} a_i\right) + b,$$

ce qui nous ramène à la question de la priorité des opérations. Contrairement aux sommes de sommes (voir équation V.20), le produit de sommes n'est pas égal à la somme de produits :

$$\prod_{i=n}^{N} (a_i + b_i) \neq \prod_{i=n}^{N} a_i + \prod_{i=n}^{N} b_i, \tag{V.23}$$

et, contrairement à la somme de produits (équation V.21), le produit de produits vérifie

$$\prod_{i=n}^{N} a_i b_i = \prod_{i=n}^{N} a_i \prod_{i=n}^{N} b_i.$$
 (V.24)

V.6 Racine carrée et puissance d'un nombre

Définition V.1

La racine carrée d'un réel a positif est l'unique réel positif, noté \sqrt{a} tel que

$$(\sqrt{a})^2 = a. (V.25)$$

Ci-dessous nous énumérons quelques propriétés liées à la racine carrée

1 Si $a \in \mathbb{R}_+$ et $b \in \mathbb{R}_+$,

$$\sqrt{ab} = \sqrt{a}\sqrt{b}.\tag{V.26}$$

2 Si $a \in \mathbb{R}_+$ et $b \in \mathbb{R}_+^*$,

$$\sqrt{\frac{a}{b}} = \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{b}}.\tag{V.27}$$

3 Si $a \in \mathbb{R}$,

$$\sqrt{a^2} = |a| = \begin{cases} a & (a \ge 0) \\ -a & (a \le 0) \end{cases}$$
 (V.28)

La valeur absolue |a| est souvent utilisée en sciences pour dire que deux réels a et -a sont égaux au signe près : on peut dire qu'ils sont « égaux en valeur absolue ».

4 Si r et s sont des entiers naturels non nuls, et a et b sont deux réels, nous avons trois propriétés :

4.1 Le produit et le quotient de deux puissances d'une même base

$$a^r a^s = a^{r+s}, \qquad \frac{a^r}{a^s} = a^{r-s} \quad (a \neq 0),$$
 (V.29)

qui permet par exemple de déduire

$$1 = \frac{a^r}{a^r} = a^{r-r} = a^0. (V.30)$$

4.2 La puissance d'une puissance et la puissance d'un quotient

$$(a^r)^s = a^{rs}, \qquad \left(\frac{a}{b}\right)^r = \frac{a^r}{b^r} \quad (b \neq 0), \tag{V.31}$$

4.3 Le produit de deux puissances de même exposant

$$a^r b^r = (ab)^r \,. \tag{V.32}$$

Remarque V.3

Attention:

$$\left(\frac{3}{4}\right)^2 = \frac{3^2}{4^2} \neq \frac{3}{4} \tag{V.33}$$

De la même manière,

$$-a^r \neq (-a)^r \tag{V.34}$$

à part dans le cas de la puissance $p^{\text{ième}}$ impaire $(p=2n+1 \text{ avec } n \in \mathbb{N})$ d'un nombre négatif -a:

$$(-a)^p = (-1)^{2n+1}a^p = (-1)^{2n}(-1)a^p = \left((-1)^2\right)^n(-1)a^p = -a^p.$$
 (V.35)

comme par exemple $(-3)^3 = -27 = -(3^3)$.

Nous voudrions conclure cette section en mentionnant le fait que des puissances d'entiers relatifs (10², 10⁻⁴, etc.) sont régulièrement utilisées en sciences pour une notation scientifique.

IDENTITÉS, (IN)ÉQUATIONS

VI.1 Les produits remarquables

Il peut parfois être utile de transformer une somme de termes en produit de facteurs. Plusieurs produits remarquables sont connus, et très régulièrement utilisés.

Pour tous a et b réels, on a :

— le carré d'une somme

$$(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2; (VI.1)$$

$$(a-b)^2 = a^2 - 2ab + b^2 (VI.2)$$

qui dans le cas de la **factorisation** ¹ se lira de droite à gauche;

— la différence de carrés

$$a^{2} - b^{2} = (a+b)(a-b);$$
 (VI.3)

— le cube d'une somme

$$(a+b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3; (VI.4)$$

— la différence de cubes

$$a^3 - b^3 = (a - b)(a^2 + ab + b^2),$$
 (VI.5)

— la puissance quelconque d'une somme de deux termes

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^n C_n^k a^k b^{n-k},$$
 (VI.6)

où les ${\cal C}_n^k$ sont les coefficients binomiaux donnés par

$$C_n^k = \frac{n!}{(n-k)!k!}.$$

VI.2 Les (in)équations

Nous aimerions dans cette section non seulement revenir sur quelques propriétés de l'équation, mais étendre cette discussion aux inéquations. À travers cette section nous continuerons à mettre en évidence certains raccourcis dangereux dans la manipulation d'(in)équations.

VI.2.1 Les équations

Considérons des égalités entre des expressions mathématiques. La résolution d'une équation (une égalité entre deux expressions, comportant une ou plusieurs **variables**), consiste alors en la détermination des valeurs de la ou des variable(s) qui vérifient celle-ci. L'équation est vérifiée si l'égalité des deux expressions, appelées membres de l'équation, est vraie pour de telles valeurs 2 . Pour commencer, souvenons-nous de quelques règles élémentaires régissant la transformation d'une équation à une inconnue réelle x:

^{1.} Opération consistant en la réécriture d'une expression sous la forme d'un produit.

^{2.} Si l'égalité est vérifiée quelle que soit la valeur attribuée à la ou aux variables qu'elle comporte, on parle alors d'**identité**. Par exemple, les produits remarquables mentionnés plus hauts ont été écrits sous forme d'*identités remarquables*.

1. Simplifier des termes : soient a et b deux réels,

$$(x+a=b+a) \Longleftrightarrow (x=b). \tag{VI.7}$$

2. Simplifier des facteurs : soient a et b deux réels (a non nul),

$$(xa = ba) \iff (x = b)$$
. (VI.8)

3. Isoler un des termes : prenons l'équation

$$x + a = b (VI.9)$$

où a et b sont des réels et le réel x est l'inconnue. Une manière très courante d'envisager l'isolement de l'inconnue x est de se figurer que l'on « envoie » a de l'autre côté de l'égalité en lui affectant le signe « - ». Ce raisonnement peut facilement mener à des erreurs calculatoires, et nous lui préférons le raisonnement suivant : « Nous retranchons le même nombre a dans les deux membres de l'équation »

$$x + a - a = b - a \tag{VI.10}$$

que l'on peut d'ailleurs écrire

$$x = b - a = -a + b \tag{VI.11}$$

où l'on aura appris à traiter -a comme un nombre en tant que tel, ce qui nous fait écrire

$$x = b + (-a),$$

c'est-à-dire, sachant que l'addition de deux nombres est commutative (m+n=n+m),

$$x = (-a) + b = -a + b.$$

Prenons maintenant un autre cas de figure et isolons x dans ax = b avec a et b deux réels (a non nul) :

$$\left(\frac{ax}{a} = \frac{b}{a}\right) \Longleftrightarrow \left(x = \frac{b}{a}\right) \tag{VI.12}$$

Dans ce cas-là, le raisonnement n'aura pas été de se dire « Je prends a que je fais passer de l'autre côté en divisant au lieu de multiplier », mais bien « Je multiplie les deux membres de l'équation par l'inverse de a ».

Combinons : soient a, b et c deux réels (a non nul). Nous pouvons alors isoler la variable réelle x dans ax + c = b

$$(ax + c = b) \iff \left(x = \frac{b - c}{a}\right)$$
 (VI.13)

en combinant les deux méthodes d'isolement précédentes, qui peuvent se faire dans n'importe quel ordre, pourvu que l'égalité soit préservée : on peut indifféremment diviser le membre de gauche et celui de droite par a puis retrancher c/a de part et d'autre de l'égalité, ou commencer par retrancher c à gauche et à droite, puis diviser le résultat pour chaque membre par a.

Nous aimerions rappeler ici trois manipulations d'expression ou d'égalité, très simples, que l'on rencontre souvent lorsqu'il s'agit d'isoler une inconnue dans une équation. La première est la **mise au même dénominateur** :

Prenons l'expression

$$a+\frac{b}{c}$$

où a, b et c sont des réels (c non nul). Nous pouvons mettre les deux termes de cette somme au même dénominateur en multipliant a par c/c:

$$a\frac{c}{c} + \frac{b}{c} = \frac{ac + b}{c}.$$

La deuxième manipulation est la **mise en évidence**. Prenons la somme suivante (a, b et c sont des réels):

Nous constatons que les deux termes de cette somme sont le produit d'un même réel a par le réel b dans le premier terme et le réel c dans le second terme. Le facteur commun, a, peut donc être mis en évidence :

$$ab + ac = a(b+c).$$

Il est également possible de revenir de la forme **factorisée** (membre de droite dans l'égalité ci-dessus, ainsi nommée car nous avons le produit de deux facteurs au lieu de la somme de deux termes) à la forme éclatée de l'expression (membre de gauche ci-dessus) en réalisant une **distribution**.

Finalement, citons le classique **produit en croix** : soient a, b, c et d quatre réels (b et d non nuls). Alors,

$$\left(\frac{a}{b} = \frac{c}{d}\right) \iff (ad = bc).$$
 (VI.14)

Erreurs courantes

Voici des erreurs très fréquentes rencontrées chez les étudiants de début de licence lors de la simplification d'équations, ou l'isolement d'une variable a . Ces erreurs sont de plusieurs types :

1. Confusion des propriétés d'un terme et celles d'un facteur

Exemple 1:
$$(x + a = ya) \iff (x = y)$$

Exemple 2:
$$(x+a=b) \iff \left(x=\frac{b}{a}\right)$$

2. Manipulation d'un terme en lui attribuant également les propriétés d'un facteur

$$\left(ax^2 + \frac{y^3}{4} = 5\sqrt{x}\right) \iff \left(ax^2 - 5\sqrt{x} = -\frac{4}{y^3}\right)$$

3. Confusion : dénominateur d'un terme et dénominateur d'un membre

$$\left(\frac{1}{a} + b = x\right) \iff (1 + b = ax)$$

4. Erreur de distribution

Exemple 1:
$$(a(b-c)=d) \iff (ab=d+c)$$

Exemple 2:
$$(a(b-c)=d) \iff \left(-c=\frac{d}{ab}\right)$$

5. Confusion entre facteur d'un terme et facteur de tout un membre

$$(ax + c = b) \iff \left(x = \frac{b}{a} - c\right)$$

VI.2.2 Systèmes d'équations linéaires

Le système de deux équations à deux inconnues suivant

$$\begin{cases} ax + by = c \\ a'x + b'y = c' \end{cases}$$
 (VI.15)

représente l'intersection de deux droites du plan d'équations respectives ax + by = c et a'x + b'y = c'. On appelle déterminant de ce système, la quantité

$$\Delta = ab' - ba' \tag{VI.16}$$

On peut démontrer les propriétés suivantes :

a. Comme précédemment, nous dirons que les propositions listées ci-dessous seraient fausses en général.

- Si $\Delta \neq 0$, la solution du système (VI.15) est *unique*. Ceci correspond à l'intersection de deux droites qui ne sont pas parallèles.
- Si $\Delta = 0$, deux cas sont possibles :
 - Si les deux équations du système sont équivalentes, il y a une *infinité* de solutions. Cela correspond à deux droites confondues (qui se coupent donc selon la droite elle-même).
 - Si les deux équations du système ne sont pas équivalentes, il n'y a *aucune* solution. Cela correspond à deux droites parallèles distinctes (qui n'ont donc pas d'intersection).

Nous rappelons ici deux des méthodes de résolution des systèmes d'équations linéaires : la méthode de substitution et celle de combinaison linéaire qui permettent de traiter tous les systèmes de n équations à n inconnues. D'autres méthodes existent mais sortent du cadre de cet enseignement. Pour plus de clarté nous traitons ces méthodes sur un même exemple concret.

VI.2.2.A Substitution

Soit

$$\begin{cases} x+y = 3\\ 2x-y = 0 \end{cases}$$
 (VI.17)

La méthode de substitution consiste à résoudre la première équation pour une variable (x par exemple) en fonction de l'autre variable (y dans notre cas) puis à substituer le résultat dans la deuxième équation. On obtient ainsi une équation pour y qui se résout facilement et dont la solution permet de calculer x, ce qui donne la solution du système. Dans notre exemple, commençons par calculer le déterminant : $\Delta = 1 \times (-1) - 2 \times 1 = -3 \neq 0$. Il y a donc une unique solution à ce système. Comme x + y = 3, on obtient x = 3 - y qu'on substitue dans la deuxième équation. On trouve alors 6 - 3y = 0 d'où y = 2. Or x = 3 - y. Donc x = 1. La solution de (VI.17) est donc (x, y) = (1, 2).

Cette méthode marche aussi pour des sytèmes de 3 équations à 3 inconnues ou plus. Il suffit de résoudre la première équation pour l'une des variables en fonction des autres puis de reporter le résultat dans la deuxième. On résout ensuite la deuxième équation pour une autre variable en fonction des restantes et on reporte le premier et le deuxième résultat dans la troisième et ainsi de suite jusqu'à obtenir une équation ne contenant qu'une variable qui, une fois résolue permet d'obtenir la solution du système.

VI.2.2.B Combinaison linéaire

On résout de nouveau (VI.17) mais cette fois-ci en utilisant la méthode de combinaison linéaire. Dans ce cas, on cherche à éliminer une variable de l'une des équations en les combinant. Appelons L_1 la permière équation de (VI.17) et L_2 , la deuxième. Alors, on conserve L_1 et, pour éliminer y par exemple, on remplace L_2 par $L'_2 = L_1 + L_2$. On obtient ainsi le système équivalent suivant :

$$\begin{cases}
L_1: & x+y = 3 \\
L'_2: & 3x = 3
\end{cases}$$
(VI.18)

Evidemment, L'_2 donne x=1 et, du coup, L_1 permet de trouver y=2. On retrouve donc bien la solution obtenue par substitution.

Cette méthode s'étend aussi aux systèmes de 3 équations à 3 inconnues ou plus. Pour un système de 3 équations à 3 inconnues par exemple, on peut garder L_1 et effectuer une combinaison linéaire de L_1 et L_2 pour obtenir une équation L'_2 dans laquelle une des variables, par exemple x, est éliminée. De même, en combinant L_1 et L_3 , on obtient une équation L'_3 dans laquelle la même variable est éliminée (x, ici). Ainsi, L'_2 et L'_3 ne contiennent plus que deux variables (y et z) et constituent donc un système de 2 équations à 2 inconnues dont on sait déjà trouver la solution! Quand cette solution est obtenue, on résout L_1 pour la variable restante.

VI.2.3 Les inéquations

Contrairement à ce que peut inspirer cette terminologie, les inéquations constituent une sorte d'inégalités pouvant ne pas être strictes : lorsque deux expressions sont séparées par \leq ou \geq , cela n'exclut évidemment pas l'égalité entre les deux expressions, contrairement aux inégalités dites « strictes », où deux expressions sont comparées par un symbole > ou <.

Nous aimerions rappeler ici quelques propriétés des inéquations, utiles pour établir une comparaison au cours de la résolution d'un exercice par exemple. Ainsi que précédemment, nous considérerons ici la différence

comme l'addition de l'opposé, et la division comme la multiplication par l'inverse.

Remarque VI.1

Les quatre règles que nous allons énoncer ci-dessous sont illustrées pour les inégalités du type « A est plus grand que B », mais ces règles sont généralisables aux quatre types de relation (<, >, ainsi que \le et \ge).

1. Invariance de sens par addition : pour tout w réel,

$$(x > y) \iff (x + w > y + w)$$
 (VI.19)

2. Invariance de sens par multiplication par un nombre strictement positif : pour tout w réel strictement positif,

$$(x > y) \iff (wx > wy)$$
 (VI.20)

3. Inversion de sens par multiplication par un nombre strictement négatif : pour tout w réel strictement négatif,

$$(x > y) \iff (wx < wy)$$
 (VI.21)

4. Transitivité de l'inégalité : on peut également utiliser deux inégalités de même type (un des quatre types d'inégalité mentionnés dans la remarque ci-dessus) pour tirer une conclusion sous la forme d'une troisième inégalité du même type que les deux autres

$$\left. \begin{array}{cc} y & > x \\ x & > z \end{array} \right\} \implies (y > x > z) \implies (y > z).$$
 (VI.22)

De manière générale, on parle de **transitivité** lorsque plusieurs relations font intervenir des objets mathématiques liés de manière consécutive, donnant lieu à la formulation d'une conclusion liant le premier et le dernier élément de la chaîne. Nous retrouverons dans d'autres chapitres cette notion de transitivité, par exemple dans la relation de Chasles en calcul vectoriel (Cf. chapitre VII) et en calcul intégral (Cf. chapitre IX).

Remarque VI.2

Nous voudrions attirer l'attention du lecteur sur le danger de raccourcis empiriques liés aux inégalités, très courants mais manquant de généralité, tel que la proposition incomplète ^a

$$(x < y) \Longrightarrow (-x < y)$$

découlant du constat, par exemple, que si 3 est inférieur à 5, -3 lui est a fortiori également inférieur, ce qui n'est évidemment pas toujours vrai (un contre-exemple très simple est celui où x = -5 et y = 2).

Chapitre VII

GÉOMÉTRIE ET CALCUL VECTORIEL

Nous reprenons dans ce chapitre les informations classiques et souvent très utiles liées aux formes géométriques couramment rencontrées en sciences, et nous posons les bases de l'utilisation des vecteurs, sachant que bon nombre de grandeurs (position, vitesse, force, etc.) exposées dans les parties suivantes de cet ouvrage sont des grandeurs vectorielles.

a. Pour la compléter, il faut préciser que cette implication est vraie pour un couple de nombres x et y avec x positif ou nul et y strictement positif.

VII.1 Les angles géométriques

La donnée de deux demi-droites [OA) et [OB), de même origine O, découpe le plan en deux parties, nommées secteurs angulaires. Ce découpage est illustré figure VII.1.

Considérons un cercle \mathcal{C} de rayon R centré en O. Ce cercle intercepte les deux demi-droites [OA) et [OB) aux points A' et B'.

Dans ces conditions, la mesure de l'amplitude géométrique de l'angle de chaque secteur angulaire (α et β à la figure VII.1) s'obtient comme le rapport entre la longueur de l'arc de cercle contenu dans ce secteur (l_{α} et l_{β} figure VII.1) et le rayon du cercle :

$$\alpha = \frac{l_{\alpha}}{R}, \quad \beta = \frac{l_{\beta}}{R}.$$
 (VII.1)

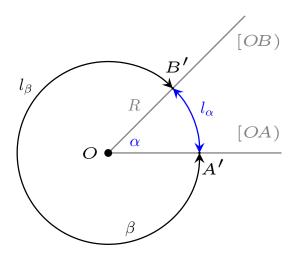


FIGURE VII.1 – Illustration de la définition d'un angle plan.

Cette mesure s'exprime en radian, ce qui nous amène à la définition de ce qu'est le radian 1:

Définition VII.1

Un **radian** est la mesure de l'amplitude géométrique d'un angle au centre, cet angle étant sous-tendu par un arc dont la longueur est égale au rayon du cercle.

On comprend dès lors, étant donné que le périmètre d'un cercle C de rayon R est $p_C = 2\pi R$, que la mesure de l'amplitude géométrique d'un angle de 360° est de 2π radian. Ce résultat permet de déduire simplement que la mesure de l'amplitude géométrique d'un **angle plat** (180°) est de π radian, et que celle d'un **angle droit** (90°) est de $\pi/2$ radian. Cette équivalence est donnée dans le tableau VII.1 pour quelques angles remarquables 2 .

Mesure (°)	Mesure (radian)	Mesure (°)	Mesure (radian)
360	2π	180	π
90	$\pi/2$	60	$\pi/3$
45	$\pi/4$	30	$\pi/6$

Tableau VII.1 – Six mesures (en degrés et en radian) de l'amplitude géométrique d'angles, couramment rencontrées en géométrie et en sciences.

^{1.} Cette définition fait appel à celle d'un **angle au centre**, soit un angle formé par deux rayons d'un cercle ou par deux demi-droites sécantes ayant la même origine, cette origine étant à la fois le sommet de l'angle et le centre du cercle.

^{2.} Nous donnons ici ces quelques mesures d'amplitude géométrique d'angles également en degrés car, bien que ce soit le radian qui soit le plus couramment utilisé en mathématiques, les degrés sont quant à eux très utilisés en sciences naturelles.

VII.2 Propriétés de formes géométriques élémentaires

Nous réviserons prioritairement les caractéristiques de formes manipulées régulièrement notamment en physique, et dont la bonne maîtrise permet de développer un sens de la visualisation qui se révèle souvent très bénéfique lors du contact avec un problème physique concret.

VII.2.1 Le cercle, la sphère

Le cercle et la sphère sont des objets géométriques fondamentaux, « centraux » en physique. Il s'agit, respectivement dans deux et trois dimensions de l'espace, du **lieu** (l'ensemble) des points équidistants à un point nommé **centre**. La distance entre le centre et tout point du cercle ou de la sphère se nomme le **rayon**, et a donc les dimensions d'une longueur. Nous nous contenterons de rappeler le **périmètre** p_C et la **surface** S_C d'un cercle C de rayon R:

$$p_C = 2\pi R, \qquad S_C = \pi R^2 \tag{VII.2}$$

Nous rapporterons également la surface S_S et le volume V_S d'une sphère S de rayon R:

$$S_S = 4\pi R^2, \qquad V_S = \frac{4}{3}\pi R^3.$$
 (VII.3)

VII.2.2 Les triangles

Soit un triangle ABC quelconque, aux côtés de longueur a, b et c tel que celui représenté figure VII.2. Son périmètre p_t et son aire S_t s'expriment comme

$$p_t = a + b + c, S_t = \frac{bh}{2} (VII.4)$$

où b est la longueur d'une **base** et h la longueur de la **hauteur** correspondante. Chaque côté peut être choisi comme base. La hauteur qui lui correspond est la droite qui lui est perpendiculaire et qui passe par le sommet qui lui est opposé (voir bas de la figure VII.3). Sa mesure (h ci-dessus), est la longueur du segment de hauteur joignant le sommet au côté. Si la hauteur rejoint le prolongement d'un côté du triangle hors de celui-ci (en-bas à droite de la figure VII.3), la longueur utilisée pour calculer la surface du triangle reste celle du côté sans prendre en compte son prolongement, soit la longueur AC sur la figure VII.3.

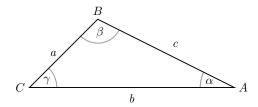


FIGURE VII.2 – Mesures dans le triangle quelconque.

Proposition VII.1

La somme des mesures de l'amplitude géométrique des angles d'un triangle est égale à π radian.

Médiane, médiatrice, bissectrice

Outre la hauteur, d'autres objets géométriques remarquables sont également identifiables :

Définition VII.2

La **médiane**, ce segment de droite partant d'un sommet du triangle et rejoignant le milieu du côté faisant face à ce sommet. Elle est représentée à la figure VII.3. Tout comme la hauteur, nous en avons trois par triangle.

Définition VII.3

La **médiatrice** d'un côté du triangle (et plus généralement la médiatrice d'un segment de droite) est le lieu des points équidistants des extrémités de ce côté (ou du segment de droite considéré si l'on parle de manière générale). On voit que la médiatrice est donc une droite orthogonale (perpendiculaire) au segment de droite en question, et que l'intersection entre la médiatrice et le segment se produit au milieu de celui-ci. La médiatrice est également représentée à la figure VII.3.

Définition VII.4

Une **bissectrice** (voir figure VII.3) est une demi-droite issue du sommet d'un secteur angulaire et coupant ce dernier en deux secteurs angulaires dont la mesure de l'amplitude géométrique des angles est égale.

Dans un triangle **isocèle**, c'est-à-dire un triangle ayant deux côtés de même longueur ou, de manière équivalente, deux angles de même mesure, la médiatrice caractéristique du troisième côté est également une médiane et une hauteur du triangle, ainsi que la bissectrice d'un des angles du triangle. Il en va de même pour n'importe laquelle des trois médiatrices d'un triangle **équilatéral** (trois côtés de même longueur et trois angles de même amplitude).

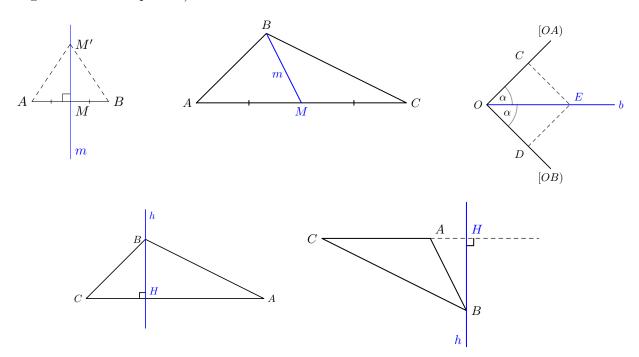


FIGURE VII.3 – Droites, demi-droites et segments de droites remarquables : la médiatrice (en-haut à gauche), la médiane (en-haut au milieu), la bissectrice (en-haut à droite), et deux sortes de hauteur (en-bas).

Nous pouvons également définir plusieurs points importants dans un triangle :

- L'orthocentre, qui est le point de rencontre des hauteurs;
- Le **centre de gravité**, qui est le point de rencontre des médianes;
- Les médiatrices se croisent quant à elles en un point définissant le **centre du cercle circonscrit au triangle** (cercle dans lequel le triangle est inscrit, et qui passe par les trois sommets de celui-ci);
- les bissectrices se rencontrent en un point définissant le **centre du cercle inscrit dans le triangle** (celui que l'on peut tracer à l'intérieur du triangle et qui « touche » ce triangle en trois points, un par côté).

Triangles rectangles et trigonométrie

Définition VII.5

Un triangle est **rectangle** s'il possède un angle droit (figure VII.4). Dans un tel triangle, cet angle droit fait face à ce que l'on appelle l'**hypothénuse**, c'est-à-dire le côté d'un triangle rectangle dont la longueur est la plus grande.

Afin d'introduire la trigonométrie du triangle rectangle, considérons un triangle ABC, rectangle en A. Notons :

- a la longueur du côté faisant face au sommet A de mesure $\alpha = \pi/2$;
- b la longueur du côté faisant face au sommet B de mesure β ;
- c la longueur du côté faisant face au sommet C de mesure γ .

Nous pouvons définir trois nombres trigonométriques, le **sinus** (sin), le **cosinus** (cos) et la **tangente** (tan), relatifs aux mesures de l'amplitude géométrique des deux angles qui ne sont pas droits dans ABC:

$$\sin \beta = \frac{b}{a}, \qquad \cos \beta = \frac{c}{a}, \qquad \tan \beta = \frac{b}{c} = \frac{\sin \beta}{\cos \beta},$$

et

$$\sin \gamma = \frac{c}{a}, \qquad \cos \gamma = \frac{b}{a}, \qquad \tan \gamma = \frac{c}{b} = \frac{\sin \gamma}{\cos \gamma}.$$

De manière générale, pour tout autre angle que l'angle droit dans un triangle rectangle,

Définition VII.6

Le sinus de la mesure de l'amplitude géométrique de cet angle s'obtient en divisant la longueur du côté opposé à celui-ci par la longueur de l'hypothénuse.

Définition VII.7

Le **cosinus** de la mesure de l'amplitude géométrique de cet angle s'obtient en divisant la longueur du côté qui lui est **adjacent** (autre que l'hypothénuse) par la longueur de l'**hypothénuse**.

Définition VII.8

La **tangente** de la mesure de l'amplitude géométrique de cet angle s'obtient en divisant le **sinus** de cette mesure par son **cosinus**.

Définition VII.9

La **cotangente** de la mesure de l'amplitude géométrique de cet angle s'obtient en divisant le **cosinus** de cette mesure par son **sinus**.

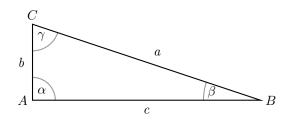


FIGURE VII.4 – Mesures dans un triangle rectangle en A.

Théorème VII.1

(Pythagore) Dans un triangle rectangle, le carré de la longueur de l'hypoténuse est égal à la somme des carrés des longueurs des deux autres côtés.

Pour un triangle ABC rectangle en A, cela s'écrit

$$BC^2 = AB^2 + AC^2. (VII.5)$$

Triangles quelconques et trigonométrie

Nous pouvons également utiliser la trigonométrie pour déduire des propriétés de triangles quelconques : soit A (respectivement B et C) le sommet d'un triangle quelconque ayant α (respectivement β et γ) pour mesure d'amplitude géométrique d'angle et faisant face au côté de longueur a (respectivement b et c). Ce triangle est représenté à la figure VII.2. Alors,

$$\frac{a}{\sin \alpha} = \frac{b}{\sin \beta} = \frac{c}{\sin \gamma}.$$
 (VII.6)

On trouve également (théorème d'Al-Kashi, aussi appelé théorème de Pythagore généralisé)

$$a^2 = b^2 + c^2 + 2bc \cos \alpha$$
, $b^2 = a^2 + c^2 + 2ac \cos \beta$, $c^2 = a^2 + b^2 + 2ab \cos \gamma$. (VII.7)

Finalement, on trouve que l'aire S_t du triangle s'écrit comme

$$S_t = \frac{ab \sin \gamma}{2} = \frac{bc \sin \alpha}{2} = \frac{ac \sin \beta}{2}.$$
 (VII.8)

VII.2.3 Les quadrilatères convexes

Après les polygones à trois côtés, nous passons maintenant aux polygones à quatre côtés. Une nouvelle notion intervient dès que le nombre de côtés atteint ou dépasse quatre : la **convexité**.

Définition VII.10

Un quadrilatère est **convexe** si pour tout choix de côté, ce quadrilatère est entièrement inclus dans le même demi-plan délimité par le côté choisi.

Parmi les quadrilatères convexes, nous trouvons les trapèzes (deux des quatre côtés sont parallèles), les parallélogrammes (les côtés sont parallèles deux à deux), les losanges (les côtés sont parallèles deux à deux et tous les côtés sont de même longueur), les rectangles (côtés parallèles deux à deux, et tous les côtés sont à angle droit de leurs voisins), et un cas particulier de rectangle qu'est le carré (côtés parallèles deux à deux, tous les côtés sont à angle droit de leurs voisins, et tous les côtés sont de même longueur). Tous ces quadrilatères ont leurs caractéristiques résumées dans le tableau VII.2 et sont représentés, avec le tracé d'au moins une hauteur (sauf pour le rectangle et le carré dont les hauteurs sont les côtés), à la figure VII.5.

Nom	Propriétés	Aire
Parallélogramme	Côtés parallèles deux à deux	S = bh
Rectangle	Quatre angles droits	S = ab
Carré	Quatre angles droits et quatre côtés de même longueurs	$S = a^2$
Losange	Quatre côtés de même longueur	$S = \frac{lh}{2}$
Trapèze	Deux côtés parallèles	$S = \frac{(a+b)h}{2}$

Tableau VII.2 – Caractéristiques de quadrilatères remarquables.

Proposition VII.10

La somme des mesures de l'amplitude géométrique des angles d'un quadrilatère convexe est égale à 2π radian.

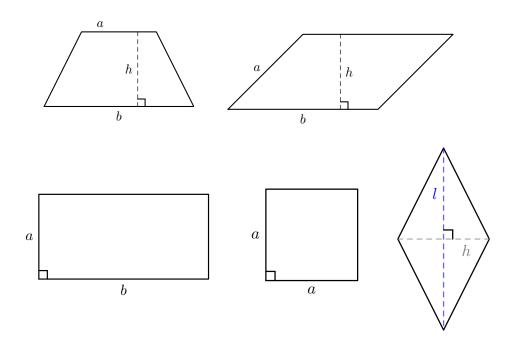


FIGURE VII.5 – Quadrilatères remarquables. En-haut : le trapèze (gauche) et le parallélogramme (droite). En-bas, de gauche à droite : le rectangle, le carré et le losange.

VII.2.4 Les polygones réguliers convexes

Nous avons déjà observé qu'un triangle pouvait être équilatéral (trois côtés de même longueur) et qu'un rectangle pouvait être carré (longueur et largeur identiques). Il est possible de généraliser l'existence de telles formes géométriques à n côtés de même longueur a: les polygones réguliers 3 convexes 4 . Après le triangle équilatéral (trois côtés) et le carré (quatre côtés), nous aurons donc le **pentagone** régulier (cinq côtés), l'**hexagone** régulier (six côtés), etc.

Remarque VII.1

On rappellera à cette occasion les préfixes grecs mono, di, tri, tetra, penta, hexa, hepta, octo, nona, deca, undeca, dodeca qui permettent, entre autres choses, de dénombrer les côtés d'un polygone, régulier ou non.

En plus du triangle équilatéral et du carré, nous avons représenté deux polygones réguliers couramment utilisés en sciences (notamment en chimie) figure VII.6 : le pentagone régulier et l'hexagone régulier.

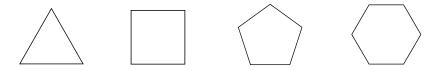


FIGURE VII.6 – Principaux polygones réguliers. De gauche à droite : le triangle équilatéral, le carré, le pentagone régulier et l'hexagone régulier.

On retiendra la mesure de l'égale amplitude de chacun des trois (triangle équilatéral), quatre (carré), cinq (pentagone régulier) ou six (hexagone régulier) angles au centre, à savoir respectivement 120° , 90° , 72° et 60° , ainsi que la mesure des angles formés par chaque paire de côtés adjacents dans ces quatre objets géométriques, à savoir respectivement 60° , 90° , 108° et 120° .

VII.2.5 Les polyèdres réguliers convexes

Si l'on passe de deux à trois dimensions, nous ne parlerons plus de poly**gones** (plusieurs côtés) mais de poly**èdres** (plusieurs faces). Les polyèdres réguliers sont donc des objets géométriques à *n* faces identiques.

^{3.} Notez que tout comme il existe des triangles autres qu'équilatéraux, un polygone à plus de trois côtés peut tout à fait être irrégulier.

^{4.} La définition est identique à celle donnée pour un quadrilatère.

Chacune de ces faces est un polygone régulier, et chaque sommet est le résultat de la convergence du même nombre d'arêtes. On étend aussi la définition de convexité aux polyèdres : il est **convexe** si pour tout choix de face, les autres faces du polyèdre sont situées dans le même demi-espace délimité par la face choisie. Les plus régulièrement utilisés sont les tétraèdres (pyramides, quatre triangles équilatéraux), hexaèdres (cubes, six carrés) et octaèdres (huit triangles équilatéraux), illustrés figure VII.7.

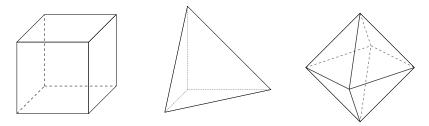


FIGURE VII.7 – Principaux polyèdres réguliers convexes. De gauche à droite : le cube, le tétraèdre régulier et l'octaèdre régulier.

VII.3 Introduction au calcul vectoriel

VII.3.1 Les coordonnées dans le plan

Soit un **repère** du plan, que nous noterons (O; x, y), avec les directions Ox et Oy perpendiculaires 5 (tous les angles à l'intersection des axes Ox et Oy ont une mesure de 90°). Les axes Ox et Oy sont conventionnellement orientés de gauche à droite pour les x croissants et de bas en haut pour les y croissants, ce qui est rappelé graphiquement par une flèche figure VII.8.

Nous pouvons, à tout point A dans ce plan, attribuer des **coordonnées cartésiennes**, x_A selon x et y_A selon y. Le repérage de A par ses coordonnées (x_A, y_A) dans le repère (O; x, y) est représenté à la figure VII.8. Sur cette figure, on voit que la longueur du segment de droite gris et parallèle à Ox (respectivement, à Oy) correspond à la mesure de la coordonnée x_A (respectivement, y_A). Si l'échelle (la graduation) du repère est identique selon l'axe Ox et l'axe Oy, le repère est dit **orthonormé**, et on dira que la **longueur de la projection** du point A dans la direction Ox est égale à x_A , et similairement pour y_A .

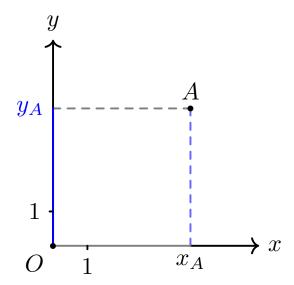


FIGURE VII.8 – Coordonnées dans le plan.

Nous avons mentionné que les vecteurs sont très fréquemment utilisés, notamment en physique. Revenons sur la définition même de ce qu'est un vecteur, en commençant par traiter le cas d'un vecteur dans le plan (deux dimensions) avant de finir avec les vecteurs définis dans l'espace (trois dimensions). Ces outils sont

^{5.} La perpendicularité des directions Ox et Oy relève d'un choix arbitraire, conférant à ce repère des propriétés intéressantes pour la suite de notre développement.

généralisables à plus de trois dimensions, mais leur représentation est plus complexe, et dépasse le cadre de cet ouvrage.

VII.3.2 Les vecteurs dans le plan

Nous avons vu comment il était possible de définir les coordonnées (x_A, y_A) d'un point A dans un repère (O; x, y) à deux dimensions. Nous pouvons maintenant définir un vecteur $\stackrel{6}{AB}$ allant de A jusqu'à un autre point, B, de coordonnées (x_B, y_B) .

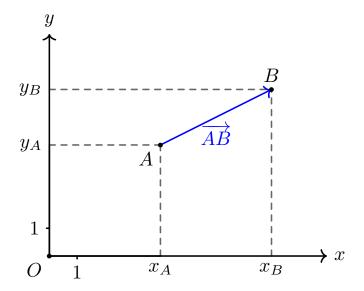


FIGURE VII.9 – Représentation d'un vecteur dans le plan.

Nous voyons que ce vecteur a une **origine** (A), une **direction** (la direction AB), un **sens** (le vecteur va de A vers B), et une **longueur**, toujours positive ou nulle : sa **norme**.

Le sens et la direction sont deux choses différentes : parler de l'axe nord-sud ou dire que l'on va du sud vers le nord, c'est parler respectivement de la direction et du sens.

Rien ne nous empêche de renommer le vecteur \overrightarrow{AB} en vecteur \overrightarrow{v} , ou en utilisant n'importe quelle lettre de n'importe quel alphabet d'ailleurs.

Tout comme nous attribuions des coordonnées aux points A et B, nous pouvons attribuer des coordonnées, ou **composantes**, au vecteur \overrightarrow{v} : sa composante selon Ox sera $x_B - x_A$, et sa composante selon Oy sera $y_B - y_A$. On remarque que nous prenons à chaque fois la coordonnée du point d'arrivée, à laquelle nous retranchons la coordonnée du point de départ :

$$\overrightarrow{v} = \begin{pmatrix} x_B - x_A \\ y_B - y_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}.$$

Notons que changer de repère lorsque l'on décrit un vecteur implique une modification des composantes de ce vecteur. Cela est également vrai pour les coordonnées d'un point.

Nous voyons également qu'une telle définition d'un vecteur implique qu'un autre vecteur, d'origine C et de point d'arrivée D, parallèle au premier, et de même norme que \overrightarrow{v} sera tout simplement égal à \overrightarrow{v} (voir figure VII.10) puisqu'il aura les mêmes composantes.

Si le deuxième vecteur n'allait pas de C vers D mais de D vers C, nous verrions que les composantes de ce deuxième vecteur seraient simplement l'opposé de celles de \overrightarrow{v} , et nous aurions donc $\overrightarrow{DC} = -\overrightarrow{CD} = -\overrightarrow{v}$. On aura remarqué que permuter l'origine et l'arrivée du vecteur aura eu pour effet d'en prendre l'**opposé**. Ainsi que mentionné plus haut, un vecteur est également défini par sa norme. Celle-ci s'obtient par le théorème de Pythagore et s'écrit comme

$$\left| \left| \overrightarrow{AB} \right| \right| = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2}, \tag{VII.9}$$

^{6.} Certaines références utilisent une flèche au-dessus de cette lettre comme nous; d'autres choisissent d'écrire simplement cette lettre en gras (\mathbf{v}) ; d'autres encore choisissent de combiner les deux (\overrightarrow{v}) . On ne s'étonnera donc pas de trouver l'une ou l'autre de ces conventions dans des livres ou des articles scientifiques.

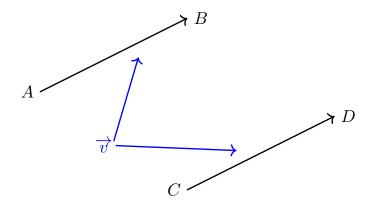


FIGURE VII.10 – Égalité de deux vecteurs dans le plan.

soit, en d'autres termes,

$$||\overrightarrow{v}|| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}.$$
 (VII.10)

Propriétés

Notons immédiatement la définition du vecteur nul : $\overrightarrow{AA} = \overrightarrow{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, et énonçons quelques propriétés des vecteurs :

1 Multiplication par un réel (colinéarité)

$$\forall m \in \mathbb{R}, \ m \overrightarrow{v} = m \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mv_x \\ mv_y \end{pmatrix}. \tag{VII.11}$$

En d'autres termes, si deux vecteurs \overrightarrow{v} et \overrightarrow{w} sont liés entre eux par la multiplication par un scalaire (synonyme d'un nombre réel dans ce contexte), ils sont dits « colinéaires ».

2 Somme de deux vecteurs : soient $\overrightarrow{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix}$ et $\overrightarrow{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$. On a

$$\overrightarrow{u} + \overrightarrow{v} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x + v_x \\ u_y + v_y \end{pmatrix}. \tag{VII.12}$$

La représentation de cette opération est donnée figure VII.11, où l'on voit que l'on peut soit représenter le vecteur \overrightarrow{v} en plaçant son origine sur le point d'arrivée du vecteur \overrightarrow{u} (partie de gauche) ou bien en la faisant coïncider avec celle de \overrightarrow{u} (partie de droite).

— Dans le premier cas, on utilisera la règle de Chasles qui nous dit que

$$\overrightarrow{AB} + \overrightarrow{BC} = \overrightarrow{AC}, \tag{VII.13}$$

de laquelle on peut tirer notamment que

$$\overrightarrow{AB} + \overrightarrow{BA} = \overrightarrow{AA} = \overrightarrow{0}, \qquad (VII.14)$$

ce qui vérifie bien

$$\overrightarrow{AB} + \overrightarrow{BA} = \overrightarrow{AB} - \overrightarrow{AB} = \overrightarrow{0}. \tag{VII.15}$$

— Dans le second cas (partie de droite de la figure VII.11), on construit un parallélogramme dont on prend la grande diagonale pour obtenir $\overrightarrow{u} + \overrightarrow{v}$.

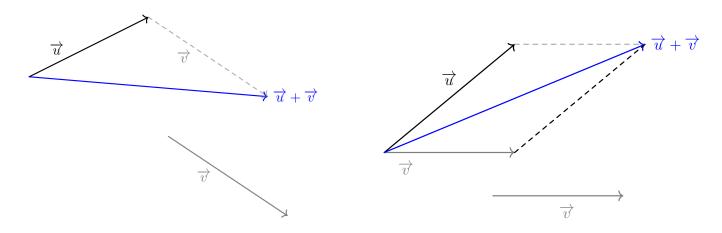


FIGURE VII.11 – Somme de deux vecteurs dans le plan.

3 Mise en évidence : pour tous m et n réels 7,

$$m\overrightarrow{u} + n\overrightarrow{u} = (m+n)\overrightarrow{u}.$$
 (VII.16)

Si l'on écrit deux vecteurs, $\overrightarrow{e_x}$ et $\overrightarrow{e_y}$, orientés selon les directions Ox et Oy respectivement, et ayant tous les deux une norme unitaire (égale à 1), c'est-à-dire

$$\overrightarrow{e_x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 et $\overrightarrow{e_y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$,

il est possible de combiner les propriétés ci-dessus pour écrire n'importe quel vecteur \overrightarrow{v} dans le plan comme

$$\overrightarrow{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \overrightarrow{v_x} + \overrightarrow{v_y} = \begin{pmatrix} v_x \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ v_y \end{pmatrix} = v_x \overrightarrow{e_x} + v_y \overrightarrow{e_y}. \tag{VII.17}$$

Ce faisant, nous avons exprimé le vecteur \overrightarrow{v} « dans la base $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y})$ ». Cela est illustré à la figure VII.12.

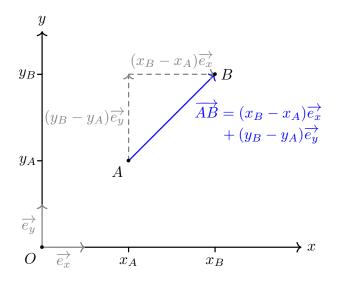


FIGURE VII.12 – Décomposition d'un vecteur dans une base.

Remarque VII.2

Notez bien que l'on aurait très bien pu appeler $\overrightarrow{e_x}$ et $\overrightarrow{e_y}$ autrement, \overrightarrow{i} et \overrightarrow{j} par exemple. L'essentiel est de l'expliciter, d'être clair dans sa nomenclature, et de rester cohérent tout au long d'un développement.

^{7.} On pourrait écrire cette locution : « $\forall (m,n) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \equiv \mathbb{R}^2$ », ce qui signifie « Pour tout couple de nombres réels m et n ».

De ce qui précède, il découle que l'on peut écrire, dans la base $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y})$ et pour tous m et n réels, la somme de deux vecteurs, eux-mêmes multiples des vecteurs \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} :

$$m\overrightarrow{u} + n\overrightarrow{v} = (mu_x + nv_x)\overrightarrow{e_x} + (mu_y + nv_y)\overrightarrow{e_y}.$$
 (VII.18)

Les propriétés algébriques suivantes sont également valables à trois dimensions : quels que soient les vecteurs \vec{u} , \vec{v} et \vec{w} et les réels n et m, nous avons :

- Commutativité : $\vec{u} + \vec{v} = \vec{v} + \vec{u}$.
- Associativité : $(\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w} = \vec{v} + (\vec{u} + \vec{w})$.
- Associativité de la multiplication : $n(m\vec{u}) = (nm)\vec{u}$.
- Distributivité : $(m+n)\vec{u} = m\vec{u} + n\vec{u}$ et $m(\vec{u} + \vec{v}) = m\vec{u} + m\vec{v}$.

VII.3.3 De deux à trois dimensions

Pour passer d'un repère à deux dimensions 8 à un repère à trois dimensions, c'est-à-dire pour passer du calcul vectoriel dans le plan au calcul vectoriel dans l'espace à trois dimensions, il nous suffit simplement d'ajouter une coordonnée supplémentaire dans la définition de nos points, et une composante en plus à nos vecteurs. Par exemple, si x et y représentent la longueur et la largeur d'une forme dans un plan, nous pouvons également en considérer la hauteur, z, hors de ce plan. Notre repère devient donc (O; x, y, z), avec trois directions orthogonales entre elles. Dans ce référentiel, on peut écrire une base $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$. Nous pouvons écrire les coordonnées de tout point M dans l'espace (M_x, M_y, M_z) , et, si l'origine (0,0,0) de notre repère est O, le point M sera repéré par un vecteur \overrightarrow{OM} qui pourra s'écrire

$$\overrightarrow{OM} = M_x \overrightarrow{e_x} + M_y \overrightarrow{e_y} + M_z \overrightarrow{e_z} = (M_x, M_y, M_z). \tag{VII.19}$$

Sa norme sera

$$\left| \left| \overrightarrow{OM} \right| \right| = \sqrt{M_x^2 + M_y^2 + M_z^2}. \tag{VII.20}$$

Pour un vecteur général $\overrightarrow{u} = \overrightarrow{AB}$ dans l'espace tridimensionnel, nous avons

$$\overrightarrow{u} = u_x \overrightarrow{e_x} + u_y \overrightarrow{e_y} + u_z \overrightarrow{e_z} = (x_B - x_A) \overrightarrow{e_x} + (y_B - y_A) \overrightarrow{e_y} + (z_B - z_A) \overrightarrow{e_z}$$
(VII.21)

La norme de ce vecteur sera

$$||\overrightarrow{u}|| = ||\overrightarrow{AB}|| = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2 + (z_B - z_A)^2}$$
 (VII.22)

La somme de deux vecteurs quelconques, multiples de deux vecteurs \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} , s'écrira, pour tous réels m et n,

$$m\overrightarrow{u} + n\overrightarrow{v} = (mu_x + nv_x)\overrightarrow{e_x} + (mu_y + nv_y)\overrightarrow{e_y} + (mu_z + nv_z)\overrightarrow{e_z}.$$
 (VII.23)

Remarque VII.3

Toutes les propriétés des vecteurs définis dans le plan sont transférables aux vecteurs définis dans l'espace.

VII.4 Orientation du plan, cercle trigonométrique et angles orientés

Le plan est conventionnellement orienté par une notion de gauche et de droite et de sens de rotation. Ainsi, on nomme sens trigonométrique, le sens inverse des aiguilles d'une montre (sens anti-horaire).

Munissons le plan d'un repère orienté (O; x, y). Traçons un cercle \mathcal{C} de centre O et de rayon unité. Nous l'appellerons le **cercle trigonométrique**.

Nommons A le point de coordonnées (1, 0). Tout point M de \mathcal{C} définit un angle orienté de mesure α entre le segment [OM] et la demi-droite des abscisses positives : si on se déplace dans le sens anti-horaire de A vers M sur le cercle trigonométrique, cet angle est noté positivement, si on se déplace dans le sens horaire, cet angle est noté négativement. En suivant le sens trigonométrique, la mesure d'un angle croît donc de manière anti-horaire, en passant successivement par les quadrants repérés Q_1, Q_2, Q_3 , puis Q_4 sur la figure VII.13.

Les coordonnées de M dans ce repère seront $(\cos \alpha, \sin \alpha)$.

^{8.} Le nombre de dimensions correspond au nombre de coordonnées grâce auxquelles on peut localiser un point dans cet espace, ce qui correspond également au nombre de composantes de nos vecteurs dans ce qui précède.

Un tour complet fait 360°, ce qui équivaut à 2π radian. Comme précédemment, on peut donc définir le demi-cercle (360°/2 = 180°, $2\pi/2 = \pi$ radian), le quart de cercle (360°/4 = 90°, $2\pi/4 = \pi/2$ radian), etc.

Un autre axe orienté est également défini : l'axe de la tangente (en gris sur la figure VII.13), parallèle à Oy, « tangent » à C en A et passant par un point B de coordonnées (1, -1). Cet axe est orienté de bas en haut, avec la même échelle (graduation) que Oy, ce qui permet de définir $\tan \alpha$, un autre nombre trigonométrique relatif à l'angle orienté de mesure α : soit C le point d'intersection de la droite OM avec la droite AB. Ce point C a pour coordonnées $(1, \tan \alpha)$.

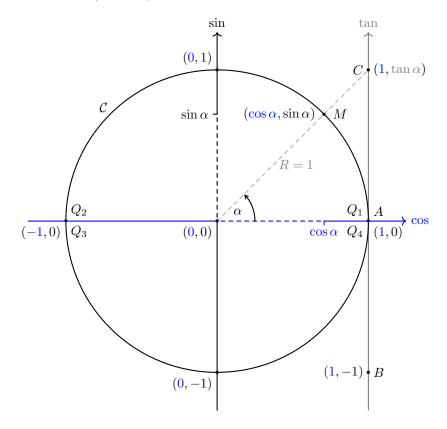


FIGURE VII.13 – Le cercle trigonométrique.

Nous présentons également quelques valeurs remarquables de sin et cos dans l'intervalle $[0, \pi/2]$, soit le premier quadrant (Q_1) , à la figure VII.14.

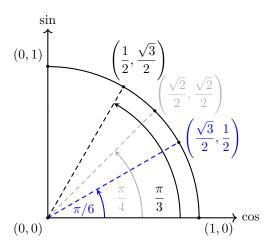


FIGURE VII.14 – Valeurs utiles dans le premier quadrant du cercle trigonométrique.

Nous voyons géométriquement que

$$-1 \le \cos \alpha \le 1, \qquad -1 \le \sin \alpha \le 1$$
 (VII.24)

Par le théorème de Pythagore, on retrouve

$$\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1, \tag{VII.25}$$

et par manipulation simple du théorème de Thalès ⁹, on a

$$\frac{\tan \alpha}{1} = \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha}.$$
 (VII.26)

Ce cercle introduit la notion de **périodicité** : les nombres trigonométriques sinus et cosinus relatifs à un angle α et à un autre angle $\alpha + k \cdot 2\pi$, où k est un entier relatif, seront identiques.

VII.4.1 Les angles associés

Il est possible de retrouver géométriquement des relations entre des angles dits « associés » :

Les angles supplémentaires α et $(\pi - \alpha)$

Les cosinus de deux angles supplémentaires sont opposés :

$$\cos \alpha = -\cos(\pi - \alpha). \tag{VII.27}$$

Les sinus de deux angles supplémentaires sont égaux :

$$\sin \alpha = \sin(\pi - \alpha). \tag{VII.28}$$

Les angles opposés α et $-\alpha$

Les cosinus de deux angles opposés sont égaux :

$$\cos \alpha = \cos(-\alpha).$$
 (VII.29)

Les sinus de deux angles opposés sont opposés :

$$\sin \alpha = -\sin(-\alpha). \tag{VII.30}$$

Les angles anti-supplémentaires α et $(\pi + \alpha)$

Les cosinus de deux angles anti-supplémentaires sont opposés :

$$\cos \alpha = -\cos(\pi + \alpha). \tag{VII.31}$$

Les sinus de deux angles anti-supplémentaires sont opposés :

$$\sin \alpha = -\sin(\pi + \alpha). \tag{VII.32}$$

Les angles complémentaires α et $\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right)$

Les sinus et cosinus d'angles complémentaires sont échangés :

$$\cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) = \sin\alpha \quad \text{et} \quad \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) = \cos\alpha.$$
 (VII.33)

Un tracé du cercle trigonométrique est la manière la plus sûre de retrouver tous ces résultats.

$$\frac{AD}{AB} = \frac{AE}{AC} = \frac{DE}{BC}$$

^{9.} Dans un triangle ABC, on trace une droite parallèle au côté faisant face à A. Cette droite intercepte [AB] en D et [AC] en E. On a alors

VII.4.2 Relations trigonométriques

Ci-dessous sont listées des formules dont l'intérêt pratique est particulièrement avéré en sciences physiques, et qui permettent notamment de simplifier des expressions trigonométriques, ce qui constitue parfois la clé de la résolution d'un problème.

1 Formules d'addition : Les trois formules d'addition qui suivent sont essentielles. Elles permettent de simplifier beaucoup d'expressions trigonométriques. Elles sont à la base de toutes les autres. Elles sont en fait valables non seulement pour des variables 10 réelles mais également pour des variables complexes ce qui permet de les employer en trigonométrie hyperbolique (c'est à dire la trigonométrie des fonctions cosh, sinh et tanh 11).

$$\cos(z_1 + z_2) = \cos z_1 \cos z_2 - \sin z_1 \sin z_2,$$

$$\sin(z_1 + z_2) = \sin z_1 \cos z_2 + \cos z_1 \sin z_2,$$

$$\tan(z_1 + z_2) = \frac{\tan z_1 + \tan z_2}{1 - \tan z_1 \tan z_2},$$

(VII.34)

où $(z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2$. Des relations (VII.34), on déduit celles de $\cos(z_1 - z_2)$, etc. Il suffit en effet d'écrire

$$\cos(z_1 - z_2) = \cos(z_1 + (-z_2))$$

et d'utiliser le fait que le cosinus est une fonction paire alors que le sinus et la tangente sont impaires. Ainsi, on trouve par exemple

$$\cos(z_1 - z_2) = \cos z_1 \cos z_2 + \sin z_1 \sin z_2.$$

2 Formules de duplication : de ces relations, on tire, en posant $z_1 = z_2 = \alpha$,

$$\cos(2\alpha) = \cos^2(\alpha) - \sin^2(\alpha) = 2\cos^2(\alpha) - 1 = 1 - 2\sin^2(\alpha).$$
 (VII.35)

Pour le sinus, on trouve

$$\sin(2\alpha) = 2\sin(\alpha)\cos(\alpha). \tag{VII.36}$$

De VII.35 on tire également

$$\cos(\alpha) = 2\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) - 1 = 1 - 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right). \tag{VII.37}$$

 ${f 3.}$ Formules de factorisation : des formules (VII.34), on peut aussi tirer d'autres formules utiles de factorisation :

$$\cos z_1 + \cos z_2 = 2\cos\left(\frac{z_1 + z_2}{2}\right)\cos\left(\frac{z_1 - z_2}{2}\right),$$

$$\sin z_1 + \sin z_2 = 2\sin\left(\frac{z_1 + z_2}{2}\right)\cos\left(\frac{z_1 - z_2}{2}\right),$$
(VII.38)

ainsi que bien d'autres.

4. Formules de l'arc moitié : les formules qui suivent sont particulièrement importantes en intégration où elles permettent d'effectuer des changements de variables ramenant des fonctions rationnelles de fonctions

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad ; \quad \sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad ; \quad \tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)}$$

Nous verrons dans le chapitre sur les complexes que les fonctions cos et sin sont définies en terme d'exponentielles par des expressions très semblables.

^{10.} Nous verrons plus loins la notion de fonction trigonométrique.

^{11.} Ces fonctions sont définies de la manière suivante :

trigonométriques à des fonctions rationnelles algébriques. Posant $t = \tan(\theta/2)$, on a

$$\cos \theta = \frac{1 - t^2}{1 + t^2}, \quad \sin \theta = \frac{2t}{1 + t^2}, \quad \tan \theta = \frac{2t}{1 - t^2}.$$
 (VII.39)

VII.4.3 Les équations trigonométriques

On parle d'équation trigonométrique lorsqu'il s'agit de trouver toutes les solutions vérifiant une égalité impliquant des nombres trigonométriques. Citons un exemple simple :

$$\sin x = \frac{\sqrt{2}}{2}.\tag{VII.40}$$

Résoudre cette équation dans \mathbb{R} revient à trouver tous les x réels qui vérifient cette égalité. En l'occurrence, on sait que les angles de mesure $\pi/4$ et $3\pi/4$ ont un sinus de cette mesure égal à $\sqrt{2}/2$, mais cela est également vrai pour ces deux angles incrémentés d'un nombre entier de fois 2π . La réponse complète à la requête « Résoudre $\sin x = \sqrt{2}/2$ dans \mathbb{R} » sera donc $\pi/4 + k \cdot 2\pi$ et $3\pi/4 + k \cdot 2\pi$, avec $k \in \mathbb{Z}$.

Il est également possible de rencontrer des équations du type $\cos(x/4) = \sqrt{2}/2$, auquel cas on constatera que c'est lorsque $x_{\pm} = \pm \pi + k \cdot 2\pi$ avec $k \in \mathbb{Z}$ que l'équation est vérifiée. En effet, on a bien, par les angles associés (ici, opposés), que $\cos(\pi/4) = \cos(-\pi/4) = \sqrt{2}/2$, ce qui est également vrai si l'on incrémente n'importe laquelle de ces deux mesures d'angle par un nombre entier de fois 2π .

Les angles associés peuvent également nous aider à résoudre des équations du type $\sin(\alpha x) = \cos(\beta x)$: tous les x satisfaisant cette équation peuvent se trouver en se souvenant des propriétés des angles complémentaires et supplémentaires. On a donc

$$(\sin(\alpha x) = \cos(\beta x)) \iff \left(\sin(\alpha x) = \sin\left(\frac{\pi}{2} - \beta x\right)\right),$$
 (VII.41)

ce qui se résout en déduisant que, pour tout entier relatif k, si $\alpha \neq -\beta$,

$$\left(\alpha x = \frac{\pi}{2} - \beta x + k \cdot 2\pi\right) \iff \left(x = \frac{1}{\alpha + \beta} \left(\frac{\pi}{2} + k \cdot 2\pi\right)\right) \tag{VII.42}$$

et, sachant que les sinus de deux angles supplémentaires sont égaux, on a, si $\alpha \neq \beta$,

$$\left(\alpha x = \pi - \left(\frac{\pi}{2} - \beta x\right) + k \cdot 2\pi\right) \iff \left(x = \frac{1}{\alpha - \beta} \left(\frac{\pi}{2} + k \cdot 2\pi\right)\right). \tag{VII.43}$$

VII.5 Coordonnées polaires et cylindriques

Il peut être parfois plus commode d'exprimer les vecteurs de \mathbb{R}^3 dans d'autres bases que la base cartésienne. C'est le cas notamment lorsque le problème auquel on s'intéresse possède une symétrie particulière comme, par exemple, la symétrie cylindrique ou la symétrie sphérique. On est alors amené à introduire une représentation des points M de l'espace \mathbb{R}^3 qui "épouse" cette symétrie par l'intermédiaire d'un nouveau jeu de coordonnées adapté. Il est alors également naturel d'introduire une base de 3 vecteurs indépendants liés au jeu de coordonnées choisi. À la différence de la base cartésienne, cette nouvelle base de vecteurs, dîte locale, évolue en fonction de la position du point M repéré dans l'espace : la direction et le sens des vecteurs de la base locale dépendent donc de la position de M.

Pour être plus concret, nous commençons par un système de coordonnées simple bidimensionnel déj'a rencontré dans la représentation des nombres complexes : les coordonnées polaires.

VII.5.1 Coordonnées polaires

Dans le plan $bidimensionnel\ (xOy)$, on peut représenter le point M par ses coordonnées cartésiennes (x,y), comme vu précédemment, ou par ses coordonnées polaires (ρ,θ) , où $\rho=OM$ représente $\stackrel{12}{OM}$ la norme du vecteur position \overrightarrow{OM} (c'est-à-dire encore, la distance entre le point O et le point M) et $\theta=(\overrightarrow{e_x},\overrightarrow{OM})$, l'angle orienté entre l'axe des abscisses (Ox) et le vecteur position. Il est important de noter que par définition $\rho \geq 0$. Pour qu'à tout point du plan correspondent un jeu de coordonnées polaires, il faut que l'angle θ prenne des valeurs dans un intervalle de largeur 2π rad, par exemple $\theta \in [0, 2\pi[$ ou encore $\theta \in [-\pi, \pi[$. On peut aussi

considérer que θ prend des valeurs dans \mathbb{R} mais dans ce cas toutes les coordonnées $(\rho, \theta + 2k\pi)$ où $k \in \mathbb{Z}$ représentent le même point de l'espace \mathbb{R}^2 .

VII.5.2 Transformation Polaire/Cartésien

Le lien entre les coordonnées est donné par les relations suivantes :

$$x = \rho \cos \theta, \quad y = \rho \sin \theta.$$
 (VII.44)

et à l'inverse

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \theta = \begin{cases} \arccos\left(\frac{x}{\rho}\right) & \text{si } y > 0, \\ 2\pi - \arccos\left(\frac{x}{\rho}\right) & \text{si } y < 0 \end{cases}$$
 (VII.45)

pour $\theta \in [0, 2\pi[$.

VII.5.3 Base polaire

Une base naturelle orthonormée associée à ce système de coordonnées est formée des deux vecteurs \vec{e}_{ρ} et \vec{e}_{θ} indiqués sur la Fig. VII.15 : c'est la base locale.

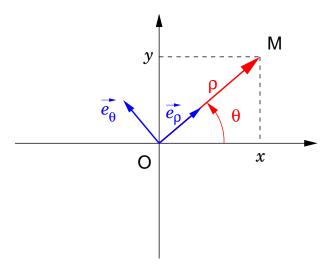


FIGURE VII.15 – Coordonnées polaires.

Le vecteur unitaire \vec{e}_{ρ} est dans le prolongement du vecteur position bidimensionnel tandis que le vecteur unitaire \vec{e}_{θ} lui est orthogonal et orienté dans le sens trigonométrique positif.

$$\vec{e}_{o} = \cos\theta \vec{e}_{x} + \sin\theta \vec{e}_{y}, \quad \vec{e}_{\theta} = -\sin\theta \vec{e}_{x} + \cos\theta \vec{e}_{y},$$
 (VII.46)

Maintenant tout point du plan M peut être repéré par ses coordonnées polaires (ρ, θ) et tout vecteur \vec{u} du plan s'exprime de manière unique dans la base locale selon

$$\vec{u} = u_0 \vec{e}_0 + u_\theta \vec{e}_\theta \,. \tag{VII.47}$$

Les quantités (u_{ρ}, u_{θ}) sont les *composantes* du vecteur \vec{u} dans la base locale $(\vec{e}_{\rho}, \vec{e}_{\theta})$.

VII.5.4 Exemples

Prenons quelques exemples de vecteurs en les exprimant dans la base locale. Le vecteur \overrightarrow{OM} s'exprime simplement comme

$$\overrightarrow{OM} = \rho \vec{e}_{\rho}. \tag{VII.48}$$

On peut aussi exprimer les vecteurs \vec{e}_x et \vec{e}_y de la base cartésienne dans la base locale. On trouve après projection,

$$\vec{e}_x = \cos\theta \vec{e}_\rho - \sin\theta \vec{e}_\theta, \quad \vec{e}_y = \sin\theta \vec{e}_\rho + \cos\theta \vec{e}_\theta,$$
 (VII.49)

Les composantes de \vec{e}_x et \vec{e}_y dans la base $(\vec{e}_\rho, \vec{e}_\theta)$ sont donc respectivement $(\cos \theta, -\sin \theta)$ et $(\sin \theta, \cos \theta)$. On voit qu'elles dépendent de l'angle θ et donc de la position précise choisie pour M. Bien sûr, on peut aussi donner l'expression des vecteurs $(\vec{e}_\rho, \vec{e}_\theta)$ dans la base cartésienne (\vec{e}_x, \vec{e}_y) .

VII.5.5 Coordonnées cylindriques

Les coordonnées cylindriques sont une généralisation tridimensionnelle des coordonnées polaires. On représente le point M par ses coordonnées polaires "au sol" (plan (xOy)) et on leur ajoute la coordonnée z des coordonnées cartésiennes (voir Fig. VII.16). De cette manière, tout point de \mathbb{R}^3 est représenté par les coordonnées (ρ, θ, z) .

À la base polaire précédente, on rajoute le vecteur \vec{e}_z de la base cartésienne. On peut voir que la base ainsi formée est orthonormée. Ainsi, tout vecteur \vec{u} de \mathbb{R}^3 s'écrit de manière unique sous la forme

$$\vec{u} = u_{\rho}\vec{e}_{\rho} + u_{\theta}\vec{e}_{\theta} + u_{z}\vec{e}_{z}. \tag{VII.50}$$

Les coordonnées du point M étant (ρ, θ, z) , le vecteur position $\overrightarrow{OM} := \overrightarrow{r}$ s'écrit donc

$$\overrightarrow{OM} = \rho \vec{e}_{\rho} + z \vec{e}_{z} \,. \tag{VII.51}$$

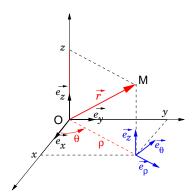


FIGURE VII.16 – Coordonnées cylindriques.

VII.6 Coordonnées sphériques

En coordonnées sphériques, on représente la position du point M par sa distance au point O, telle que OM = r et deux angles, θ et ϕ . L'angle θ est celui que fait le vecteur position \overrightarrow{OM} avec l'axe (Oz) des coordonnées cartésiennes. On convient qu'il varie de 0 à π . L'angle ϕ est celui des coordonnées polaires de la projection de M sur le plan (xOy). Il varie de 0 à 2π , avec 2π exclu.

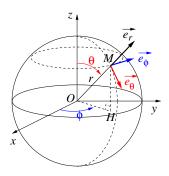


FIGURE VII.17 – Coordonnées sphériques.

VII.6.1 Transformation Cartésien/Sphérique

Le passage des coordonnées sphériques aux coordonnées cartésiennes est donné par

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta.$$
 (VII.52)

et à l'inverse

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \arccos\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi = \begin{cases} \arccos\left(\frac{x}{r\sin\theta}\right) & \text{si } y > 0, \\ 2\pi - \arccos\left(\frac{x}{r\sin\theta}\right) & \text{si } y < 0 \end{cases}$$
(VII.53)

VII.6.2 Base sphérique

Les vecteurs de la base sphérique sont $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi)$. Exprimés dans la base cartésienne, ces vecteurs s'écrivent

$$\vec{e}_r = \sin\theta\cos\phi\,\vec{e}_x + \sin\theta\sin\phi\,\vec{e}_y + \cos\theta\,\vec{e}_z$$

$$\vec{e}_\theta = \cos\theta\cos\phi\,\vec{e}_x + \cos\theta\sin\phi\,\vec{e}_y - \sin\theta\,\vec{e}_z$$

$$\vec{e}_\phi = -\sin\phi\,\vec{e}_x + \cos\phi\,\vec{e}_y$$
(VII.54)

VII.7 Retour au calcul vectoriel : le produit scalaire

Remarque préliminaire

Dans ce qui suit, on considérera le produit scalaire dans un repère orthonormé (voir plus haut).

Il existe deux définitions du produit scalaire, équivalentes. À deux dimensions, nous avons

$$\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{v} = u_x v_x + u_y v_y = ||\overrightarrow{u}|| ||\overrightarrow{v}|| \cos(\widehat{\overrightarrow{u}; \overrightarrow{v}}), \tag{VII.55}$$

où $(\overrightarrow{u}; \overrightarrow{v})$ est la mesure de l'angle orienté entre les deux vecteurs dans un plan orienté muni du repère (O; x, y).

Pour retrouver cette mesure, prenons, comme à la figure VII.18, dans le même plan que \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} , un cercle \mathcal{C} de centre O et de rayon quelconque. Soient A et B deux points tels que $\overrightarrow{OA} = \overrightarrow{u}$ et $\overrightarrow{OB} = \overrightarrow{v}$. Les points A' et B' d'intersection de [OA) et [OB) avec \mathcal{C} définissent deux angles orientés de mesure α_A et α_B , dont la différence $(\alpha_B - \alpha_A)$ rend la mesure de l'angle orienté $(\overrightarrow{u}; \overrightarrow{v})$. Cette procédure de déduction de la mesure de l'angle orienté entre deux vecteurs est décrite figure VII.18.

Notons qu'un angle orienté a une infinité de mesures $\alpha + k \cdot 2\pi$, $k \in \mathbb{Z}$, mais qu'une seule d'entre elles, α , appelée **mesure principale** de cet angle orienté, est dans l'intervalle $]-\pi,\pi]$.

À trois dimensions, nous avons également deux définitions du produit scalaire:

$$\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{v} = u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z = ||\overrightarrow{u}|| ||\overrightarrow{v}|| \cos(\widehat{\overrightarrow{u}; \overrightarrow{v}}).$$
 (VII.56)

Plusieurs propriétés caractérisent le produit scalaire :

— il est commutatif

$$\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{v} = \overrightarrow{v} \cdot \overrightarrow{u}. \tag{VII.57}$$

— Il est **distributif** (linéarité)

$$(\overrightarrow{u} + \overrightarrow{v}) \cdot \overrightarrow{w} = \overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{w} + \overrightarrow{v} \cdot \overrightarrow{w}. \tag{VII.58}$$

— Il est associatif :

$$(k\vec{u}).\vec{v} = \vec{u}.(k\vec{v}) = k(\vec{u}.\vec{v}).$$
 (VII.59)

— Il permet de détecter l'orthogonalité (perpendicularité) entre deux vecteurs

$$\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{v} = 0 \Leftrightarrow \overrightarrow{u} \perp \overrightarrow{v}.$$
 (VII.60)

— Il est lié à la associatif d'un vecteur par

$$\sqrt{\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{u}} = \sqrt{||\overrightarrow{u}|| ||\overrightarrow{u}|| \cos(0)} = ||\overrightarrow{u}||. \tag{VII.61}$$

On remarque figure VII.19 que dans les deux cas (angle obtus entre les deux vecteurs - partie de gauche -

47 VII.8. Produit vectoriel

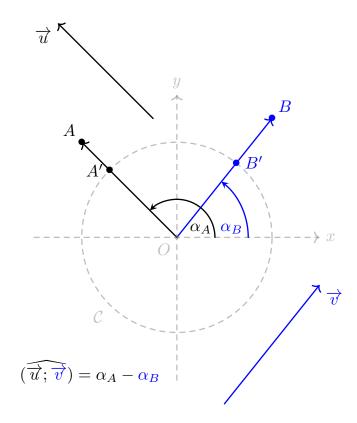


FIGURE VII.18 – Illustration de la définition de l'angle orienté entre deux vecteurs.

et angle aigu entre les deux vecteurs - partie de droite), le produit scalaire peut s'interpréter comme une projection sur un axe aligné avec le vecteur à partir duquel l'angle orienté part. Cette notion de projection a déjà été rencontrée plus haut (Cf. figure VII.8).

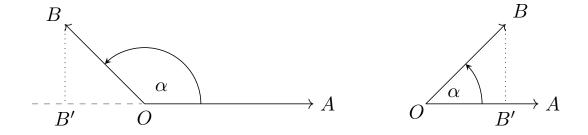


FIGURE VII.19 – Produit scalaire et projection dans le plan.

Remarque VII.4

Il n'est pas rare de rencontrer le « carré d'un vecteur » \overrightarrow{u}^2 . Cela peut s'interpréter comme le produit scalaire du vecteur sur lui-même, et il en résulte simplement le carré de sa norme. Nous pouvons donc utiliser les produits remarquables et les appliquer à deux vecteurs \overrightarrow{u} et \overrightarrow{v} :

$$(\overrightarrow{u} \pm \overrightarrow{v})^2 = ||\overrightarrow{u}||^2 + ||\overrightarrow{v}||^2 \pm 2\overrightarrow{u} \cdot \overrightarrow{v}, \qquad (\overrightarrow{u} + \overrightarrow{v})(\overrightarrow{u} - \overrightarrow{v}) = ||\overrightarrow{u}||^2 - ||\overrightarrow{v}||^2. \tag{VII.62}$$

VII.8 Produit vectoriel

VII.8.1 Définition

Le produit vectoriel de deux vecteurs \vec{u} et \vec{v} est un vecteur \vec{w} perpendiculaire au plan défini par \vec{u} et \vec{v} si ces derniers ne sont pas colinéaires, ou nul si ces derniers le sont.

Le produit vectoriel s'écrit ¹³

$$\vec{w} = \vec{u} \times \vec{v}. \tag{VII.63}$$

Le vecteur \vec{w} est orienté de telle sorte que le trièdre $(\vec{u}, \vec{v}, \vec{w})$ soit direct (règle de la main droite, règle du tire-bouchon, etc.). Sa norme est donnée par

$$\|\vec{w}\| = \|\vec{u}\| \|\vec{v}\| |\sin(\vec{u}, \vec{v})|. \tag{VII.64}$$

VII.8.2 Coordonnées cartésiennes

Si les coordonnées cartésiennes des vecteurs \vec{u} et \vec{v} sont (u_x, u_y, u_z) et (v_x, v_y, v_z) , les coordonnées de \vec{w} sont

$$\vec{w} = \begin{pmatrix} w_x = u_y v_z - u_z v_y \\ w_y = u_z v_x - u_x v_z \\ w_z = u_x v_y - u_y v_x \end{pmatrix}$$
 (VII.65)

VII.8.3 Propriétés

- Anticommutativité : $\vec{u} \times \vec{v} = -\vec{v} \times \vec{u}$.
- Distributivité : $(\vec{u} + \vec{v}) \times \vec{w} = \vec{u} \times \vec{w} + \vec{v} \times \vec{w}$.
- Associativité : $(k\vec{u}) \times \vec{v} = \vec{u} \times (k\vec{v}) = k(\vec{u} \times \vec{v}).$
- Colinéarité : $\vec{u} \parallel \vec{v} \Rightarrow \vec{u} \times \vec{v} = \vec{0}$. En particulier, $\vec{u} \times \vec{u} = \vec{0}$.
- L'aire d'un triangle ABC quelconque est donnée par $S = \|\vec{AB} \times \vec{AC}\|/2$.

Chapitre VIII

NOMBRES COMPLEXES

Depuis leur introduction au XVI^e siècle par des mathématiciens tels que Cardan ou Tartaglia qui cherchaient à exprimer les solutions des équations du troisième degré d'une manière générale, les nombres complexes n'ont cessé d'envahir les domaines scientifiques comme les mathématiques, la physique ou les sciences de l'ingénieur pour n'en nommer que quelques uns. Ils donnent souvent une méthode de résolution simple à des problèmes difficiles voire virtuellement impossibles à résoudre autrement. Comme il est devenu indispensable de pouvoir effectuer des calculs élémentaires sur des quantités complexes, nous passons en revue dans ce chapître leurs caractéristiques essentielles.

VIII.1 Description et notations

VIII.1.1 Représentation géométrique

Les nombres complexes forment une extension bi-dimensionnelle des nombres réels. On les note traditionnellement par la lettre z et on note leur ensemble par la lettre $\mathbb C$. Le nombre complexe z est défini par deux nombres réels x et y. À ce couple de nombres réels, on peut faire correspondre un point M du plan de coordonnées (x,y) comme sur la figure VIII.1. On peut aussi associer ce couple de coordonnées au vecteur \overrightarrow{OM} . L'axe des abscisses (Ox) est appelé axe réel et celui des ordonnées (Oy), axe imaginaire. Cette représentation géométrique permet de comprendre au moins en partie la pertinence des notations suivantes.

VIII.1.2 Forme cartésienne

Sous forme cartésienne, on écrit le nombre complexe z:

$$z = x + iy. (VIII.1)$$

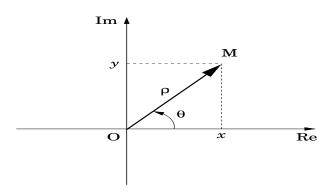


FIGURE VIII.1 – Représentation d'un nombre complexe $z=x+iy=\rho e^{i\theta}$ dans le plan complexe.

Le nombre i est appelé unité imaginaire 1 et il est tel que

$$i^2 = -1. (VIII.2)$$

Le réel x est appelé partie réelle de z et noté $\Re z$. Le réel y est appelé sa partie imaginaire et noté $\Im z$. Ainsi, l'abscisse et l'ordonnée de M correspondant au nombre z sont clairement séparées puisque le nombre i multiplie uniquement l'ordonnée du point M.

VIII.1.3 Forme polaire

Naturellement, comme le nombre complexe z peut être associé au point M ou plus exactement au vecteur \overrightarrow{OM} , on peut en donner une représentation polaire. Il suffit pour cela de donner la distance $\rho = OM$ et l'angle θ que le vecteur \overrightarrow{OM} fait avec l'axe (Ox) comme indiqué sur la figure VIII.1. Comme $x = \rho \cos \theta$ et $y = \rho \sin \theta$, on obtient en remplaçant dans (VIII.1)

$$z = \rho(\cos\theta + i\sin\theta). \tag{VIII.3}$$

La formule d'Euler (1748) permet de réduire encore cette écriture. Elle stipule en effet que

$$\cos \theta + i \sin \theta = \exp(i\theta). \tag{VIII.4}$$

On obtient donc

$$z = \rho e^{i\theta}$$
. (VIII.5)

Par définition ρ est appelé module de z et l'angle θ , son argument. Nous revenons sur ces quantités dans la section suivante.

On déduit en outre de l'expression (VIII.4) la propriété suivante très importante de l'exponentielle complexe

$$e^{i(\theta+k\pi)} = (-1)^k e^{i\theta}.$$
 (VIII.6)

VIII.2 Calcul complexe

VIII.2.1 Manipulations algébriques de base

Le manipulation algébrique des nombres complexes est en tout point semblable à celle des nombres réels. On peut ajouter, retrancher, multiplier et diviser les nombres complexes comme on le ferait pour des nombres réels et simplifier les expressions obtenues en tenant compte du fait que $i^2 = -1$. Ainsi, par exemple, pour $(x, y, a, b) \in \mathbb{R}^4$

$$(x+iy) + (a+ib) = (x+a) + i(y+b),$$

$$(x+iy)(a+ib) = (xa-yb) + i(ya+xb),$$

$$\frac{x+iy}{a+ib} = \frac{xa+yb}{a^2+b^2} + i\frac{ya-xb}{a^2+b^2}.$$
(VIII.7)

^{1.} Puisqu'il s'agit d'une "constante mathématique", elle est souvent notée sans la mettre en italique : i.

Pour obtenir cette dernière égalité, nous avons multiplié le numérateur et le dénominateur de la fraction originale par (a-ib) ce qui nous a permis d'éliminer la partie imaginaire du dénominateur et donc d'obtenir le résultat de l'opération sous forme cartésienne.

De même, on peut travailler sur les complexes exprimés sous leur forme polaire. Par exemple, avec $(\rho, r) \in (\mathbb{R}^+)^2$ et $(\theta, \phi) \in \mathbb{R}$,

$$\left(\rho e^{i\theta}\right) \left(r e^{i\phi}\right) = \rho r e^{i(\theta + \phi)},$$

$$\frac{\rho e^{i\theta}}{r e^{i\phi}} = \frac{\rho}{r} e^{i(\theta - \phi)}.$$
(VIII.8)

La première égalité montre que la règle de multiplication des exponentielles $(e^x e^y = e^{x+y})$ rend les calculs de multiplication très faciles sous forme polaire. De même, la division aboutit à un résultat très simple quand on utilise le fait que $1/e^x = e^{-x}$.

VIII.2.2 Définitions utiles

Dans tout ce qui suit, on suppose que $z = x + iy = \rho \exp(i\theta)$.

1. On appelle module de z et on note |z| le nombre réel positif

$$|z| = \rho = \sqrt{x^2 + y^2}.$$
 (VIII.9)

Le module est une valeur absolue. Remarquez que, dans la représentation géométrique du nombre complexe z, c'est la norme du vecteur \overrightarrow{OM} . Il est donc toujours positif ou nul et n'est nul que si z=0. D'autre part, |zz'|=|z||z'| mais $|z+z'|\leq |z|+|z'|$ (inégalité triangulaire).

2. On appelle argument de z et on note arg(z), l'angle θ de la forme polaire de z.

$$arg(z) = \theta.$$
 (VIII.10)

Vu la périodicité de l'exponentielle complexe (cf. (VIII.6)), $\arg(z)$ peut être défini modulo 2π . Les physiciens appellent souvent θ , la *phase* de l'exponentielle complexe. Celle-ci joue un rôle prépondérant en physique des ondes et en particulier en optique ondulatoire où elle permet d'expliquer les phénomènes d'interférences et de diffraction.

3. On appelle complexe conjugué de z et on note \bar{z} la quantité ²

$$\bar{z} = x - iy = \rho \exp(-i\theta).$$
 (VIII.11)

La conjugaison complexe obéit aux lois suivantes :

$$\overline{z+z'} = \overline{z} + \overline{z'}, \quad \overline{zz'} = \overline{z}\overline{z'}, \quad \overline{\overline{z}} = z.$$
 (VIII.12)

En utilisant ces définitions on voit que

$$|z| = \sqrt{z\overline{z}}, \quad \Re z = \frac{z + \overline{z}}{2}, \quad \Im z = \frac{z - \overline{z}}{2i}.$$
 (VIII.13)

VIII.2.3 Quelques résultats essentiels

1. Un nombre complexe est nul si et seulement si sa partie réelle et sa partie imaginaire sont nulles. Donc si z = x + iy, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$,

$$z = 0 \Leftrightarrow (x = 0 \text{ et } y = 0).$$
 (VIII.14)

On en déduit que l'égalité de deux nombres complexes a lieu si et seulement si les parties réelles sont égales **et** les parties imaginaires sont égales.

$$z_1 = z_2 \Leftrightarrow (x_1 = x_2 \text{ et } y_1 = y_2).$$
 (VIII.15)

^{2.} On note aussi parfois z^* le complexe conjugué de z.

2. Passage Polaire \rightarrow Cartésien. Soit $z = \rho e^{i\theta}$, alors z = x + iy avec

$$x = \rho \cos \theta, \quad y = \rho \sin \theta$$
 (VIII.16)

3. Passage Cartésien \rightarrow Polaire. Soit z=x+iy, alors $z=\rho e^{i\theta}$ avec

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \theta = \begin{cases} \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{si } x \ge 0, \\ \pi + \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{si } x < 0. \end{cases}$$
(VIII.17)

Avec cette définition, $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$.

4. Formule de Moivre (1730)

$$(\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos(n\theta) + i \sin(n\theta). \tag{VIII.18}$$

5. Expression complexe des fonctions sinus et cosinus

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}, \quad \sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$$
 (VIII.19)

6. Valeurs remarquables

$$e^{i\frac{\pi}{2}} = i, \quad e^{i\pi} = -1, \quad e^{i2\pi} = 1.$$
 (VIII.20)

Chapitre IX

ANALYSE

IX.1 Les suites numériques

Les suites sont un outil de modélisation des phénomènes discrets (i.e., impliquant un ensemble dénombrable de valeurs qu'une grandeur peut prendre) très utiles en sciences comme l'évolution d'une population bactérienne par exemple.

Une suite est une fonction de \mathbb{N} ou d'une partie de \mathbb{N} dans \mathbb{R} . On note généralement les valeurs u_n de cette fonction prise en un entier n:

$$u : \mathbb{N} \to \mathbb{R}$$
$$n \mapsto u_n$$

Exemple IX.1
$$\left[n\mapsto \frac{1}{n+1}\right] = \left(\frac{1}{n+1}\right)_{n\in\mathbb{N}} \text{ est une suite définie sur } \mathbb{N}.$$

La suite définie par $u_n = \sqrt{n^2 - 2}$ est définie sur l'ensemble $\mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$, et $u_2 = \sqrt{2}$, $u_3 = \sqrt{7}$, etc.

IX.1.1 Les suites arithmétiques

Soient $r \in \mathbb{R}$ et $u_0 \in \mathbb{R}$. La suite arithmétique de raison r et de premier terme u_0 est définie par la donnée de u_0 et la relation de récurrence :

$$\forall n \in \mathbb{N}, u_{n+1} = u_n + r.$$

IX. Analyse 52

Exemple IX.3

La suite $(n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite arithmétique de raison 1 et de premier terme 0.

Exemple IX.4

La suite $(4(n+3))_{n\in\mathbb{N}}$ est arithmétique de raison 4 et de premier terme 12.

IX.1.2 Les suites géométriques

Soient $q \in \mathbb{R}$ et $u_0 \in \mathbb{R}$. La suite **géométrique** de **raison** q et de **premier terme** u_0 est définie par la donnée de u_0 et la relation de récurrence :

$$\forall n \in \mathbb{N}, u_{n+1} = qu_n.$$

On a alors (avec la convention $q^0 = 1$)

$$\forall n \in \mathbb{N}, u_n = q^n u_0.$$

IX.1.3 Sommes

Somme des n+1 premiers entiers consécutifs

Pour la suite $(n)_{n\in\mathbb{N}}$, on a pour tout n>0:

$$1 + 2 + \dots + n = \frac{n(n+1)}{2}.$$
 (IX.1)

On peut utiliser ce résultat pour calculer la somme des premiers termes d'une suite arithmétique quelconque.

Somme des n+1 premiers carrés d'entiers consécutifs

Pour la suite $(n^2)_{n\in\mathbb{N}}$, on a pour tout n>0:

$$1 + 2^2 + \dots + n^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}.$$
 (IX.2)

Somme des n+1 premiers cubes d'entiers consécutifs

Pour la suite $(n^3)_{n\in\mathbb{N}}$, on a pour tout n>0:

$$1 + 2^{3} + \dots + n^{3} = \left(\frac{n(n+1)}{2}\right)^{2}.$$
 (IX.3)

Somme des n+1 premiers termes d'une suite géométrique

Soit (u_n) , la suite géométrique de raison $q \neq 1$ et de premier terme 1. On a pour tout n > 0:

$$S_n := 1 + q + q^2 + \dots + q^n = \frac{1 - q^{n+1}}{1 - q}.$$
 (IX.4)

IX.2 Variations et convergence d'une suite

Une suite (u_n) est **croissante** si pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a $u_{n+1} \ge u_n$. Elle est **strictement croissante** si, pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a $u_{n+1} > u_n$. On définit de même les suites **décroissantes** et **strictement décroissantes**. Toutes ces suites sont dites **monotones**.

IX.2.1 Limites finies et infinies

Limites finies

Soient (u_n) une suite et l un nombre réel. La suite (u_n) converge vers l si tout intervalle ouvert contenant l contient tous les termes de la suite à partir d'un certain rang. On note

$$\lim_{n \to \infty} u_n = l.$$

Plus l'intervalle qu'on se donne contenant l est petit, c'est-à-dire de longueur petite, plus, en général, on doit chercher un rang N grand pour lequel tous les termes de la suite de rang $n \geq N$ sont dans ce petit intervalle.

Exemple IX.5

Lorsque |q| < 1, la suite dont les valeurs sont les sommes des n premières valeurs S_n dans (IX.4), converge

$$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q}.$$

Limites infinies

Soit (u_n) une suite. La suite (u_n) converge vers $+\infty$ si tout intervalle de la forme A, $+\infty$ contient tous les termes de la suite à partir d'un certain rang. On note

$$\lim_{n\to\infty} u_n = +\infty.$$

Exemple IX.6

Si $\alpha > 0$, alors $\lim_{n \to \infty} \frac{1}{n^{\alpha}} = 0$.

Exemple IX.7 Si $\alpha > 0$, alors $\lim_{n \to \infty} n^{\alpha} = +\infty$.

IX.2.2 Les suites monotones

Une suite (u_n) est **majorée** s'il existe un réel M tel que pour tout n naturel, $u_n \leq M$. Si (u_n) est une suite croissante et majorée, alors elle est convergente. Une suite croissante non majorée tend vers $+\infty$.

Exemple IX.8

La suite $(3-1/n^2)_{n \in \mathbb{N}^*}$ est croissante, majorée (par 3) et converge vers 3.

IX.2.3 Les suites adjacentes

Deux suites u et v sont adjacentes si les trois conditions suivantes sont vérifiées :

- la suite $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est croissante;
- la suite $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est décroissante;
- $\bullet \lim_{n \to \infty} (u_n v_n) = 0.$

Notons que si u et v sont adjacentes, alors pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $m \in \mathbb{N}$, $u_n \leq v_m$, les suites u et v sont convergentes et

$$\lim_{n\to\infty} u_n = \lim_{n\to\infty} v_n.$$

IX.2.4 Limites et ordre

Soient deux suites convergentes (u_n) et (v_n) , telles que pour tout $n, u_n \leq v_n$. Alors,

$$\lim_{n \to \infty} u_n \le \lim_{n \to \infty} v_n.$$

Remarque IX.1

Il se peut que pour tout n, on ait $u_n < v_n$ et que cependant, $\lim_{n \to \infty} u_n = \lim_{n \to \infty} v_n$.

On utilise souvent ce résultat avec une des deux suites constante. Par exemple, si $u_n \leq 1$ pour tout n, et si (u_n) converge, alors, $\lim_{n\to\infty} u_n \leq 1$.

Théorème IX.1

(Gendarmes) Soient trois suites u, v, w telles que pour tout n entier, $v_n \leq u_n \leq w_n$ et $\lim_{n \to \infty} v_n = v_n$ $\lim_{n\to\infty} w_n = l \text{ (finie ou infinie). Alors,}$

$$\lim_{n \to \infty} u_n = l.$$

IX. Analyse 54

IX.2.5 Opérations sur les limites

Soient u et v deux suites. On définit les suites u + v et $u \cdot v$ par :

$$(u+v)_n = u_n + v_n$$
 et $(u \cdot v)_n = u_n \cdot v_n$.

Si λ est un réel, on définit également la suite λu par $(\lambda u)_n = \lambda u_n$.

On peut souvent déduire la nature de ces suites de celles de u et v, comme le montre le tableau IX.1 où λ est supposé non nul et l, l' sont réels. Les points d'interrogation signifient qu'on ne peut pas conclure dans le cas général : il y a **indétermination**.

\overline{u}	v	u+v	$u \cdot v$	λu
\overline{l}	l'	l + l'	$l \cdot l'$	λl
$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$signe(\lambda)(+\infty)$
$+\infty$	$-\infty$?	$-\infty$	$signe(\lambda)(+\infty)$
$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$	$+\infty$	$-\operatorname{signe}(\lambda)(+\infty)$
$l \neq 0$	$+\infty$	$+\infty$	$signe(l)\infty$	λl
0	$+\infty$	$+\infty$?	0

Tableau IX.1 – Opérations sur les limites de suites.

IX.3 Fonction réelle d'une variable réelle

Une fonction numérique de variable réelle f est une application d'une partie \mathcal{D} de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Elle associe à tout réel x de la partie \mathcal{D} un unique réel, noté f(x) et appelé **image de** x **par** f. Si pour un réel y, il existe un x tel que y = f(x), x est appelé un **antécédent** de y et cet antécédent n'est pas nécessairement unique. L'ensemble des points où f est définie est l'ensemble de définition de f, noté \mathcal{D}_f . Une telle fonction se note schématiquement

$$f: \mathcal{D}_f \to \mathbb{R}$$

$$x \mapsto f(x).$$

Exemple IX.9

La fonction

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto x^2$$

lie chaque réel x à un et un seul réel x^2 . Elle est définie sur tout \mathbb{R} .

Exemple IX.10 La fonction $\left[x\mapsto \frac{x^2+3}{x^2-1}\right]$ est définie sur $\mathbb{R}\setminus\{-1,\,1\}$.

Si f est une application de \mathcal{D}_f dans \mathbb{R} , alors pour toute partie \mathcal{D} de \mathcal{D}_f , on note

$$f(\mathcal{D}) = \{ y \in \mathbb{R} \mid \exists x \in \mathcal{D}, y = f(x) \}$$

l'ensemble des images des éléments de \mathcal{D} par f et pour toute partie \mathcal{I} de \mathbb{R} , on note

$$f^{-1}(\mathcal{I}) = \{ x \in \mathcal{D}_f \mid f(x) \in \mathcal{I} \}$$

l'ensemble des antécédents des éléments de \mathcal{I} par f, appelé image réciproque de \mathcal{I} par f.

IX.3.1 Représentation d'une fonction

Une manière simple de se représenter visuellement l'évolution d'une fonction réelle f d'une variable réelle x sur son domaine de définition est d'en tracer le graphe. Pour ce faire, nous commençons par tracer deux axes orientés, un horizontal pour les abscisses (généralement notre x), et un vertical pour les ordonnées (généralement notre f(x)). La plupart du temps, les axes sont orientés de gauche à droite (x croissants) et de bas en haut (valeurs de f(x) croissantes), mais d'autres conventions peuvent être adoptées à partir du moment où cela est clairement indiqué par l'orientation (sens de la flèche) des axes. Il est courant de voir l'origine du repère au point de croisement de l'axe des abscisses et celui des ordonnées, mais là également le choix peut être arbitrairement différent pour autant que cela soit identifiable. Si aucune indication n'est donnée explicitement, on supposera implicitement que les axes se croisent en (0, 0).

Ce que l'on nomme graphe est donc l'ensemble des couples (x, f(x)) pour $x \in \mathcal{D}$ dans le plan rapporté à notre repère, tandis que l'on entend par graphique la représentation du graphe dans un repère du plan.

En dehors du cas de la fonction constante ((a) sur la figure IX.1) dans lequel on a une fonction dont les valeurs f(x) sont égales pour tout x, il est courant d'indiquer au moins une graduation selon x et une selon f(x). Cela est fait pour qu'à l'observation du graphique de la fonction on puisse déduire l'échelle des abscisses et ordonnées, ainsi que l'intervalle de \mathcal{D} et celui de \mathcal{I} considérés. La présence d'au moins deux graduations permet également, à bonne résolution, d'évaluer approximativement la valeur de f(x) partout sur l'intervalle représenté, et de déduire certaines coordonnées remarquables. Cela est d'un usage particulièrement courant en sciences. Il n'est également pas rare de reproduire plusieurs courbes sur le même graphe afin de les comparer, ou d'en trouver des coordonnées de croisement. En général, on choisit la même échelle sur les deux axes orthogonaux, ce qui revient à choisir un **repère orthonormé**.

Dans le cas général, il importe de bien indiquer l'orientation des axes et de donner au moins une graduation pour chacun d'entre eux avec, si nécessaire, la précision des coordonnées du point de croisement de l'axe des abscisses et de celui des ordonnées. Il est également nécessaire de reporter très clairement sur ce graphique la variable (dans notre cas, x) auprès de la tête de flèche de l'axe des abscisses, et d'identifier la fonction (dans notre cas, $[x \mapsto f(x)]$) soit en tête de flèche de l'axe des ordonnées, soit à proximité de la courbe de la fonction, soit dans une légende si plusieurs courbes sont représentées sur la même figure dans le même repère.

Une telle représentation graphique d'une fonction nous permet en un coup d'oeil d'observer et d'identifier son comportement (croissance, concavité, parité...) et ses points remarquables (zéros, discontinuités, extrema, points d'inflexion...).

IX.3.2 Opérations sur les fonctions

Soient $f: \mathcal{D}_f \to \mathbb{R}$ et $g: \mathcal{D}_g \to \mathbb{R}$. On définit les fonctions f+g et $f \cdot g$ sur $\mathcal{D}_f \cap \mathcal{D}_g$. On définit aussi la fonction composée $g \circ f$ sur $f^{-1}(\mathcal{D}_g)$ par

$$(g \circ f)(x) = g(f(x)).$$

Si $f(\mathcal{D}_f) \subset \mathcal{D}_q$, on peut définir $g \circ f$ sur \mathcal{D}_f .

IX. Analyse 56

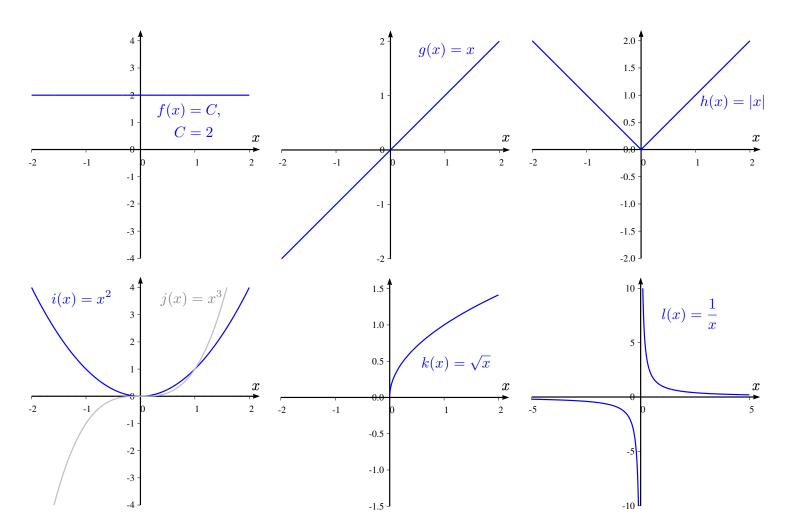


FIGURE IX.1 – Représentation graphique de fonctions courantes.

Exemple IX.11

Soient

$$f: \mathbb{R} \setminus \{-1, +1\} \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto \frac{x^2 - 4}{x^2 - 1}$$

et

$$g:]0, +\infty[\to \mathbb{R}$$

 $x \mapsto \ln x.$

On a alors

$$f + g :]0, 1[\cup]0, +\infty[\to \mathbb{R}$$

$$x \mapsto \ln x + \frac{x^2 - 4}{x^2 - 1},$$

ainsi que

$$f\cdot g:]0,\, 1[\,\cup\,]0, +\infty[\,\to\,\mathbb{R}$$

$$x\,\mapsto\, (\ln x)\,\cdot\,\frac{x^2-4}{x^2-1},$$

et
$$g\circ f\ :]-\infty,-2[\,\cup\,]2,+\infty[\,\to\,\mathbb{R}$$

$$x\mapsto \ln\frac{x^2-4}{x^2-1}.$$

La figure IX.2 illustre quelques opérations sur les fonctions et les modifications que ces opérations couramment rencontrées en début de licence en sciences induisent sur le graphique des fonctions choisies pour les illustrer.

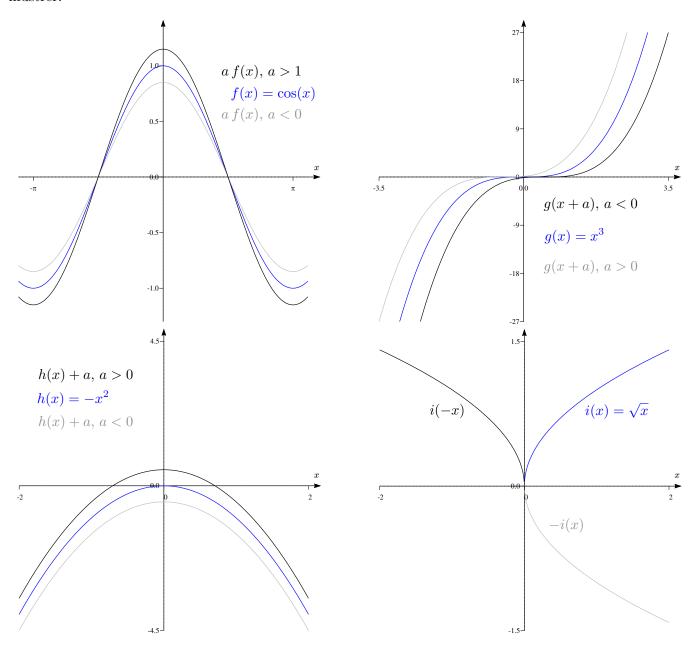


Figure IX.2 – Principales opérations sur les fonctions.

IX.3.3 Parité et périodicité

La parité

La parité d'une fonction est une caractéristique simple qui permet d'en restreindre le domaine d'étude. Elle est utile lors de l'observation de résultats sous la forme d'un graphique, ou lors de la manipulation de fonctions.

Une fonction paire est définie sur une partie \mathcal{D} symétrique (pour tout x élément de $\mathcal{D}, -x \in \mathcal{D}$) et

IX. Analyse 58

vérifie:

$$\forall x \in \mathcal{D}, f(-x) = f(x).$$

Dans ce cas, on observe que le graphique de f est symétrique par rapport à l'axe des ordonnées à l'origine (l'axe vertical qui coupe celui des abscisses en (0,0)), c'est-à-dire que la partie droite du graphique est le reflet de la partie gauche comme dans un miroir (on parle d'ailleurs de **réflexion** pour cette symétrie). Plusieurs exemples de fonctions paires ont été donnés figure IX.1 : la fonction constante, la fonction $[x \mapsto x^2]$ et la fonction valeur absolue $[x \mapsto |x|]$.

Une fonction **impaire** est définie sur une partie \mathcal{D} symétrique et vérifie :

$$\forall x \in \mathcal{D}, f(-x) = -f(x).$$

Dans le cas des fonctions impaires, on parlera plutôt de **symétrie centrale** : dans un repère orthonormé, tout point (x, f(x)) du graphique est aligné avec l'origine (0,0) et avec le point (-x, -f(x)). Figure IX.1, les fonctions $[x \mapsto x]$, $[x \mapsto 1/x]$ et $[x \mapsto x^3]$ sont impaires.

Connaître la parité de deux fonctions permet de prédire la parité de leur somme et de leur produit, ainsi que le révèle le tableau IX.2.

_				
	f	g	f+g	$f \cdot g \text{ et } f/g$
	paire	paire	paire	paires
	impaire	impaire	impaire	paires
	paire	impaire	?	impaires
	impaire	paire	?	impaires

Tableau IX.2 – Parité de fonctions : opérations.

Remarque IX.3

Des fonctions peuvent n'être ni paires ni impaires, comme par exemple la fonction $[x \mapsto x+3]$.

La périodicité

La périodicité d'une fonction permet de restreindre son étude sur un intervalle plutôt que sur \mathcal{D} tout entier : une fonction $f:\mathcal{D}\longrightarrow\mathbb{R}$ est **périodique** de **période** T si

$$\forall x \in \mathcal{D}, x + T \in \mathcal{D} \text{ et } f(x + T) = f(x).$$

Exemple IX.12

Les fonctions sin et cos sont périodiques de période 2π , et la fonction tan est périodique de période π .

IX.3.4 Croissance d'une fonction

Une fonction $f: \mathcal{D} \longrightarrow \mathbb{R}$ est **croissante** si

$$\forall (x,y) \in \mathcal{D}^2, (x \le y) \Longrightarrow (f(x) \le f(y))$$

et strictement croissante si

$$\forall (x, y) \in \mathcal{D}^2, (x < y) \implies (f(x) < f(y))$$

Exemple IX.13

La fonction $[x \mapsto \sqrt{x}]$ est **strictement** croissante sur \mathbb{R}_+ .

Une fonction $f: \mathcal{D} \longrightarrow \mathbb{R}$ est **décroissante** 1 si

$$\forall (x,y) \in \mathcal{D}^2, (x > y) \Longrightarrow (f(x) < f(y))$$

^{1.} On dit parfois d'une fonction décroissante qu'elle a une croissance négative.

et strictement décroissante si

$$\forall (x,y) \in \mathcal{D}^2, (x > y) \implies (f(x) < f(y)).$$

Exemple IX.14

La fonction $[x \mapsto |x|]$ est **strictement** décroissante sur \mathbb{R}_{-} (voir section IX.2).

La croissance peut aussi être vérifiée sur le taux d'accroissement de la fonction : une fonction $f: \mathcal{D} \longrightarrow \mathbb{R}$ est croissante si

$$\forall (x,y) \in \mathcal{D}^2, (x \neq y) \Longrightarrow \left(\frac{f(x) - f(y)}{x - y} \ge 0\right).$$

Une fonction $f: \mathcal{D} \longrightarrow \mathbb{R}$ est **décroissante** si

$$\forall (x,y) \in \mathcal{D}^2, (x \neq y) \Longrightarrow \left(\frac{f(x) - f(y)}{x - y} \le 0\right).$$

Finalement, une fonction (strictement) **monotone** sur un intervalle est une fonction (strictement) croissante ou (strictement) décroissante sur cet intervalle.

IX.3.5 Limites et continuité

Les limites

Soient I un intervalle de \mathbb{R} de bornes a et b réelles (par exemple [a, b[ou]a, b[) et f une fonction définie sur I.

1. Limites finies : la fonction f a une **limite** réelle l en $x_0 \in I$, si tout intervalle ouvert de centre l contient toutes les valeurs f(x) pour x assez proche de x_0 . Dans ce cas, la limite est unique et on note $\lim_{x\to x_0} f(x) = l$.

Exemple IX.15

Soit la fonction

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto 2x.$$

Soit x_0 un réel. On a $|f(x) - f(x_0)| = 2|x - x_0|$, donc, pour tout intervalle ouvert centré en $l = 2x_0$ de type $|l - \varepsilon, l + \varepsilon[$ et pour x proche de x_0 à moins de $\varepsilon/2$ près, on a $f(x) \in]l - \varepsilon, l + \varepsilon[$ puisque $|f(x) - f(x_0)| = 2|x - x_0| < \varepsilon$.

2. Limites infinies: la fonction f a pour **limite** $+\infty$ en a (respectivement b) et on note $\lim_{x\to a} f(x) = +\infty$, si tout intervalle de type $]A, +\infty[$ contient toutes les valeurs f(x) pour x assez proche de a (respectivement b).

On définit de manière analogue $\lim_{x\to a} f(x) = -\infty$.

Exemple IX.16

La fonction

$$f:]0, +\infty[\to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto \frac{1}{x}$$

a pour limite $+\infty$ en 0.

Lorsqu'une fonction a une limite $\pm \infty$ en x_0 , alors la courbe représentative a une **asymptote** verticale en le point de coordonnées $(x_0, 0)$. Il en est ainsi, par exemple, pour la fonction $[x \mapsto 1/x]$ en 0

3. Limites à gauche et à droite : la fonction f a une **limite à gauche** l (finie ou infinie) en $x_0 \in]a,b[$

IX. Analyse 60

si la fonction g

$$g:]a, x_0[\to \mathbb{R}$$

 $x \mapsto f(x)$

a pour limite l en x_0 . La fonction g est la **restriction** de f à l'intervalle $]a, x_0[$. De même, la fonction f a une **limite à droite** l (finie ou infinie) en $x_0 \in]a, b[$ si la fonction

$$h:]x_0, b[\to \mathbb{R}$$

 $x \mapsto f(x)$

a pour limite l en x_0 . On note $\lim_{x \to a} f(x) = l$ pour la limite à gauche et $\lim_{x \to a} f(x) = l$ pour la limite à droite. Notons que si f est définie en x_0 , il se peut que $\lim_{x \to a} f(x) \neq f(x_0)$ ou $\lim_{x \to a} f(x) \neq f(x_0)$.

Exemple IX.17

La fonction f définie sur \mathbb{R} par (f(x) = 0 si x < 0, f(x) = 1 si x > 0, et f(0) = 2), a une limite à gauche et à droite différente en 0: $\lim_{x \to 0} f(x) = 0$, $\lim_{x \to 0} f(x) = 1$.

4. Limites en l'infini : soient $I =]a, +\infty[$, et f une fonction définie sur I.

La fonction f a une **limite** réelle l en $+\infty$ si tout intervalle ouvert de centre l contient toutes les valeurs de la fonction f pour x dans un intervalle de la forme $[B, +\infty[$.

La fonction f a une **limite** $+\infty$ en $+\infty$ si tout intervalle de la forme $[A, +\infty[$ contient toutes les valeurs de la fonction f pour x dans un intervalle de la forme $[B, +\infty[$.

Remarque IX.4

Lorsqu'une fonction a une limite finie l en $\pm \infty$, alors la courbe représentative admet une **asymptote** horizontale en le point de coordonnées (0, l).

Remarque IX.5

Lorsqu'une fonction a une limite infinie en $\pm \infty$, plusieurs cas peuvent se produire. Il n'y a pas nécessairement d'asymptote oblique, comme le montre la fonction $[x \mapsto x^2]$.

Opérations sur les limites

Soient f et g deux fonctions définies sur un intervalle commun et admettant en x_0 des limites l finies ou non. Le tableau IX.3 donne les limites lorsqu'elles existent de f + g, $f \cdot g$ et 1/f.

f	g	f+g		f	g	$f \cdot g$		f	1/f
l	l'	l + l'		l	l'	$l \cdot l'$		$l \neq 0$	1/l
$+\infty$	l'	$+\infty$	+	$+\infty$	$l' \neq 0$	$signe(l')\infty$		$+\infty$ ou $-\infty$	0
$-\infty$	l'	?	_	$-\infty$	0	?		0	?
$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	+	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$		0 et $f > 0$	$+\infty$
$+\infty$	$-\infty$?	_+	$+\infty$	$-\infty$	$-\infty$	_	0 et $f < 0$	$-\infty$

Tableau IX.3 – Opérations sur les limites de fonctions.

Continuité

Soient f une fonction définie sur un intervalle I de \mathbb{R} et x_0 un élément de I. La fonction f est **continue** en x_0 si elle a une limite en x_0 . Cette limite est nécessairement $f(x_0)$. La fonction f est **continue** à **gauche** (respectivement à **droite**) en x_0 si elle a une limite à gauche (respectivement à droite) en x_0 et si $\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0)$ (respectivement $\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0)$). En revanche, on dira qu'elle a une **discontinuité** en x_0 si elle n'est pas continue en x_0 .

Intuitivement, on peut voir la « représentation » graphique d'une fonction, comme une déformation de

61 IX.4. Calcul différentiel

la droite réelle sans brisure, ce qui exclut les « trous » et les « sauts » par exemple. Il ne faut cependant pas oublier que cela est vrai pour le domaine de définition de la fonction. Par exemple, figure IX.1, il n'y a pas de sens à parler de (dis)continuité de la fonction $[x \mapsto 1/x]$ en x = 0 car il s'agit d'un point exclu du domaine de définition de la fonction. On dira simplement que la fonction est continue sur $]-\infty$, [0] et sur $[0,+\infty[$. En revanche, la fonction

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto 1/x \text{ si } x \neq 0$$
$$0 \mapsto 0$$

n'est pas continue en x=0, et la fonction

$$g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto -2 \operatorname{si} x \in]-\infty, 1[$$
$$x \mapsto +2 \operatorname{si} x \in [1, +\infty[$$

n'est pas continue en x = 1. Cette dernière est représentée à la figure IX.3.

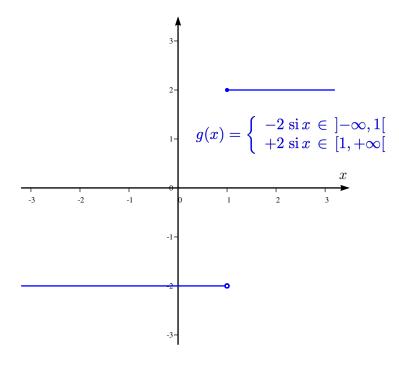


FIGURE IX.3 – Illustration graphique d'une fonction discontinue.

IX.3.6 Opérations sur les fonctions continues

Soient I un intervalle, x_0 un élément de I, λ un réel, f et g deux fonctions définies sur I et continues en x_0 . Les fonctions suivantes sont alors continues en x_0 :

$$|f|$$
, $f+g$, $f\cdot g$, λf et f/g si $g(x_0)\neq 0$.

Ces mêmes fonctions sont continues sur I si f et g sont continues sur I (pour f/g, g ne doit pas s'annuler sur I).

IX.4 Calcul différentiel

Le calcul différentiel concerne l'approximation des fonctions à l'ordre un, c'est-à-dire par des fonctions affines. La **dérivation** est une notion importante dans l'étude des fonctions. Il est utile de comprendre le lien que cette notion entretient avec ses applications en sciences, notamment dans l'évolution des grandeurs. Il est en effet très fréquent d'évaluer la « vitesse d'évolution » d'une grandeur en utilisant ce que l'on appelle son **gradient**, soit la **dérivée** de la fonction ou du vecteur qui caractérise cette grandeur.

IX. Analyse 62

Définition IX.1

Soient f une fonction définie sur un intervalle ouvert I et x_0 un point de I. La fonction f est **dérivable** en x_0 , si le rapport

 $r(x) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$

a une limite à gauche finie et une limite à droite finie en x_0 et si ces deux limites sont égales. Cette limite commune est le **nombre dérivé** de f en x_0 , noté $f'(x_0)$ ou encore

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_0).$$

Pour rappeler cette notion de taux d'accroissement, il est courant d'écrire aussi $x = x_0 + \Delta x$ qui rappelle que x est obtenu à partir de x_0 par un accroissement Δx . On a aussi $\Delta x = x - x_0$. La définition de la dérivée peut alors s'écrire :

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x}(x_0)$$
 (IX.5)

Notations: on trouvera souvent en sciences l'écriture de $f'(x_0)$ sous la forme $\frac{df}{dx}(x_0)$. Cette écriture rappelle que le nombre dérivé $f'(x_0)$ est obtenu à partir de la fonction f par une opération de limite d'un taux d'accroissement $\Delta f/\Delta x$ et qui est signifié par l'écriture df, vue comme un accroissement infinitésimal de f et dx vu comme un accroissement infinitésimal de x.

La fonction f est **dérivable à droite** en x_0 (respectivement **dérivable à gauche** en x_0) si le rapport r(x) a une limite à droite finie (respectivement à gauche) en x_0 .

Remarques

- Si une fonction est dérivable en x_0 , alors elle est dérivable à droite et à gauche en x_0 .
- Attention, une fonction peut être dérivable à droite et à gauche en x_0 sans être dérivable en x_0 , comme le montre la fonction $[x \mapsto |x|]$, qui est dérivable à droite et à gauche en 0, mais n'est pas dérivable en 0.
- Si une fonction est dérivable en x_0 , alors elle est continue en x_0 .
- Si f est dérivable sur I, c'est-à-dire en tout point de I, la **fonction dérivée**, notée f' ou df/dx, est l'application qui fait correspondre à tout élément x de I le nombre dérivé de f en x.

IX.4.1 Interprétation graphique

Le développement qui suit est illustré figure IX.4 : soit une fonction $[x \mapsto f(x)]$ définie en un x_0 donné et continue en tout point entre x_0 et x_0 incrémenté de Δx (c'est-à-dire $x_0 + \Delta x$). Traçons une droite, appelée sécante, passant par $(x_0, f(x_0))$ et $(x_0 + \Delta x, f(x_0 + \Delta x))$. Le coefficient directeur de cette sécante est précisément le quotient $\Delta f/\Delta x$ de l'équation IX.5. Lorsque la fonction est dérivable en x_0 , si l'on se rapproche de x_0 en diminuant progressivement Δx jusqu'à le faire tendre vers zéro, la droite sécante tend vers une droite limite. Il s'agit de la « tangente » au graphe en ce point, dont l'équation est donnée à la figure IX.4. La valeur de la dérivée de la fonction f en x_0 correspondra au coefficient directeur de cette droite, si elle existe (i.e., si elle n'est pas indéterminée, voir figure IX.5 où la tangente est verticale) et qu'elle est unique, c'est-à-dire que la demi-tangente gauche $(x \to 0^-)$ et droite $(x \to 0^+)$ forment un angle plat, ce qui n'est par exemple pas le cas de la fonction valeur absolue (également reproduite sur la figure IX.5) en x = 0, et pour lequel nous avons fourni quelques explications ci-dessus.

63 IX.4. Calcul différentiel

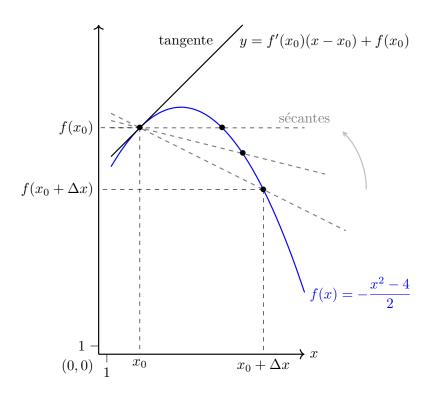


FIGURE IX.4 – Interprétation graphique de la dérivée.

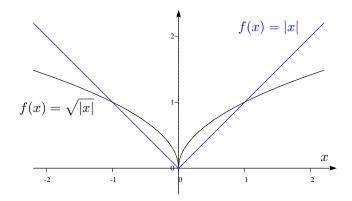


FIGURE IX.5 – Illustration du cas (|x| en x=0) où les deux demi-tangentes en un point ne forment pas un angle plat, et celui où le coefficient directeur de la tangente est indéterminé en un point ($\sqrt{|x|}$ en x=0).

IX.4.2 Opérations sur les fonctions dérivables

Soient I un intervalle, x_0 un élément de I, u et v deux fonctions définies sur I et dérivables en x_0 , et λ un réel. Les fonctions suivantes sont alors dérivables en x_0 :

$$u + v$$
, λu , $u \cdot v$ et $\frac{u}{v}$ si $v(x_0) \neq 0$.

Ces mêmes fonctions sont dérivables sur I (pour u/v, v ne doit pas s'annuler sur I). Les nombres dérivés ou les fonctions dérivées correspondantes sont obtenus à l'aide du tableau IX.4.

IX. Analyse 64

fonction	dérivée
u+v	u'+v'
λu	$\lambda u'$
$u \cdot v$	$u' \cdot v + u \cdot v'$
u/v	$\frac{u'\cdot v - u\cdot v'}{v^2}$

Tableau IX.4 – Opérations sur les dérivées.

Sachant que la dérivée de la fonction sin est la fonction cos et que celle de la fonction cos est la fonction -sin, on a :

Exemple IX.18

La dérivée de la fonction $[x \mapsto 3x^2 + x \sin x]$ est la fonction $[x \mapsto 6x + \sin x + x \cos x]$.

Exemple IX.19

La fonction $\tan = \frac{\sin}{\cos}$, définie sur] $-\pi/2$, $\pi/2$ [, est dérivable de dérivée

$$\frac{1}{\cos^2} = 1 + \tan^2.$$

On donne également

$$\cosh' = \sinh,$$

$$\sinh' = \cosh,$$

et

$$\tanh' = 1 - \tanh^2.$$

Dérivée d'une fonction composée

Soient f et g deux fonctions dérivables telles que $g \circ f$ soit définie sur un intervalle I (non réduit à un point). Alors $g \circ f$ est dérivable sur I et

$$\forall x \in I, (q \circ f)'(x) = q'(f(x)) \cdot f'(x).$$

Exemples

- La dérivée de la fonction $[x \mapsto \cos(x^2)]$ est la fonction $[x \mapsto -2x\sin(x^2)]$;
- La dérivée de la fonction $[x \mapsto (\sin(3x^2))^2]$ est la fonction $[x \mapsto 12x\sin(3x^2)\cos(3x^2)]$;
- Si f est une fonction dérivable de dérivée f', alors pour tout entier $n \ge 1$, la fonction f^n est dérivable de dérivée :

$$[x \mapsto nf^{n-1}(x) \cdot f'(x)].$$

IX.4.3 Croissance, concavité, extremum et point d'inflexion

Croissance

Le résultat suivant que vous démontrerez en licence à l'aide du théorème des accroissements finis fait le lien entre monotonie et signe de la dérivée.

Soit f une fonction définie et dérivable sur un intervalle I. On a les équivalences suivantes :

- la fonction f est constante sur I si et seulement si f'(x) = 0 pour tout $x \in I$;
- la fonction f est croissante sur I si et seulement si $f'(x) \ge 0$ pour tout $x \in I$;
- la fonction f est décroissante sur I si et seulement si $f'(x) \leq 0$ pour tout $x \in I$.

65 IX.4. Calcul différentiel

Exemple IX.20

En guise d'illustration, considérons la vitesse v en fonction du temps t d'un objet en chute libre sans vitesse initiale, à la surface de la Terre :

$$v(t) = -gt$$

avec g une constante physique (9,81 m · s⁻²). On voit donc que lorsque t va **doubler** en passant d'une seconde à **deux** secondes, la vitesse sera **deux** fois plus petite (-2g au lieu de -g). Le raisonnement est identique si l'on triple, quadruple,... le temps. On dit donc que l'évolution de la vitesse en fonction du temps est **linéaire**, et sa représentation graphique dans un repère orthonormé est une droite. La dérivée de $[t \mapsto v(t)]$ par rapport à t sera $[t \mapsto -g]$, avec g la constante positive donnée plus haut. La représentation graphique de v dans un repère orthonormé sera donc une droite décroissante avec un coefficient directeur -g identique en tout t. Cela s'interprète comme le fait que la vitesse décroît de manière constante à travers le temps.

La hauteur z du même objet en fonction du temps s'écrit

$$z(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + z_0$$

où z_0 est la hauteur initiale de l'objet, en mètres. Cette fois-ci, on voit que la dérivée de la fonction d'intérêt est -gt. On constate donc que la hauteur z(t) va décroître (g et t sont positifs, donc -gt est négatif pour toute valeur de t), mais que le coefficient directeur de la tangente à z(t) en t, c'est-à-dire -gt, n'est pas constante et dépend du temps : au début la pente est douce (faible valeur de t), et la pente augmente avec t. Cela signifie qu'à incrément de temps égal la variation de z(t) est de plus en plus grande, c'est-à-dire, graphiquement, que z(t) décroît plus « brutalement », ou plus « vite » (on parle de vitesse de variation) quand t augmente.

On remarquera que la dérivée de z, $[t \mapsto -gt]$, correspond à l'expression de la vitesse en fonction du temps. Sa dérivée, -g, correspond donc à la dérivée de la dérivée de z. On parle de dérivée seconde. Puisque la dérivée seconde de la position (ici, la hauteur car nous ne considérons qu'une dimension et qu'il s'agit de la hauteur de l'objet) est la dérivée première de la vitesse, on peut interpréter la dérivée seconde de la position, soit la dérivée première de la vitesse, comme une mesure de la variation de la vitesse, c'est-à-dire l'accélération a(t).

Les dérivées temporelles se notent souvent par un point :

$$\dot{z}(t) = v(t), \qquad \ddot{z}(t) = \dot{v}(t) = a(t).$$
 (IX.6)

Concavité et extremum

Tandis que la dérivée première nous renseigne sur le caractère croissant/décroissant d'une fonction et sur sa vitesse de variation, la dérivée seconde d'une fonction nous renseigne sur la **concavité** de la fonction : si la concavité de la fonction est tournée vers le haut, la dérivée seconde sera positive, alors qu'elle serait négative pour une concavité tournée vers le bas.

Ces deux informations sont importantes, notamment lorsque l'on cherche un extremum d'une fonction : lorsque la fonction passe par un minimum ou par un maximum, sa dérivée première s'annule. Si la dérivée seconde en ce point-là est positive, c'est que la concavité est tournée vers le haut et nous avons trouvé un minimum; si la dérivée seconde est négative, c'est que la concavité est tournée vers le bas et nous avons trouvé un maximum.

Remarque IX.6

Ce n'est pas parce que la dérivée première d'une fonction s'annule que nous avons un extremum : par exemple, la dérivée première de $[x \mapsto x^3]$ s'annule en x = 0, mais sa dérivée seconde également.

Remarque IX.7

S'il existe plusieurs minima ou maxima, on veillera bien à différencier un minimum/maximum **global** (le plus bas/haut) d'un minimum/maximum **local** (n'importe quel autre).

Points d'inflexion

Il est possible de détecter un changement de concavité en un point d'une fonction : la tangente traverse

la courbe et la dérivée seconde s'annule en ce point. On appelle cela un **point d'inflexion**. Il peut être **horizontal** lorsque la dérivée première s'annule également en ce point (comme dans x^3) ou **oblique** (voir figure IX.6) dans le cas contraire. Un point d'inflexion **vertical** peut exister lorsque la dérivée première et la dérivée seconde n'existent pas en un point.

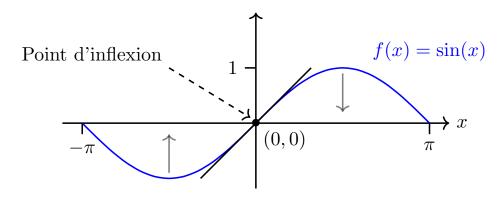


FIGURE IX.6 – Illustration du changement de concavité au passage d'un point d'inflexion oblique.

Tandis que les dérivées première et seconde d'une fonction f peuvent s'écrire

$$f'(x) = \frac{df}{dx}$$
 et $f''(x) = \frac{d^2f}{dx^2}$, (IX.7)

les dérivées d'ordre supérieur s'écrivent

$$f^{(k)}(x) = \frac{d^k f}{dx^k}.$$
 (IX.8)

IX.4.4 Étude de graphe

Nous avons maintenant plusieurs outils nous permettant de caractériser le graphe d'une fonction : nous pouvons tout d'abord, connaissant l'expression de la fonction en sa variable, déterminer son domaine de définition et son domaine image, ce qui, entre autres choses, nous aide à comprendre pourquoi la fonction sera représentée graphiquement dans un repère du plan dont les abscisses sont éventuellement limitées à un intervalle choisi. Considérant l'ensemble du domaine de définition de la fonction, nous pouvons dresser une table reprenant, éventuellement en définissant des sous-intervalles, quelles sont les caractéristiques de la fonction à l'intérieur de ces (sous-)intervalles : son signe, sa croissance, sa concavité. Nous pouvons également nous appuyer sur le calcul des racines, des extrema et points d'inflexion pour délimiter les sous-intervalles à considérer.

Définitions

Ensemble de définition

C'est l'ensemble \mathcal{D}_f des réels en lesquels la fonction f est définie. Par exemple, l'ensemble de définition de la fonction définie par $f(x) = \ln |\sin x|$ est $\mathcal{D}_f = \mathbb{R} \setminus \{k\pi \mid k \in \mathbb{Z}\}.$

Ensemble d'étude

C'est une partie \mathcal{D}_e de \mathcal{D}_f sur laquelle il suffit de connaître f pour connaître f sur \mathcal{D}_f . Ce sont des propriétés de la fonction f qui permettent de déterminer \mathcal{D}_e .

Éléments de symétrie

Si la fonction est paire, il suffit d'étudier f sur $[0, +\infty[\cap \mathcal{D}_f \text{ (ou }] -\infty, 0] \cap \mathcal{D}_f)$ et la droite d'équation x = 0 est un axe de symétrie de la courbe représentative.

Si la fonction est impaire, il suffit d'étudier f sur $[0, +\infty[\cap \mathcal{D}_f \text{ (ou }]-\infty, 0]\cap \mathcal{D}_f)$ et l'origine O est centre de symétrie de la courbe représentative.

Périodicité

Si f est périodique de période T, la courbe représentative est invariante par toute translation de vecteur $\overrightarrow{u}(kT,0)$ avec $k \in \mathbb{Z}$, et il suffit d'étudier f sur un ensemble de la forme

 $[\alpha, \alpha + T] \cap \mathcal{D}_f$, où α est quelconque. Si de plus f présente une symétrie par parité, on peut choisir $\alpha = -T/2$, et il suffit d'étudier f sur un ensemble de la forme $[0, T/2] \cap \mathcal{D}_f$.

67 IX.4. Calcul différentiel

Étude des variations de f

Le plus souvent, la fonction f est dérivable sur des intervalles contenus dans l'ensemble d'étude. L'étude du signe de f', qui peut nécessiter le recours à l'étude des variations d'une autre fonction, donne les variations de f.

Étude aux bornes de \mathcal{D}_e

Généralement, \mathcal{D}_e est une réunion d'intervalles. L'étude aux bornes consiste alors à étudier la fonction aux bornes de ces intervalles. On doit alors préciser en ces bornes les limites de f, la continuité, la dérivabilité.

Tableau de variations

On résume dans un tableau de variations les différentes propriétés de la fonction f sur \mathcal{D}_e : croissance, décroissance, extrema, limites aux bornes.

Exemple IX.21

Pour illustrer cela, nous avons choisi la fonction f définie par $f(x) = \sin x + \sin(2x)$.

- 1. On a $\mathcal{D}_f = \mathbb{R}$.
- 2. La fonction f est périodique de période 2π . Elle est impaire. On choisit donc $\mathcal{D}_e = [0, \pi]$.
- 3. Les zéros de f sont $(k \in \mathbb{Z})$:

$$\left\{k\pi, -\frac{2\pi}{3} + k\pi, \frac{2\pi}{3} + k\pi\right\}.$$

Sur \mathcal{D}_e , nous avons donc 0, $\frac{2\pi}{3}$ et π (en particulier, nous noterons $x_0 = 2\pi/3$).

4. La fonction est continue et dérivable sur \mathbb{R} . On a

$$f'(x) = \cos x + 2\cos 2x = \cos x + 2(2\cos^2 x - 1)$$

$$= 4\cos^2 x + \cos x - 2.$$
(IX.9)

Les zéros de f' sont donc donnés par l'équation

$$4\cos^2 x + \cos x - 2 = 0.$$

Posons $\cos x = t$. L'équation devient

$$4t^2 + t - 2 = 0$$

dont les solutions sont

$$t_1 = \frac{-1 + \sqrt{33}}{8} \approx 0,59 \text{ et } t_2 = \frac{-1 - \sqrt{33}}{8} \approx -0,84.$$

Ces deux solutions appartiennent à [-1, 1]. On a donc deux solutions x_1 et x_2 telles que

$$\cos x_1 = \frac{-1 + \sqrt{33}}{8} \text{ et } x_1 \in \left] 0, \frac{\pi}{2} \right[\subset \mathcal{D}_e$$

$$\cos x_2 = \frac{-1 - \sqrt{33}}{8} \text{ et } x_2 \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi \right] \subset \mathcal{D}_e,$$

car cos est une bijection de $[0, \pi]$ sur [-1, 1], avec $t_1 > 0$ et $t_2 < 0$. On obtient alors le tableau de variations de f (voir tableau IX.7).

5. On peut alors tracer le graphe de f sur $[0, \pi]$ et on complète par des translations de vecteur $\overrightarrow{u_k}$ $(2k\pi, 0)$, avec $k \in \mathbb{Z}$. La représentation graphique de f est donnée à la figure IX.8.

IX.4.5 Formule de Taylor

Si une fonction est n fois dérivable au voisinage d'un point a de \mathbb{R} alors,

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(a) + \frac{(x - a)^2}{2!}f^{(2)}(a) + \frac{(x - a)^3}{3!}f^{(3)}(a) + \dots + \frac{(x - a)^n}{n!}f^{(n)}(a) + R(x).$$
(IX.11)

x	0	x_1	$\frac{2\pi}{3}$	x_2		π
$\cos x = t$	1	$t_1 \approx 0.59$	-1/2	$t_2 \approx -0.84$		-1
$4t^2 + t - 2$	+	0	_	0	+	
f'(x)	+	0	-	0	+	
f(x)	0	$f(x_1)$	0	$f(x_2)$, ⁰

FIGURE IX.7 – Tableau de variations de la fonction $[x \mapsto f(x) = \sin x + \sin(2x)]$.

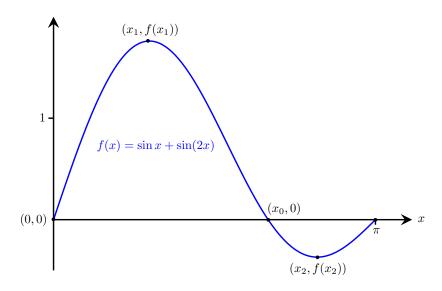


FIGURE IX.8 – Illustration de l'étude du graphe de $f(x) = \sin x + \sin(2x)$.

Le reste R(x) est tel que $R(x)/(x-a)^n$ tend vers 0 lorsque $x \to a$.

Cette formule est très importante puisqu'elle permet de connaître le comportement d'une fonction autour d'un point a grâce aux dérivées de la fonction en ce point. Elle permet d'effectuer un développement limité en x = a, c'est à dire d'approximer f(x) par une fonction polynômiale prise en a.

Donnons quelques exemples. Comme $\exp x$ est infiniment dérivable sur \mathbb{R} , on peut la développer en x=0 et obtenir

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}.$$
 (IX.12)

De même, pour la fonction $\cos x$, en développant autour de x=0, on obtient

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!}$$
 (IX.13)

IX.5 Dérivée partielle

IX.5.1 Définition

La notion de dérivée peut s'étendre au cas de fonctions de plusieurs variables, par exemple aux fonctions du type

$$(x,y) \longmapsto f(x,y).$$

On appelle alors dérivée partielle de $[(x,y) \mapsto f(x,y)]$ par rapport à la variable x le taux d'accroissement de f en un point (x_0, y_0) lorsque x varie et que y reste constant (et égal à y_0):

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h, y_0) - f(x_0, y_0)}{h}$$
(IX.14)

De même, la dérivée partielle de $[(x,y)\mapsto f(x,y)]$ par rapport à y au point (x_0,y_0) est définie par

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0, y_0 + h) - f(x_0, y_0)}{h}$$
(IX.15)

Les dérivées partielles de f(x,y) donnent donc une idée de la manière dont cette fonction varie lorsque toutes les variables sont fixées sauf celle qui est précisément indiquée dans la notation de la dérivée partielle : par exemple, $\frac{\partial f}{\partial x}$ indique que seul x est censé varier dans le calcul du taux d'accroissement de f.

IX.5.2 Exemples

Prenons l'exemple de $f(x,y) = xy^2 + y + 1$. Alors

$$\frac{\partial f}{\partial x} = y^2 \text{ et } \frac{\partial f}{\partial y} = 2xy + 1$$

Pour la première dérivation, nous avons considéré que y est une constante dans la mesure où x est la variable par rapport à laquelle la dérivation s'effectue. Les termes y^2 , y et 1 sont donc des "constantes", d'où le résultat. En revanche, dans la dérivation partielle par rapport à y, c'est x et 1 qui sont considérés comme "constants" et y comme variable. Donc, par exemple,

$$\frac{\partial}{\partial y}(xy^2) = x\frac{\partial}{\partial y}(y^2) = 2xy.$$

Prenons un autre exemple. Si $g(x,y) = y\cos(xy)$, alors

$$\frac{\partial g}{\partial x} \left(\frac{\pi}{2}, 1 \right) = -y^2 \sin(xy) \Big|_{\left(x = \frac{\pi}{2}, y = 1 \right)} = -1$$

et

$$\frac{\partial g}{\partial y}\left(\frac{\pi}{2},1\right) = \left[\cos(xy) - yx\sin(xy)\right]_{\left(x=\frac{\pi}{2},y=1\right)} = -\frac{\pi}{2}.$$

Dans l'exemple précédent, le trait vertical suivi des parenthèses signifie que l'on prend la valeur de l'expression qui précède et qu'on l'évalue en $x = \pi/2$ et en y = 1.

IX.5.3 Différentielle

Nous introduisons ici un outil utile du calcul différentiel sans prétendre en donner une définition rigoureuse. La différentielle d'une fonction de plusieurs variables généralise celle de nombre dérivé d'une fonction d'une seule variable. Elle permet en ce sens, "quand tout va bien", de calculer l'accroissement (infinitésimal) de la valeur d'une fonction de plusieurs variables lors d'un changement (infinitésimal) du point où on l'évalue.

Prenons l'exemple d'une fonction f de 2 variables. Comment relier la valeur de $f(x_0 + h, y_0 + k)$ à celle de $f(x_0, y_0)$ si h et k sont "petits"? Pour une fonction d'une seule variable, on connait la réponse à cette question. En effet, pourvu que f soit suffisamment dérivable en x_0 , on a

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + O(h^2)$$

où le terme $O(h^2)$ [parfois noté $O(h^2)$] indique des termes d'ordre h^2 (et au-delà) comme l'indique la formule

de Taylor (IX.11).

Pour traiter le cas de la fonction de 2 variables, évaluons $f(x_0 + h, y_0 + k)$. En considérant y fixé à la valeur $y_0 + k$ et en appliquant la formule de Taylor à l'ordre 1 à la variable x, on obtient

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0 + k) + h \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0 + k) + O(h^2).$$

La dérivée partielle de f par rapport à x a été utilisée dans le développement précédent car la valeur de y était fixée, ce qui est bien la signification de la dérivée partielle. Supposons maintenant x fixé à la valeur x_0 et développons $f(x_0, y_0 + k)$. On obtient de la même manière

$$f(x_0, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + k \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) + O(k^2).$$

Enfin développons $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0 + k)$. Comme x est fixé à la valeur x_0 , on a

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0 + k) = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) + O(k).$$

On obtient donc finalement

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + h \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) + k \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) + O(h^2) + O(h^2) + O(hk)$$
 (IX.16)

Ainsi, en se limitant à l'ordre linéaire en h et k, l'accroissement de la valeur de f lorsqu'on passe du point (x_0, y_0) au point voisin $(x_0 + h, y_0 + k)$ est donné par

$$f(x_0 + h, y_0 + k) - f(x_0, y_0) \simeq h \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) + k \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)$$
 (IX.17)

Dans la limite où h et k tendent vers 0, la formule ci-dessus devient de plus en plus précise. Notons h = dx et k = dy les changements infinitésimaux en x et y, ainsi que df celui en f. On définit alors la différentielle df de la fonction f au point (x_0, y_0) par la quantité

$$df(x_0, y_0) = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) dx + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) dy$$
(IX.18)

Cette quantité exprime la variation infinitésimale de f lorsqu'on l'évalue en des points infinitésimalement voisins, (x_0, y_0) et $(x_0 + dx, y_0 + dy)$.

Notons que la notion de différentielle se généralise à des fonctions d'un nombre quelconque de variables et qu'on l'utilise également pour des vecteurs, en particulier en physique (par exemple $d\vec{r}$ pour un déplacement infinitésimal dans l'espace).

IX.5.4 Exemple

Reprenons l'exemple précédent de $f(x,y) = xy^2 + y + 1$. La différentielle de f au point (x,y) est donnée par

$$df(x,y) = \frac{\partial f}{\partial x}(x,y) dx + \frac{\partial f}{\partial y}(x,y) dy = y^2 dx + (2xy+1)dy$$
 (IX.19)

Evaluons approximativement la valeur de f(1.02, 1.99). Manifestement cette valeur doit être proche de $f(1,2) = 1 \times 2^2 + 2 + 1 = 7$. D'autre part, les dérivées partielles donnent

$$\frac{\partial f}{\partial x}(1,2) = 4$$

et

$$\frac{\partial f}{\partial y}(1,2) = 5.$$

D'après la formule (IX.17), on a donc $f(1.02, 1.99) - f(1,2) \simeq 4 \times 0.02 + 5 \times (-0.01) = 7.03$. La valeur exacte est en réalité f(1.02, 1.99) = 7.029302... On voit qu'on a obtenu une bonne approximation du résultat puisque l'écart relatif est ici de 0.01%.

IX.5. Dérivée partielle

IX.5.5 Un mot sur les formes différentielles

Dans beaucoup d'ouvrages de physique, le nom donné à df est celui de différentielle exacte. On trouve aussi le nom différentielle totale exacte. En effet, on peut aussi s'intéresser à des formes différentielles définies par

$$P(x,y)dx + Q(x,y)dy$$

où P et Q sont des fonctions quelconques de x et y. Il n'est généralement pas vrai que cette forme différentielle est la différentielle d'une fonction f. En effet, pour que ce soit vrai, il faut que l'on trouve une fonction f telle que

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

et telle que

$$Q(x,y) = \frac{\partial f}{\partial y}(x,y).$$

Le théorème de Schwarz (IX.20) que nous verrons ci-après implique alors que

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x}.$$

Cette condition est en fait suffisante pour que la différentielle

$$P(x,y)dx + Q(x,y)dy$$

soit exacte. On peut alors écrire

$$df(x,y) = P(x,y)dx + Q(x,y)dy.$$

Lorsque les différentielles ne sont pas exactes, les physiciens les notent volontiers avec un δ au lieu d'un d droit ². Par exemple, soit

 $\delta f = ydx + 2xdy.$

Comme

 $\frac{\partial y}{\partial y} = 1$

et

$$\frac{\partial 2x}{\partial x} = 2,$$

ces dérivées sont différentes et la forme différentielle δf n'est pas exacte. En revanche si

$$\delta f = xdx + ydy$$

alors

$$\frac{\partial x}{\partial y} = 0 = \frac{\partial y}{\partial x}$$

donc la différentielle est exacte. On a donc

$$\delta f = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy = df$$

et le lecteur peut vérifier que la fonction f est donnée par

$$f(x,y) = (x^2 + y^2)/2 + C$$

où C est une constante quelconque.

$$\delta W = \vec{F} \cdot d\vec{r} = F_x(\vec{r})dx + F_y(\vec{r})dy + F_z(\vec{r})dz$$

^{2.} Un exemple de différentielle parfois non exacte est celle du travail infinitésimal effectué par une force \vec{F} lors d'un déplacement $d\vec{r}$ dans l'espace,

[.] Lorsqu'il existe une fonction $W(\vec{r})$ telle que δW est égale à la différentielle exacte dW, les physiciens appellent $E_p(\vec{r}) = -W(\vec{r})$ l'énergie potentielle de la force $\vec{F}(\vec{r})$. Ils disent alors que la force \vec{F} dérive de l'énergie potentielle E_p car $F_x = -\frac{\partial E_p}{\partial x}$, $F_y = -\frac{\partial E_p}{\partial y}$, etc. La force est alors dite conservative.

IX.5.6 Dérivations multiples, théorème de Schwarz

Toutes les règles connues pour la dérivation sont encore valables pour la dérivation partielle puisque les variables autres que celle par rapport à laquelle on dérive sont considérées comme des paramètres constants lors de cette opération. En particulier, la notion de dérivée n-ième existe aussi, bien que la présence de plusieurs variables permet d'envisager cette fois des dérivées partielles d'ordre 2 et supérieur qui font intervenir plusieurs variables différentes. Par exemple,

 $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$

ou encore

$$\frac{\partial^3 f}{\partial y \partial x^2}.$$

La première de ces dérivées partielles est obtenue en dérivant f par rapport à y puis en dérivant le résultat obtenu par rapport à x. La deuxième est obtenue en dérivant f deux fois par rapport à x puis en dérivant le résultat par rapport à y. Toutefois, dès que les dérivées partielles de f existent et sont continues au point (x_0, y_0) , le théorème de Schwarz indique que l'ordre dans lequel les dérivations partielles successives sont effectuées n'a pas d'incidence sur le résultat. Ainsi, par exemple,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0).$$
 (IX.20)

En reprenant l'exemple précédent, $f(x,y) = xy^2 + y + 1$, on voit en effet que

$$\frac{\partial f}{\partial x} = y^2$$
 et donc $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) = 2y$

En procédant dans l'ordre inverse, on obtient

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2xy + 1$$
 et donc $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) = 2y$

c'est à dire le même résultat.

IX.5.7 Extremum d'une fonction de deux variables

Un des intérêts de la dérivée partielle est, par exemple, de permettre de calculer l'extremum (maximum ou minimum) d'une fonction de plusieurs variables. Nous donnons ici les résultats pour des fonctions de deux variables uniquement. On suppose que la fonction f(x,y) est deux fois dérivable au point (x_0,y_0) et que ce point est un point critique de f, c'est à dire que

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = 0$$
 et $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = 0$.

Alors, en notant

$$r = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0), \quad s = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0), \quad t = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0),$$

on obtient les résultats suivants :

- Si $s^2 rt < 0$ et r > 0 alors f admet un minimum en (x_0, y_0) .
- Si $s^2 rt < 0$ et r < 0 alors f admet un maximum en (x_0, y_0) .
- Si $s^2 rt > 0$ alors f n'admet ni maximum ni minimum en (x_0, y_0) mais y admet un point selle (cf. Fig. IX.9)
- Si $s^2 rt = 0$, on ne peut conclure directement.

Dans la mesure où une fonction de deux variables est deux fois dérivable, on voit que chercher ses extrema s'effectue en deux temps : on cherche d'abord ses points critiques (ceux où les dérivées partielles s'annulent) puis on calcule le signe de s^2-rt et, si il est négatif, on calcule celui de r pour savoir si il s'agit d'un minimum ou d'un maximum. C'est une généralisation de la méthode employée pour calculer les extrema des fonctions d'une seule variable.

73 IX.6. Calcul intégral

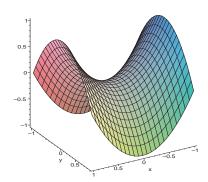


FIGURE IX.9 – Exemple de point selle $f(x,y)=x^2-y^2$: au point (x=0,y=0) les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x}(0,0)$ et $\frac{\partial f}{\partial y}(0,0)$ sont bien nulles. Mais on voit que la fonction atteint un minimum dans la direction x en O alors qu'elle atteint un maximum dans la direction y en ce point. Ce n'est donc ni un minimum ni un maximum. Le nom de point selle se réfère à la forme de la fonction, qui ressemble en effet à une selle autour de ce point.

IX.6 Calcul intégral

Au même titre que la dérivée, l'**intégrale** joue un rôle majeur en sciences. Nous rappellerons donc ici très brièvement le lien entre dérivation et primitivation, avant de connecter la notion de primitive à celle d'intégrale. Tout comme pour la dérivée, nous donnerons ici une interprétation graphique à l'intégrale, avant de rappeler quelques propriétés de l'intégration et quelques primitives usuelles, couramment utilisées dans les premières années de licence en sciences.

IX.6.1 Primitives : lien avec la dérivée

Soit f une fonction définie sur un intervalle I. Une **primitive** de f est une fonction F dérivable sur I vérifiant

$$\forall x \in I, F'(x) = f(x).$$

Exemple IX.22

Soient $I = [0, \pi/2]$ et $f : x \mapsto \cos x$. La fonction $F : x \mapsto \sin x$ est une primitive de f sur I car $F'(x) = \cos x$.

Une fonction f définie sur un intervalle I qui admet au moins une primitive F sur I en admet une infinité qui diffèrent toutes de F par une constante : si G est une autre primitive de f sur I, alors

$$\exists C \in \mathbb{R}, \ \forall x \in \mathbb{R}, \ G(x) = F(x) + C.$$

On note donc $\int f(x)dx$ une primitive de f à une constante près.

Proposition IX.1

Soit f une fonction de x, continue sur un intervalle \mathcal{I} donné. Il est possible d'écrire une fonction F telle que sa dérivée rende f:

$$F'(x) = f(x). (IX.21)$$

IX.6.2 L'intégrale et son interprétation graphique

Vous avez défini au lycée l'intégrale d'une fonction continue positive sur un intervalle [a, b] comme l'aire de la surface comprise entre l'axe des abscisses et le graphe de f(x) entre a et b. Lorsque la fonction est de signe variable, l'intégrale est une aire algébrique positive ou négative suivant la position de la courbe par

rapport à l'axe des abscisses. Cette quantité se note $\int_a^b f(x)dx$.

Vous avez admis au lycée que pour une fonction continue f sur un intervalle I, on a pour tout a et b de I:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = F(b) - F(a) = [F(x)]_{a}^{b}$$
 (IX.22)

On dit aussi que $\int_a^b f(x)dx$ est l'intégrale « définie » car on en définit les bornes, par opposition à l'intégrale indéfinie

$$\int f(x)dx = [x \mapsto F(x) + C] \tag{IX.23}$$

qui désigne la famille de primitives.

On dit que l'on utilise la valeur algébrique de l'aire entre la courbe et l'axe des abscisses car lorsque f(x) est positive, l'aire est comptée positivement, tandis qu'elle est comptée négativement lorsque f(x) est négative. Par exemple, figure IX.10, on peut retrouver la valeur de l'intégrale

$$\int_{a}^{x_0} f(x)dx \tag{IX.24}$$

en additionnant l'aire des portions grisées de gauche et de droite, et en leur soustrayant celle du centre.

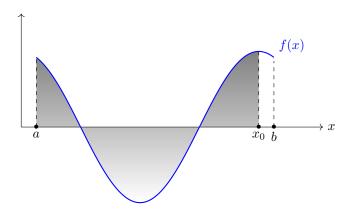


FIGURE IX.10 – Représentation graphique de la définition intuitive de l'intégrale.

Propriétés

— Formule de Chasles (convention) Si $a \geq b$, on pose

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = -\int_{b}^{a} f(x)dx.$$

Soient $f: I \to \mathbb{R}$ une fonction continue sur I et a, b, c des éléments de I. Alors,

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{c} f(x)dx + \int_{c}^{b} f(x)dx.$$

— L'intégrale de la somme est égale à la somme des intégrales.

$$\int_a^b (f(x) + g(x))dx = \int_a^b f(x)dx + \int_a^b g(x)dx;$$

^{3.} Le symbole d'intégration (le grand S) est une transposition de celui de sommation au calcul infinitésimal : on somme pour x variant infinitésimalement de a à b le produit de f(x) par cet incrément infinitésimal dx. On notera que l'on peut écrire de manière équivalente le « dx » avant ou après « f(x) » puisqu'il s'agit d'un produit.

— L'intégrale du produit par un réel est égale au produit de l'intégrale par ce réel.

$$\int_{a}^{b} \lambda f(x) dx = \lambda \int_{a}^{b} f(x) dx.$$

C'est la linéarité de l'intégrale. Cette dernière propriété est constamment utilisée :

$$\int_0^{7\frac{\pi}{5}} (\tan x + 3\cos x + 2x^2 + 1) dx = \int_0^{7\frac{\pi}{5}} dx \tan x + 3 \int_0^{7\frac{\pi}{5}} dx \cos x + 2 \int_0^{7\frac{\pi}{5}} x^2 dx + \int_0^{7\frac{\pi}{5}} 1 dx.$$

— Positivité : soit f une fonction continue et **positive** sur I :

$$\forall x \in I, \ f(x) \ge 0.$$

Soient a et b deux éléments de I, alors

$$(a \le b) \implies \left(\int_a^b f(x) dx \ge 0 \right).$$

On en déduit par la linéarité de l'intégrale la propriété suivante :

— Soient f et g deux fonctions continues sur I un intervalle de \mathbb{R} et telles que :

$$\forall x \in I, \ f(x) \le g(x).$$

Alors,

$$\int_a^b f(x)dx \le \int_a^b g(x)dx \text{ pour } a \le b.$$

— On rappelle que la fonction ln est la primitive définie sur \mathbb{R}_+^* de $[x \mapsto 1/x]$ qui s'annule en x = 1. Sachant que

$$\forall x \in [1, +\infty[, \ \frac{1}{x} \le 1,$$

on en déduit

$$\forall x \in [1, +\infty[, \ln x = \int_{1}^{x} \frac{dt}{t} \le x - 1.$$

On peut ensuite montrer que cette dernière inégalité est vraie sur tout \mathbb{R}_+^* en utilisant les propriétés de l'intégrale.

— Valeur absolue de l'intégrale : soit f une fonction continue sur I un intervalle de \mathbb{R} . Alors,

$$\left| \int_{a}^{b} f(x) dx \right| \le \int_{a}^{b} |f(x)| dx.$$

IX.7 Primitivation et méthodes de calcul d'intégrales

Pour calculer une intégrale, il faut trouver une fonction F telle que F'=f. En effet, une fois celle-ci déterminée, on obtient

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = F(b) - F(a)$$
(IX.25)

d'où l'intérêt de la table IX.5 qui liste F(x) pour quelques fonctions peu usuelles. Les primitives de fonctions usuelles seront données plus loin.

La fonction F, définie à une constante près 4 , est appelée primitive de f. On la note souvent comme une

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = F(b) - F(a) = (F(b) + K) - (F(a) + K) = \tilde{F}(b) - \tilde{F}(a).$$

^{4.} La constante qu'on peut librement ajoutée à la primitive disparaît de toute manière dans le calcul d'une intégrale définie puisque, quelle que soit la constante K et deux primitives F et $\tilde{F} = F + K$ de f,

intégrale indéfinie, c'est à dire dont on ne mentionne pas les bornes d'intégration :

$$F(x) = \int f(x) \, dx.$$

f(x)	F(x)	Domaine
$\frac{1}{1+x^2}$	$\arctan x$	$x \in \mathbb{R}$
$\frac{1}{1-x^2}$	$\frac{1}{2} \ln \left \frac{1+x}{1-x} \right $	$ x \neq 1$
$\frac{1}{\sqrt{a^2 + x^2}}$		$(x,a) \in \mathbb{R}^2$
$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$\arcsin x$	$x \in]-1,1[$
$\cosh x$	$\sinh x$	$x \in \mathbb{R}$
$\sinh x$	$\cosh x$	$x \in \mathbb{R}$
$\tanh x$	$\ln(\cosh x)$	$x \in \mathbb{R}$

Tableau IX.5 – Primitives peu usuelles. Le domaine de définition indiqué est celui de la primitive.

Notons également qu'en raison de la règle de dérivation des fonctions composées, la primitive d'une fonction s'écrivant comme f(x) = G'(u(x))u'(x) est

$$F(x) = \int G'(u(x))u'(x) \, dx = G(u(x))$$
 (IX.26)

Par exemple, la primitive de la fonction

$$x \longmapsto f(x) = \sin(x)\cos(x),$$

qui peut encore s'écrire

$$x \longmapsto f(x) = \sin x \frac{d}{dx} (\sin x),$$

est tout simplement

$$x \longmapsto F(x) = (\sin^2 x)/2 + C.$$

Il est intéressant de noter que comme

$$f(x) = \sin(x)\cos(x) = (\sin 2x)/2,$$

on a également

$$F(x) = -(\cos 2x)/4 + K,$$

soit encore $F(x) = (\sin^2 x)/2 - \frac{1}{4}$. On voit ici que la primitive F(x) est bien la même que celle calculée précédemment à une constante près (ici $-\frac{1}{4}$).

IX.8 Intégration par partie

Le principe de l'intégration par partie est l'utilisation de l'identité :

$$\frac{d}{dx}(f(x)g(x)) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x).$$

En intégrant ce résultat entre les bornes a et b, on trouve

$$\int_{a}^{b} f(x)g'(x) dx = [f(x)g(x)]_{a}^{b} - \int_{a}^{b} f'(x)g(x) dx,$$
 (IX.27)

où par définition,

$$[h(x)]_a^b := h(b) - h(a).$$
 (IX.28)

Ce résultat permet de simplifier certains calculs d'intégrales ou de primitives.

Exemple IX.23

Cherchons la primitive H(x) de $h(x) = \ln x$ pour x > 0. Utilisons le fait que $\ln x = 1 \times \ln x$. Alors on peut considérer que $f(x) = \ln x$ et que g'(x) = 1 dans l'expression (IX.27). Donc g(x) = x et f'(x) = 1/x. Ainsi, il vient

$$H(x) = \int \ln x \, dx = [x \ln x] - \int x \frac{1}{x} \, dx = x \ln x - x.$$

IX.9 Intégration par changement de variable

Si f est une fonction continue et g une fonction dérivable de dérivée continue sur [a,b] dont l'image est contenue dans le domaine de définition de f, on peut utiliser la règle de dérivation des fonctions composées pour changer de variable à l'intérieur d'une intégrale

$$\int_{a}^{b} f(g(x)) g'(x) dx = \int_{g(a)}^{g(b)} f(y) dy.$$
 (IX.29)

Ceci permet souvent de simplifier les calculs d'intégrales.

Exemple IX.24

Calculons l'intégrale suivante :

$$I = \int_0^2 2x \, e^{x^2} dx$$

En posant $u(x) = x^2$, les bornes de l'intégrale I deviennent u(0) = 0 (pour x = 0) et u(2) = 4 (pour x = 2). D'autre part, u'(x) = 2x ce que l'on peut encore traduire par du = 2xdx (rappel : $u'(x) = \frac{du}{dx}$). Donc

$$I = \int_0^2 2x \, e^{x^2} \, dx = \int_0^4 e^u \, du = e^4 - 1$$

Exemple IX.25

Calculons la primitive

$$J = \int \frac{dx}{\cos^2 x (1 + \tan x)}$$

En posant $u(x) = \tan x$, $u'(x) = 1 + \tan^2 x = \frac{1}{\cos^2 x}$ ce que l'on peut encore traduire par $du = \frac{dx}{\cos^2 x}$. De

$$\int \frac{du}{1+u} = [u \longmapsto \ln(|1+u|) + C],$$

on déduit

$$\int \frac{dx}{\cos^2 x (1 + \tan x)} = [x \longmapsto \ln(|1 + \tan x|) + D].$$

Il est indispensable lorsqu'on utilise un changement de variable dans le calcul d'une primitive de revenir à la variable originale dans le résultat final.

Exemple IX.26

Calculons

$$K = \int_0^1 \frac{dx}{1 + \sqrt{x}}$$

En posant $u(x) = \sqrt{x}$, on obtient u(0) = 0 et u(1) = 1. D'autre part, $u'(x) = 1/(2\sqrt{x})$ d'où dx = 2udu (ce qu'on aurait pu voir immédiatement en remarquant que $u^2 = x$). Donc

$$K = \int_0^1 \frac{2u}{1+u} \, du = \int_0^1 \frac{2(u+1)-2}{1+u} \, du \tag{IX.30}$$

$$= \int_0^1 \left(2 - \frac{2}{1+u}\right) du = \left[2u - 2\ln(|1+u|)\right]_0^1 = 2(1 - \ln(2))$$
 (IX.31)

IX.10 Fonctions usuelles

Nous allons revoir ici quelques types de fonctions très fréquemment utilisées en sciences, incluant les fonctions du premier et second degré, les fonctions puissance, l'exponentielle, le logarithme et les fonctions circulaires.

IX.10.1 Le premier degré

Parmi les fonctions polynômes les plus simples, la plus simple étant la fonction de degré zéro (c'est-à-dire une fonction constante), la fonction polynôme du premier degré peut s'écrire sous la forme

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
 (IX.32)

$$x \mapsto mx + p$$
 (IX.33)

où m et p sont deux réels. Reporter l'évolution des valeurs f(x) de f en fonction de x sur un graphique en utilisant un repère orthonormé consistera à tracer une **droite** d de **coefficient directeur** m et d'**ordonnée** à **l'origine** f(x=0)=p. Cette fonction sera dite **linéaire** lorsque l'ordonnée à l'origine sera nulle, et **affine** dans le cas contraire.

Prenons deux couples de coordonnées dans notre repère orthonormé : le point $A(x_A, f(x_A))$ et le point $B(x_B, f(x_B))$. Le coefficient directeur de la droite, m, se calcule alors comme le rapport

$$m = \frac{f(x_B) - f(x_A)}{x_B - x_A}.$$
 (IX.34)

Cela est représenté à la figure IX.11. L'ordonnée à l'origine est quant à elle la valeur f(x = 0), c'est-à-dire l'ordonnée lorsque la droite d coupe l'axe des ordonnées (l'axe vertical).

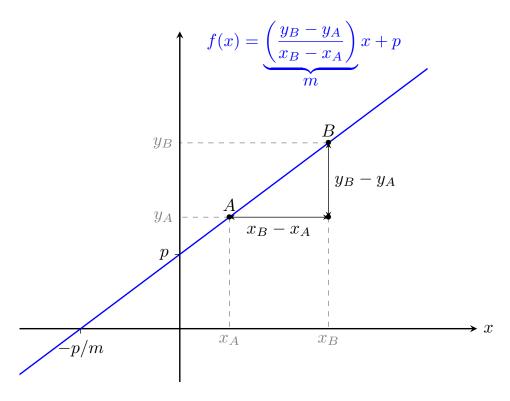


FIGURE IX.11 – Représentation graphique d'une fonction du premier degré dans un repère orthonormé.

Nous noterons qu'une droite peut être horizontale quand m=0, ou verticale (x=p) avec une pente indéterminée.

Fait intéressant, de l'expression de deux fonctions du premier degré

$$[x \mapsto f(x) = m_f x + p_f]$$

et

$$[x \mapsto g(x) = m_q x + p_q]$$

, nous pouvons détecter si leur représentation graphique dans un repère orthonormé consiste en deux droites qui sont parallèles $(m_f = m_g)$ ou perpendiculaires $(m_f = -1/m_g)$.

Il est possible de reconstruire l'expression d'une fonction du premier degré $[x \mapsto f(x) = mx + p]$ à partir

79 IX.10. Fonctions usuelles

de la connaissance de deux couples de valeurs 5 $(x_{0}, f(x_{0}))$ et $(x_{1}, f(x_{1}))$:

$$f(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + f(x_0),$$
 (IX.35)

que l'on peut remettre sous la forme y = mx + p

$$f(x) = \underbrace{\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}_{m} x + \underbrace{f(x_0) - x_0 \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}_{p}.$$
 (IX.36)

Considérant la représentation graphique de f dans un repère orthonormé, de trois points dont les coordonnées correspondent à trois couples du graphe de f, soient $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))$ et $(x_3, f(x_3))$, l'on sait qu'ils sont nécessairement alignés dans ce repère et qu'ils vérifient donc

$$\frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}.$$
 (IX.37)

Finalement, si l'on a l'expression de deux fonctions du premier degré

$$[x \mapsto f_1(x) = m_1 x + p_1]$$

et

$$[x \mapsto f_2(x) = m_2 x + p_2],$$

il est possible de trouver quelles sont les coordonnées auxquelles les droites correspondant à leur représentation graphique dans un repère orthonormé se croisent, si elles se croisent. Dans l'affirmative, deux droites qui se croiseraient auraient la même ordonnée dans ce repère, impliquant que $f(x_1) = f(x_2)$, ce qui nous permet d'égaler $m_1x + p_1$ et $m_2x + p_2$ pour trouver :

$$(m_1x + p_1 = m_2x + p_2) \iff \left(x = \frac{p_2 - p_1}{m_1 - m_2}\right).$$
 (IX.38)

Le x que nous venons d'isoler correspond à l'abscisse à laquelle les deux droites se croisent. Pour trouver l'ordonnée $(f(x_1) = f(x_2) = y_c)$ à laquelle les droites se croisent, il suffit d'injecter le résultat précédent dans l'expression de l'une ou l'autre des deux fonctions :

$$y_c = \underbrace{m_1 \frac{p_2 - p_1}{m_1 - m_2} + p_1}_{f_1} = \underbrace{m_2 \frac{p_2 - p_1}{m_1 - m_2} + p_2}_{f_2} = \underbrace{m_1 p_2 - m_2 p_1}_{m_1 - m_2}.$$
 (IX.39)

L'intersection de deux droites est illustrée à la figure IX.12.

IX.10.2 Le second degré

La représentation d'une fonction polynôme du second degré

on sait qu'en géométrie euclidienne, par deux points il ne peut passer qu'une seule droite.

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
 (IX.40)

$$x \mapsto ax^2 + bx + c \tag{IX.41}$$

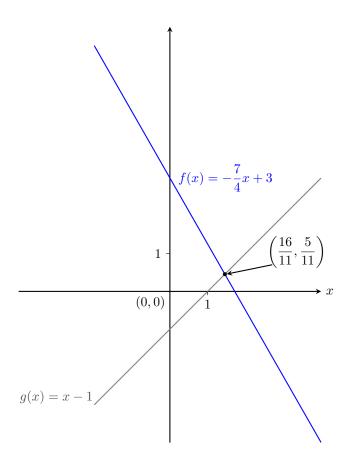
est, dans un repère orthonormé, une parabole.

Il est important de retenir que si a > 0, la concavité de la parabole est tournée vers le haut, tandis que si a < 0, la concavité de la parabole est tournée vers le bas (voir figure IX.13).

Si f possède un ou plusieurs **zéro**(s), c'est-à-dire une ou plusieurs valeurs de x telle(s) que f(x) = 0, nous pouvons les trouver en commençant par calculer ce que l'on appelle un « discriminant » :

$$\Delta = b^2 - 4ac. \tag{IX.42}$$

^{5.} Dans le cas d'une représentation graphique dans un repère orthonormé pour lequel la représentation de f serait une droite,



 $FIGURE\ IX.12-Exemple: coordonnées\ de\ croisement\ de\ deux\ droites\ représentant\ chacune\ graphiquement\ une\ fonction\ du\ premier\ degré\ dans\ un\ repère\ orthonormé.$

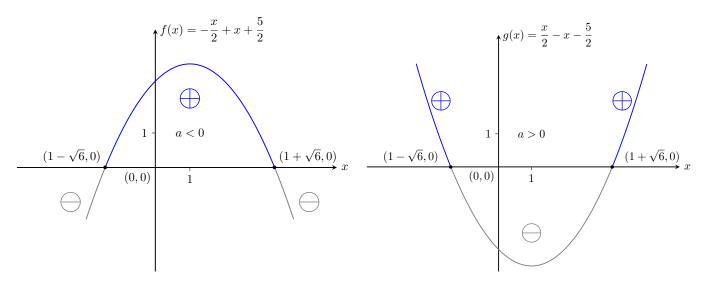


FIGURE IX.13 – Illustration des propriétés graphiques d'une fonction du second degré concave (gauche) et convexe (droite).

Nous avons alors plusieurs possibilités :

• $\Delta > 0$, et les zéros s'écrivent

$$x_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a},\tag{IX.43}$$

IX.10. Fonctions usuelles

avec, en considérant la somme et le produit des zéros

$$S = x_{+} + x_{-} = \frac{-b}{a}, \qquad P = x_{+}x_{-} = \frac{c}{a},$$
 (IX.44)

la possibilité d'écrire

$$\left(ax^2 + bx + c = 0\right) \Longleftrightarrow \left(x^2 - Sx + P = 0\right). \tag{IX.45}$$

Le trinôme du second degré peut quant à lui se réécrire

$$ax^{2} + bx + c = a(x - x_{+})(x - x_{-}),$$
 (IX.46)

où l'on voit que l'on est passé d'une somme de termes à un produit de facteurs : on dit que l'on a **factorisé** le trinôme du second degré.

L'extremum de la parabole aura pour coordonnées $\left(-\frac{b}{2a}, -\frac{\Delta}{4a}\right) = (x_e, f(x_e))$, ce qui permet à nouveau de réécrire le trinôme sous la forme dite canonique

$$ax^{2} + bx + c = a(x - x_{e})^{2} + f(x_{e})$$

c'est-à-dire

$$ax^{2} + bx + c = a\left(x + \frac{b}{2a}\right)^{2} - \frac{b^{2} - 4ac}{4a}.$$

• $\Delta = 0$, et nous avons une solution double :

$$x_r = \frac{-b}{2a}, \qquad ax^2 + bx + c = a(x - x_r)^2.$$
 (IX.47)

On appelle cela une solution double car on peut réécrire le trinôme du second degré comme $a(x-x_r)^2$, c'est-à-dire $a(x-x_r)(x-x_r)$, où l'on voit que x_r annule deux facteurs $(x-x_r)$, identiques (d'où « une » solution double).

• $\Delta < 0$, et il n'y a pas de solutions réelles.

IX.10.3 La fonction puissance entière $[x \mapsto x^n]$

Pour tout entier relatif $n \in \mathbb{Z}$, on définit la fonction $[x \mapsto x^n]$ qui est définie pour tout x réel si $n \ge 0$ et pour tout $x \ne 0$ si n < 0. Cette fonction vérifie les propriétés suivantes :

- elle est continue sur son domaine de définition;
- pour tout $n \in \mathbb{Z}$, elle est dérivable de dérivée $[x \mapsto nx^{n-1}]$;
- pour tout $n \geq 0$ et n pair, la fonction est convexe, décroissante sur \mathbb{R}_- et croissante sur \mathbb{R}_+ et on a les limites suivantes :

$$\lim_{x \to +\infty} x^n = +\infty, \ \lim_{x \to -\infty} x^n = +\infty;$$

— pour $n \ge 0$ et n impair, la fonction est croissante et bijective de $\mathbb R$ dans $\mathbb R$ et on a les limites suivantes :

$$\lim_{x \to +\infty} x^n = +\infty, \ \lim_{x \to -\infty} x^n = -\infty;$$

— pour tout $n \neq -1$, la fonction $[x \mapsto x^n]$ admet des primitives

$$\int x^n dx = \left[x \mapsto \frac{x^{n+1}}{n+1} + C\right];$$

— en particulier, pour un k réel,

$$\int kx^0 dx = \int kdx = [x \mapsto kx + C];$$

— pour n = -1, la fonction $[x \mapsto x^{-1}]$ admet pour primitives $[x \mapsto \ln |x| + C]$.

IX.10.4 Les fonctions polynomiales

Une fonction polynôme ⁶ $[x \mapsto P(x)]$ est une combinaison linéaire ⁷ de fonctions puissances entières naturelles $[x \mapsto x^n]$:

$$P: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

 $x \mapsto a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x_1 + a_0$

Selon cette écriture, le **degré** du polynôme est le degré le plus élevé de son terme non nul. Dans l'exemple ci-dessus, nous avions un polynôme de degré n si $a_n \neq 0$.

Une racine x_r d'une fonction polynôme est une valeur de son indéterminée qui annule la fonction polynôme : $P(x_r) = 0$.

IX.10.5 La fonction racine carrée $[x \mapsto \sqrt{x}]$

La fonction racine carré $[x \mapsto \sqrt{x}]$ est définie de \mathbb{R}_+ dans \mathbb{R}_+ . Elle est aussi notée en notation exponentielle, $[x \mapsto x^{\frac{1}{2}}]$ et cela a une utilité pour se rappeler les formules de dérivation ou d'intégration. Cette fonction vérifie les propriétés suivantes :

- elle est continue, strictement croissante de \mathbb{R}_+ dans \mathbb{R}_+ ;
- elle est dérivable sur \mathbb{R}_+^* de dérivée :

$$[x \mapsto \frac{1}{2\sqrt{x}} = \frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}];$$

— on a les limites suivantes :

$$\lim_{x \to +\infty} \sqrt{x} = +\infty, \ \lim_{x \to 0^+} \frac{d}{dx} \sqrt{x} = +\infty \ ;$$

— elle admet pour primitives $[x \mapsto \frac{2}{3}\sqrt{x^3} + C = \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} + C]$.

IX.10.6 La fonction exponentielle

La fonction exponentielle est définie comme la fonction $\exp : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, solution de l'équation différentielle y' = y et vérifiant $\exp(0) = 1$. On note souvent $\exp(x) = e^x$. Cette fonction vérifie les propriétés suivantes :

- elle est continue, strictement croissante de \mathbb{R} sur \mathbb{R}_{+}^{*} , convexe;
- de par sa définition, la fonction exp est indéfiniment dérivable et

$$\forall x \in \mathbb{R}, \exp'(x) = \exp(x);$$

— c'est une **bijection** (une application établissant entre deux ensembles une relation telle que tout élément de l'un soit l'image d'un seul élément de l'autre) de \mathbb{R} dans \mathbb{R}_+^* :

$$\forall y \in \mathbb{R}_{+}^{*}, \exists ! x \in \mathbb{R}, \exp(x) = y;$$

— elle admet des primitives :

$$\int e^x dx = [x \mapsto e^x + C].$$

— Quelques valeurs remarquables:

$$\exp(0) = 1, \ \exp(1) = e.$$

— On a les limites suivantes :

$$\lim_{x \to +\infty} e^x = +\infty, \ \lim_{x \to -\infty} e^x = 0, \ \lim_{x \to +\infty} \frac{e^x}{r} = +\infty.$$

Nous reprendrons plus loin la représentation graphique de cette fonction, et nous nous arrêterons pour le moment sur ses propriétés algébriques remarquables :

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, \ e^{x+y} = e^x \cdot e^y;$$

^{6.} Un polynôme est une somme de monômes. Par exemple, $2x^3$ est un monôme.

^{7.} Une combinaison linéaire d'objets est la somme de ces objets, chacun des objets ayant été multiplié par un nombre. Une combinaison linéaire ne fait pas apparaître de « terme croisé », produit de plusieurs des objets de départ (exemple : $a_3x_1x_2$).

83 IX.10. Fonctions usuelles

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ e^{-x} = \frac{1}{e^x};$$

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, \ e^{x-y} = \frac{e^x}{e^y};$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ \forall \alpha \in \mathbb{R}, \ e^{\alpha x} = (e^x)^{\alpha}.$$

IX.10.7 La fonction logarithme népérien

La fonction logarithme népérien est la primitive sur \mathbb{R}_+^* de la fonction $[x \mapsto 1/x]$ qui s'annule en 1 :

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \ \ln x = \int_1^x \frac{dt}{t}.$$

C'est aussi la réciproque de la fonction exp en base e et elle a des propriétés héritées de l'exponentielle :

- elle est continue, strictement croissante de \mathbb{R}_{+}^{*} sur \mathbb{R} , concave;
- elle est dérivable sur son domaine de définition de dérivée : $[x \mapsto \frac{1}{x}]$;
- c'est une bijection de \mathbb{R}_+^* sur \mathbb{R} ;
- elle admet des primitives :

$$\int \ln(x) \, dx = [x \mapsto x \ln x + C]$$

et

$$\int \ln|x| \, dx = [x \mapsto x(\ln|x| - 1) + C].$$

— on a les limites suivantes :

$$\lim_{x \to +\infty} \ln x = +\infty, \ \lim_{x \to 0} \ln x = -\infty, \ \lim_{x \to +\infty} \frac{\ln x}{x} = 0 \ ;$$

— quelques valeurs remarquables:

$$\ln 1 = 0$$
, $\ln e = 1$.

La fonction ln vérifie aussi des propriétés algébriques remarquables :

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad \ln(xy) = \ln x + \ln y;$$

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \quad \ln \frac{1}{x} = -\ln x;$$

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad \ln \frac{x}{y} = \ln x - \ln y;$$

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \quad \ln x^{\alpha} = \alpha \ln x.$$

IX.10.8 Les fonctions exponentielles de base a

Soit a un réel strictement positif. La fonction **exponentielle de base** a, notée $[x \mapsto a^x]$ est la fonction définie sur \mathbb{R} par

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ a^x = \exp(x \ln a) = e^{x \ln a}.$$

Cette fonction a des propriétés héritées de l'exponentielle :

- c'est la fonction constante 1 si a = 1;
- elle est continue, strictement croissante, si a > 1 (respectivement décroissante si a < 1) de \mathbb{R} sur \mathbb{R}_+^* , convexe;
- elle est dérivable :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ \frac{d}{dx}a^x = a^x \ln(a) \ ;$$

- c'est une **bijection** de \mathbb{R} dans \mathbb{R}_+^* ;
- elle admet des primitives : si $a \neq 1$,

$$\int a^x dx = \left[x \mapsto \frac{a^x}{\ln a} + C\right];$$

— quelques valeurs remarquables :

$$a^0 = 1, a^1 = a$$
:

— on a les limites suivantes, si a > 1:

$$\lim_{x \to +\infty} a^x = +\infty, \ \lim_{x \to -\infty} a^x = 0, \ ;$$

— on a les limites suivantes, si a < 1:

$$\lim_{x \to +\infty} a^x = 0, \ \lim_{x \to -\infty} a^x = +\infty.$$

Cette fonction a les mêmes propriétés algébriques que la fonction exp :

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, \ a^{x+y} = a^x \cdot a^y;$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ a^{-x} = \frac{1}{a^x};$$

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, \ a^{x-y} = \frac{a^x}{a^y};$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ \forall \alpha \in \mathbb{R}, \ a^{\alpha x} = (a^x)^{\alpha}.$$

Les plus connues sont en base $10 (10^x)$, en base $2 (2^x)$ et en base $e (e^x)$, avec e le nombre d'Euler – voir tableau IV.1). Les exponentielles dans ces bases ont de nombreuses applications intéressantes : c'est une exponentielle en base 10 qui est couramment utilisée pour lier la transmittance à l'absorbance en chimie ; c'est une exponentielle en base 2 qui sert communément à formaliser la conjecture 8 de Moore en informatique, et c'est une exponentielle en base e qui figure dans les lois de décroissance radioactive enseignées en physique ou de croissance de population enseignées en biologie.

IX.10.9 Les logarithmes de base a

Le logarithme (ou fonction log) en base a se définit par sa relation avec l'exponentielle :

$$\forall a \in \mathbb{R}_{+}^{*} \setminus \{1\}, \ \forall x \in \mathbb{R}_{+}^{*}, \ \forall y \in \mathbb{R}, \quad \log_{a}(x) = y \iff (a^{y} = x)$$
 (IX.48)

avec comme propriété essentielle

$$\log_a(a^x) = x = a^{\log_a(x)},\tag{IX.49}$$

ce qui permet aussi d'écrire :

$$\forall x \in \mathbb{R}_{+}^{*}, \log_{a}(x) = \frac{\ln x}{\ln a}.$$

Cette fonction a des propriétés héritées du logarithme :

- elle est continue, strictement croissante, si a > 1 (respectivement décroissante si 0 < a < 1) de \mathbb{R} sur \mathbb{R}^*_+ , convexe;
- elle est dérivable :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \frac{d}{dx} \log_a(x) = \frac{1}{x \ln a};$$

- c'est une **bijection** de \mathbb{R} dans \mathbb{R}_{+}^{*} ;
- quelques valeurs remarquables:

$$\log_a(1) = 0$$
, $\log_a(a) = 1$;

— on a les limites suivantes, si a > 1:

$$\lim_{x \to +\infty} \log_a(x) = +\infty, \lim_{x \to 0} \log_a(x) = -\infty;$$

— on a les limites suivantes, si 0 < a < 1:

$$\lim_{x \to +\infty} \log_a(x) = -\infty, \ \lim_{x \to 0} \log_a(x) = +\infty.$$

^{8.} Une conjecture est une assertion dont il n'existe pas de démonstration, mais qui est communément admise car non invalidée.

85 IX.10. Fonctions usuelles

La fonction \log_a vérifie aussi des propriétés algébriques remarquables :

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad \log_a(xy) = \log_a x + \log_a y;$$

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \quad \log_a \frac{1}{x} = -\log_a x;$$

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad \log_a \frac{x}{y} = \log_a x - \log_a y;$$

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \quad \log_a x^\alpha = \alpha \log_a x.$$

Notations : conventionnellement, on notera le logarithme en base e de x « ln x », et le logarithme en base 10 de x tout simplement « log x ». Le premier se nomme logarithme naturel (ou népérien) tandis que le second se nomme le logarithme décimal.

Les fonctions exponentielles et logarithmes ont un graphe facilement identifiable, que nous avons reproduit à la figure IX.14 dans deux cas de figure : celui où la base est supérieure à l'unité, et celui où la base est comprise entre zéro et l'unité.

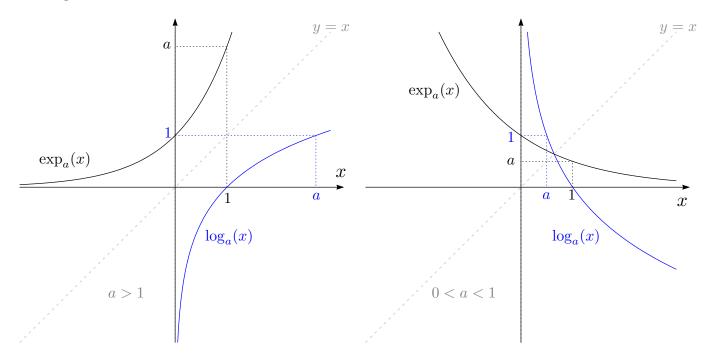


FIGURE IX.14 – Représentation graphique des fonctions exponentielles et logarithmes en base a, dans le cas où a est plus grand que l'unité (gauche) ou compris entre zéro et l'unité (droite).

IX.10.10 Les fonctions trigonométriques

Dans le chapitre VII, nous rappelions ce que sont le sinus, le cosinus et la tangente d'un angle de mesure α (ou x). Si l'on considère toutes les valeurs de α (ou x) sur le cercle trigonométrique et y associons une valeur de sinus, cosinus et tangente, nous obtenons des fonctions définies sur l'intervalle $[0, 2\pi]$ ou sur des parties de $[0, 2\pi]$ pour la tangente et la cotangente. Ces fonctions peuvent être prolongées par périodicité sur $\mathbb R$ ou une partie de $\mathbb R$ si on imagine que l'on tourne indéfiniment sur le cercle trigonométrique.

La fonction sin

C'est une application impaire de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , périodique de période 2π et indéfiniment dérivable sur \mathbb{R} . Le graphe de cette fonction sur $[0, \pi]$ suffit pour construire le graphe complet, en tenant compte de la symétrie par rapport à O et de la périodicité, et est représenté sur IX.15. On a les propriétés suivantes :

- elle est continue, impaire, périodique de période 2π sur \mathbb{R} ;
- elle est dérivable :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \sin' x = \cos x$$
:

— elle admet des primitives :

$$\int \sin(x) \, dx = [x \mapsto -\cos x + C] \; ;$$

— on a la limite suivante :

$$\lim_{x \to 0} \frac{\sin x}{x} = 1.$$

La fonction cos

C'est une application paire de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , périodique de période 2π et indéfiniment dérivable sur \mathbb{R} . Le graphe de cette fonction sur $[0, \pi]$ suffit pour construire le graphe complet, (voir figure IX.15). On a les propriétés suivantes :

- elle est continue, paire, périodique de période 2π sur \mathbb{R} ;
- on a la limite suivante :

$$\lim_{x \to 0} \frac{\cos(x) - 1}{x} = 0;$$

— elle est dérivable :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \cos' x = -\sin x;$$

— elle admet des primitives :

$$\int dx \, \cos x = [x \mapsto \sin x + C].$$

La fonction tan

Elle est définie par $\tan x = \frac{\sin x}{\cos x}$. Son ensemble de définition est $\mathbb{R} \setminus \left\{ (2k+1)\frac{\pi}{2} : k \in \mathbb{Z} \right\}$, car $\cos x$ s'annule pour toutes les valeurs de $\left\{ (2k+1)\frac{\pi}{2} : k \in \mathbb{Z} \right\}$. C'est une application impaire, périodique de période π et indéfiniment dérivable sur son domaine de définition. Le graphe de cette fonction sur $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ suffit pour construire le graphe complet, (voir figure IX.15). On a les propriétés suivantes :

- elle est continue sur son domaine de définition, impaire, périodique de période π ;
- elle est dérivable :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \ \tan' x = \frac{1}{\cos^2 x} = 1 + \tan^2 x;$$

— on a les limites suivantes :

$$\lim_{x \stackrel{<}{\to} \frac{\pi}{2}} \tan x = +\infty;$$

$$\lim_{x \to 0} \frac{\tan x}{x} = 1.$$

- $-\tan(\pi/6) = \sqrt{3}/3,$
- $-\tan(\pi/4) = 1$,
- $-\tan(\pi/3) = \sqrt{3}$.

IX.10.11 Les fonctions trigonométriques inverses

Nous concluons ces rappels sur les fonctions trigonométriques par les fonctions qui permettent de revenir à l'angle connaissant la valeur du cosinus, du sinus et/ou de la tangente.

Par définition, si $\cos(x) = u$ alors $x = \arccos u$. De même, si $\sin(x) = u$ alors $x = \arcsin u$ et si $\tan(x) = u$ alors $x = \arctan u$. Toutefois, il faut se souvenir que les fonctions sinus et cosinus ne sont pas en bijection avec l'angle sur l'ensemble de leur période. Dit simplement, à une valeur donnée du cosinus ou du sinus correspondent en général deux valeurs possibles de l'angle dans l'intervalle $[0, 2\pi[$. Par exemple, si on cherche les angles $x \in [0, 2\pi[$ tels que $\cos(x) = \sqrt{2}/2$, on trouve $x = \pi/4$ et $x = 7\pi/4$. Il faut donc, pour définir sans ambiguité la fonction inverse $x = \arccos u$, spécifier un intervalle de définition tel qu'à une valeur du cosinus ne corresponde qu'une seule valeur de l'angle, et de même pour le sinus et la tangente. On choisit généralement les intervalles de définition suivants :

$$0 \le \arccos u \le \pi, \quad -\pi/2 \le \arcsin u \le \pi/2, \quad -\pi/2 \le \arctan u \le \pi/2.$$
 (IX.50)

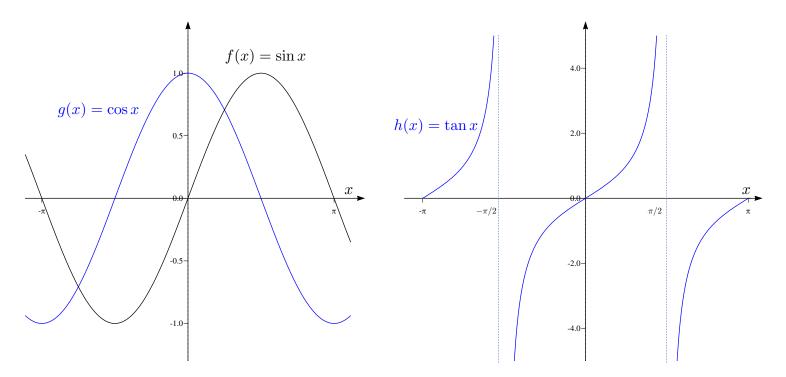


FIGURE IX.15 – Représentation graphique et périodicité des fonctions trigonométriques sin, cos et tan.

Remarque IX.8

Les fonctions $\operatorname{arccos} u$, $\operatorname{arcsin} u$ et $\operatorname{arctan} u$ sont généralement notées \cos^{-1} , \sin^{-1} et \tan^{-1} sur les calculettes. Ces fonctions n'ont aucun rapport avec $1/\cos x$, $1/\sin x$ et $1/\tan x$!

Remarque IX.9

Les fonctions trigonométriques inverses définies en (IX.50) sont exprimées en radian.

Remarque IX.10

Si on veut spécifier un angle dans l'intervalle $[0, 2\pi[$, il faut impérativement connaître les valeurs, à la fois de son sinus et de son cosinus! On retrouve alors la valeur de l'angle cherché de la manière suivante :

Soit
$$\cos x = u$$
 et $\sin x = v$, alors
$$\begin{cases} \sin v \ge 0, & x = \arccos u \\ \sin v < 0, & x = 2\pi - \arccos u \end{cases}$$
 (IX.51)

IX.11 Équations différentielles linéaires à coefficients constants

La théorie des équations différentielles est très importante dans tous les domaines scientifiques où, bien souvent, l'évolution de certaines quantités est régie par des équations liant ces quantités et leurs dérivées. Résoudre ces "équations différentielles" revient à trouver la ou les fonction(s) les satisfaisant. On peut parfois trouver des solutions analytiques à ces équations mais le plus souvent, lorsqu'elles sont compliquées, on procède à leur résolution numérique. Quoique très intéréssant, nous n'aborderons ce sujet que succinctement en fin de chapitre. Nous nous consacrons ici à la solution analytique des équations différentielles les plus simples, c'est à dire les équations différentielles linéaires à coefficients constants d'ordre quelconque, homogènes ou inhomogènes.

IX.11.1 Équations différentielles homogènes

Toute équation différentielle linéaire homogène à coefficients constants portant sur une fonction y(t) est de la forme

$$a_n y^{(n)}(t) + a_{n-1} y^{(n-1)}(t) + \dots + a_1 y'(t) + a_0 y(t) = 0$$
 (IX.52)

où $y^{(n)}$ représente la dérivée nième de y(t) et où les coefficients a_n sont des constantes généralement complexes. On montre (solution du problème de Cauchy) que lorsque n conditions initiales y(0), y'(0), ..., $y^{(n-1)}(0)$ sont spécifiées, l'équation différentielle (IX.52) a **une solution unique**, c'est à dire qu'il existe une et une seule fonction y(t) qui vérifie à la fois les conditions initiales et l'équation (IX.52).

La méthode de résolution de (IX.52) est à la fois simple et automatique. Il suffit en effet de calculer

toutes les racines complexes $r_k, k \in \{1, ..., n\}$ de l'équation caractéristique suivante :

$$a_n r^n + a_{n-1} r^{n-1} + \dots + a_1 r + a_0 = 0$$
 (IX.53)

dans laquelle les dérivées successives de $y^{(k)}(t)$ de l'équation (IX.52) ont simplement été remplacées par r^k . Une fois les racines r_k déterminées, on utilise le résultat suivant pour trouver la solution générale de l'équation (IX.52):

1. Si toutes les racines de l'équation caractéristique sont distinctes, la solution générale de l'équation homogène s'écrit

$$y(t) = A_1 e^{r_1 t} + A_2 e^{r_2 t} + \dots + A_n e^{r_n t}$$
(IX.54)

où les constantes (A_1, \ldots, A_n) sont à déterminer en fonction de n conditions initiales : y(0), y'(0), \ldots , $y^{(n-1)}(0)$.

2. Dans le cas plus général où certaines racines r_k sont multiples de multiplicité m_k , (c'est à dire m_k fois solution de l'équation caractéristique), la solution générale de l'équation homogène est une combinaison linéaire des fonctions $e^{r_k t}$, $te^{r_k t}$, $t^2 e^{r_k t}$, ..., $t^{m_k-1} e^{r_k t}$ ainsi que de toutes les autres fonctions exponentielles correspondant aux autres racines distinctes. Formellement,

$$y(t) = \sum_{k} \left(\sum_{m=0}^{m_k - 1} A_{k,m} t^m \right) e^{r_k t}$$
 (IX.55)

où les n constantes $A_{k,m}$ sont à déterminer en fonction des conditions initiales.

IX.11.1.A Exemples

- Solution de y'(t) + 2y(t) = 0 avec y(0) = 1.
 - On résout l'équation caractéristique r+2=0 d'où r=-2. Donc $y(t)=Ae^{-2t}$. Comme y(0)=1, on obtient A=1 soit $y(t)=e^{-2t}$.
- Solution de $y''(t) + \omega^2 y(t) = 0$, avec y(0) = 1 et y'(0) = 0.
 - On résout l'équation caractéristique $r^2 + \omega^2 = 0$ d'où $r_1 = i\omega$ et $r_2 = -i\omega$. Les racines r_1 et r_2 sont distinctes donc $y(t) = Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t}$. Comme y(0) = 1 et y'(0) = 0, on obtient A = B = 1/2 soit $y(t) = \cos(\omega t)$.
- Solution de y''(t) 2y'(t) + y(t) = 0 avec y(0) = 1 et y'(0) = 0.
 - On résout l'équation caractéristique $r^2 2r + 1 = 0$ d'où r = 1, qui est une solution double! La solution générale est donc $y(t) = Ae^t + Bte^t$. Comme y(0) = 1 et y'(0) = 0, on obtient A = 1 et B = -1 soit $y(t) = (1-t)e^t$.

IX.11.2 Equations inhomogènes

Il arrive fréquemment que l'équation différentielle régissant l'évolution de la quantité y(t) fasse intervenir un terme "de forçage", f(t). Par exemple, lorsqu'une voiture roule sur une route chaotique, les mouvements verticaux des roues se transmettent, via les amortisseurs, à la carrosserie de la voiture qui bouge en conséquence. Ce mouvement est typique d'un mouvement forcé. Dans le cas d'une équation différentielle linéaire à coefficients constants, le forçage est représenté par le second membre de l'équation (IX.52) qui n'est plus nul mais égal à la fonction f(t)

$$a_n y^{(n)}(t) + a_{n-1} y^{(n-1)}(t) + \dots + a_1 y'(t) + a_0 y(t) = f(t)$$
 (IX.56)

Ce type d'équation est appelé "équation inhomogène" en raison de la présence d'un second membre non nul. En se basant sur le fait que cette équation, tout comme l'équation homogène, est linéaire, on peut montrer que sa solution générale est la somme d'une solution particulière $y_p(t)$ qui vérifie l'équation inhomogène (IX.56) et de sa solution homogène $y_h(t)$ dont nous avons donné l'expression précédemment,

$$y(t) = y_p(t) + y_h(t). \tag{IX.57}$$

Reste toutefois à trouver cette solution particulière. C'est ce que nous faisons dans le paragraphe suivant pour un type particulier (mais toutefois assez général) de terme de forçage.

En outre, comme (IX.56) est linéaire, si le forçage est une somme de termes, $f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \cdots + f_s(t)$,

la solution particulière de (IX.56) s'écrit sous la forme $y_p(t) = y_{p,1}(t) + y_{p,2}(t) + \cdots + y_{p,s}(t)$ où chaque terme $y_{p,j}(t)$ est la solution particulière associée au forçage $f_j(t)$. Par exemple, si $f(t) = \cos t$, il suffit de l'écrire sous sa forme complexe, $f(t) = e^{it}/2 + e^{-it}/2$ et de chercher les solutions particulières associées à $f_1(t) = e^{it}/2$ et à $f_2(t) = e^{-it}/2$ séparément puis de les sommer pour obtenir la solution particulière désirée.

IX.11.2.A Forçage du type $f(t) = e^{\mu t}Q(t)$

Dans ce qui suit, nous traitons une forme particulière de forçage : $f(t) = e^{\mu t}Q(t)$ où μ est une constante complexe et $Q(t) = Q_0 + Q_1t + Q_2t^2 + \cdots + Q_dt^d$, une fonction polynôme de degré d. Cette forme $f(t) = e^{\mu t}Q(t)$ permet de traiter les forçages périodiques, pseudo-périodiques et polynomiaux. Le résultat est alors le suivant :

La solution particulière de l'équation

$$a_n y^{(n)}(t) + a_{n-1} y^{(n-1)}(t) + \dots + a_1 y'(t) + a_0 y(t) = e^{\mu t} Q(t)$$
 (IX.58)

est de la forme

$$y_p(t) = e^{\mu t} P(t), \text{ avec } P(t) = t^m \left(P_0 + P_1 t^1 + \dots + P_d t^d \right)$$
 (IX.59)

où m est la multiplicité de μ dans les racines de l'équation caractéristique (IX.53).

Donc, si μ est une racine de multiplicité m de (IX.53), la fonction polynôme $[t \mapsto P(t)]$ commence avec un terme de degré m et finit avec un terme de degré d+m. Si μ n'est pas une racine de (IX.53), m=0 et P(t) est simplement une fonction polynôme de degré d, comme $[t \mapsto Q(t)]$. Les coefficients P_i de la fonction polynôme $[t \mapsto P(t)]$ sont à déterminer en remplaçant la solution $y_p(t)$ (IX.59) dans l'équation (IX.58) et en identifiant les puissances de t une à une dans le premier et le second membre de (IX.58).

IX.11.2.B Exemples

— Solution de $y'(t) + 2y(t) = te^t$ avec y(0) = 1. La solution de l'équation caractéristique de l'équation homogène y'(t) + 2y(t) = 0, r + 2 = 0 est r = -2. La solution de l'équation homogène est donc $y_h(t) = Ae^{-2t}$. D'autre part, le forçage est te^t donc $\mu = 1$ ce qui n'est pas une racine de l'équation caractéristique et par conséquent m = 0. D'après les résultats précédents, la solution particulière est de la forme $y_p(t) = (P_0 + P_1 t)e^t$. En remplaçant dans l'équation inhomogène, on obtient alors $(P_1 + P_0 + P_1 t + 2P_0 + 2P_1 t)e^t = te^t$ d'où $P_1 = 1/3$ et $P_0 = -1/9$. La solution générale est donc de la forme $y(t) = y_h(t) + y_p(t) = Ae^{-2t} - (1 - 3t)e^t/9$. Enfin, y(0) = 1 implique que A - 1/9 = 1 donc la solution générale de l'équation est finalement

$$y(t) = \frac{1}{9} \left(10e^{-2t} - (1 - 3t)e^t \right)$$

— Solution de $y'(t) + 2y(t) = te^{-2t}$ avec y(0) = 1. Cette fois, le forçage est te^{-2t} donc $\mu = -2$ ce qui est la racine de l'équation caractéristique r = -2. Par conséquent m = 1 et la solution particulière est de la forme $y_p(t) = (P_1t + P_2t^2)e^{-2t}$. En remplaçant dans l'équation inhomogène, on obtient $(P_1 + 2P_2t - 2P_1t - 2P_2t^2 + 2P_1t + 2P_2t^2)e^{-2t} = te^{-2t}$ d'où $P_1 = 0$ et $P_2 = 1/2$. La solution générale est donc de la forme $y(t) = y_h(t) + y_p(t) = (A + t^2/2)e^{-2t}$. Enfin, y(0) = 1 implique que A = 1 donc la solution générale de l'équation est finalement

$$y(t) = \left(1 + \frac{t^2}{2}\right)e^{-2t}$$

— Solution de $y''(t) + y(t) = \cos(\omega t)$, $\omega > 0$, avec y(0) = 1 et y'(0) = 0. On résout l'équation caractéristique de l'équation homogène, $r^2 + 1 = 0$, d'où $r_1 = i$ et $r_2 = -i$. Les racines r_1 et r_2 sont distinctes donc la solution de l'équation homogène est $y_h(t) = Ae^{it} + Be^{-it}$ qui peut encore s'écrire $y_h(t) = a\cos(t) + b\sin(t)$ avec a = A + B et b = i(A - B). D'autre part, $\cos(\omega t) = (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$. On peut donc chercher la solution particulière associée à $e^{i\omega t}$ puis celle associée à $e^{-i\omega t}$ et sommer les contributions (sans oublier le facteur 1/2). a) $\omega \neq 1$.

Si ω est différent de 1, $\mu=i\omega$ n'est pas une racine de l'équation caractéristique puisque $\mu\neq r_1$. Donc, la solution particulière est de la forme $y_{p,1}(t)=P_{0,1}e^{i\omega t}$ et en remplaçant dans l'équation avec pour seul second membre $e^{i\omega t}/2$, on trouve $(1-\omega^2)P_{0,1}=1/2$ d'où $y_{p,1}(t)=e^{i\omega t}/[2(1-\omega^2)]$. De la même manière, $\mu=-i\omega$ n'est pas une racine de l'équation caractéristique et la solution particulière associée à $e^{-i\omega t}/2$ est donc $y_{p,2}(t)=e^{-i\omega t}/[2(1-\omega^2)]$. Donc, finalement $y_p(t)=y_{p,1}(t)+y_{p,2}(t)=\cos(\omega t)/(1-\omega^2)$. On a donc $y(t)=a\cos(t)+b\sin(t)+\cos(\omega t)/(1-\omega^2)$. Or y(0)=1 et y'(0)=0 impliquent que $a=1-1/(1-\omega^2)$ et b=0, soit finalement

$$y(t) = \frac{\cos(\omega t) - \omega^2 \cos(t)}{1 - \omega^2}$$

b) $\omega = 1$.

Dans ce cas, $\mu = \pm i$ est une racine de l'équation caractéristique puisque soit $\mu = r_1$ soit $\mu = r_2$. Donc, la solution particulière associée à $e^{it}/2$ est de la forme $y_{p,1}(t) = P_{1,1}te^{it}$. En remplaçant dans l'équation inhomogène, on obtient $P_{1,1} = 1/4i$ soit $y_{p,1}(t) = te^{it}/(4i)$. De même, on trouve $y_{p,2}(t) = -te^{-it}/(4i)$ d'où $y_p(t) = (t\sin t)/2$. Donc $y(t) = a\cos(t) + (b+t/2)\sin(t)$ et avec les conditions initiales, a = 1 et b = 0, soit finalement,

$$y(t) = \cos(t) + \frac{t}{2}\sin(t)$$

On voit que contrairement à la solution précédente, celle-ci oscille mais n'est pas bornée. Il s'agit d'un phénomène de résonance très commun en physique : forcer un oscillateur non amorti selon sa fréquence propre (ici $\omega=1$) engendre une oscillation dont l'amplitude croît indéfiniment dans le temps.

- Solution de $y''(t) - 2y'(t) + y(t) = te^t$ avec y(0) = 1 et y'(0) = 0. On résout l'équation caractéristique $r^2 - 2r + 1 = 0$ d'où r = 1, qui est une racine double! La solution homogène est donc $y_h(t) = Ae^t + Bte^t$. De plus $\mu = 1 = r$. Or la multiplicité de r est 2 (racine double) donc celle de μ l'est également d'où m = 2. La fonction polynôme $[t \mapsto P(t)]$ est donc de la forme $P(t) = P_2t^2 + P_3t^3$ puisque Q(t) = t est de degré 1. En remplaçant $y_p(t) = P(t)e^t$ dans l'équation on obtient : $P_2 = 0$ et $P_3 = 1/6$. D'autre part, y(0) = 1 et y'(0) = 0 impliquent que A = 1 et B = -1, d'où la solution générale

$$y(t) = \left(1 - t + \frac{t^3}{6}\right)e^t.$$