EXTRAITS

OUTILS MATHÉMATIQUES

À L'USAGE DES SCIENTIFIQUES ET INGÉNIEURS

Elie Belorizky



17, avenue du Hoggar Parc d'Activité de Courtabœuf - BP 112 91944 Les Ulis Cedex A - France

Grenoble Sciences

Grenoble Sciences est un centre de conseil, expertise et labellisation de l'enseignement supérieur français. Il expertise les projets scientifiques des auteurs dans une démarche à plusieurs niveaux (référés anonymes, comité de lecture interactif) qui permet la labellisation des meilleurs projets après leur optimisation. Les ouvrages labellisés dans une collection de Grenoble Sciences ou portant la mention « Sélectionné par Grenoble Sciences » (Selected by Grenoble Sciences) correspondent à :

- ▶ des projets clairement définis sans contrainte de mode ou de programme,
- ► des qualités scientifiques et pédagogiques certifiées par le mode de sélection (les membres du comité de lecture interactif sont cités au début de l'ouvrage),
- ▶ une qualité de réalisation assurée par le centre technique de Grenoble Sciences.

Directeur scientifique de Grenoble Sciences

Jean BORNAREL, Professeur émérite à l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1

Pour contacter Grenoble Sciences : tél : (33) 4 76 51 46 95, e-mail : grenoble.sciences@ujf-grenoble.fr

Livres et pap-ebooks

Grenoble Sciences labellise des livres papier (en langue française et en langue anglaise) mais également des ouvrages utilisant d'autres supports. Dans ce contexte, situons le concept de pap-ebook. Celui-ci se compose de deux éléments :

- ▶ un **livre papier** qui demeure l'objet central avec toutes les qualités que l'on connaît au livre papier
- ▶ un site web compagnon qui propose :
 - des éléments permettant de combler les lacunes du lecteur qui ne posséderait pas les prérequis nécessaires à une utilisation optimale de l'ouvrage,
 - des exercices pour s'entraîner,
 - des compléments pour approfondir un thème, trouver des liens sur internet, etc.

Le livre du pap-ebook est autosuffisant et certains lecteurs n'utiliseront pas le site web compagnon. D'autres l'utiliseront et ce, chacun à sa manière. Un livre qui fait partie d'un pap-ebook porte en première de couverture un logo caractéristique et le lecteur trouvera la liste de nos sites compagnons à l'adresse internet suivante :

https://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr/pap-ebook

Grenoble Sciences bénéficie du soutien de la région Rhône-Alpes et du ministère de l'Éducation nationale, de l'Enseignement supérieur et de la Recherche. Grenoble Sciences est rattaché à l'Université Joseph Fourier de Grenoble.

> ISBN 978 2 7598 1656 9 © EDP Sciences 2015

Outils mathématiques à l'usage des scientifiques et ingénieurs

Cet ouvrage, labellisé par Grenoble Sciences, est un des titres du secteur Mathématiques de la collection Grenoble Sciences d'EDP Sciences, qui regroupe des projets originaux et de qualité. Cette collection est dirigée par Jean BORNAREL, Professeur émérite à l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1.

Comité de lecture :

- ▶ Pascal-Henri FRIES, Ingénieur chercheur, CEA, Grenoble
- ▶ Philippe PEYLA, Professeur, Université Joseph Fourier, Grenoble 1
- ▶ Marcel VALLADE, Professeur honoraire, Université Joseph Fourier, Grenoble 1
- ▶ Madeleine VEYSSIÉ, Professeur honoraire, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6
- ► José TEIXEIRA, Directeur de recherche, CEA, Saclay

Cette nouvelle édition a été suivie par Stéphanie TRINE. Réalisation des nouveaux éléments : Pierre-Luc MANTEAUX (LATEX), Sylvie BORDAGE et Anne-Laure PASSA-VANT (figures). Illustration de couverture : Alice GIRAUD, d'après 2006-01-14 Surface waves.jpg (Wikimedia) : *Ondes de surface sur de l'eau*, image de Roger McLassus (améliorée par DemonDeLuxe, septembre 2006), 14 janvier 2006, sous licence CC-BY-SA-3.0 (*http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/deed.en*).

Autres ouvrages labellisés sur des thèmes proches (chez le même éditeur) :

Mathématiques pour l'étudiant scientifique. Tomes I et II (P.-J. Haug) • Exercices corrigés d'analyse avec rappels de cours. Tomes I et II (D. Alibert) • Mathématiques pour les sciences de la Vie, de la Nature et de la Santé (J.-P. Bertrandias & F. Bertrandias) • Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur (J.-P. Grivet) • Analyse numérique et équations différentielles (J.-P. Demailly) • Mécanique. De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien (C. Gignoux & B. Silvestre-Brac) • Problèmes corrigés de mécanique et résumés de cours. De Lagrange à Hamilton (C. Gignoux & B. Silvestre-Brac) • Introduction à la mécanique statistique (E. Belorizky & W. Gorecki) • Mécanique statistique. Exercices et problèmes corrigés (E. Belorizky & W. Gorecki) • Analyse statistique des données expérimentales (K. Protassov) • Magnétisme : I Fondements, II Matériaux (sous la direction d'E. du Trémolet de Lacheisserie) • La mécanique quantique. Problèmes résolus. Tomes I et II (V.M. Galitski, B.M. Karnakov & V.I. Kogan) • Éléments de Biologie à l'usage d'autres disciplines. De la structure aux fonctions (P. Tracqui & J. Demongeot) • Minimum Competence in Scientific English (S. Blattes, V. Jans & J. Upjohn) • L'air et l'eau (R. Moreau) • Turbulence (M. Lesieur) • Thermodynamique Chimique (M. Robert & M. Ali Oturan) • Petit traité d'intégration. Riemann, Lebesgue et Kurzweil-Henstock (J.-Y. Briend) • Nombres et algèbre (J.-Y. Mérindol) • Introduction aux variétés différentielles (J. Lafontaine) • Description de la symétrie. Des groupes de symétrie aux structures fractales (J. Sivardière) • Symétrie et propriétés physiques. Des principes de Curie aux brisures de symétrie (J. Sivardière) • Approximation hilbertienne. Splines, ondelettes, fractales (M. Attéia & J. Gaches)

et d'autres titres sur le site internet https://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr

Le théorème de STOKES s'énonce ainsi :

La circulation du champ vectoriel $\vec{A}(M)$ le long du contour fermé Γ limitant la surface Σ est égale au flux de son rotationnel à travers cette surface, soit :

$$\int_{\Gamma} \vec{A} \cdot \vec{ds} = \iint_{\Sigma} \vec{n} \cdot \vec{\text{rot}} \vec{A} \, d\sigma.$$
(1.40)





Démonstration : Considérons le cas particulier d'un rectangle élémentaire PQRS dont les côtés dx, dy sont parallèles aux axes Ox et Oy et centré en un point M(x, y, z). Les coordonnées des sommets du rectangle sont

$$\begin{split} & \mathbf{P}(x+dx/2,y+dy/2,z), \quad \mathbf{Q}(x-dx/2,y+dy/2,z), \\ & \mathbf{R}(x-dx/2,y-dy/2,z), \quad \mathbf{S}(x+dx/2,y-dy/2,z). \end{split}$$

Nous choisissons un sens positif de circulation de manière à ce que la normale au rectangle soit dirigée vers Oz (figure 1.8). Calculons la circulation du champ vectoriel $\vec{A}(M)$ sur ce rectangle en décomposant selon les quatre côtés PQ, QR, RS, SP.



Figure 1.8 – Circulation d'un champ vectoriel sur un rectangle élémentaire.



Figure 2.4 – Famille de cercles solutions de (2.38) et les deux solutions singulières $y = \pm R$.

2.12. Généralités sur les équations d'ordre supérieur à 1

Comme nous l'avons vu, une équation différentielle d'ordre n s'écrit

$$F(x, y, y'y'', \dots, y^{(n)}) = 0.$$

Nous nous limiterons au cas où l'on peut résoudre cette équation par rapport à $y^{(n)}$ soit :

$$y^{(n)} = f(x, y, y'y'', \dots, y^{(n-1)}).$$
(2.39)

On démontre le théorème d'existence suivant par extension du § 2.2.

Si dans (2.39) la fonction f et ses dérivées partielles par rapport à $y, y', \ldots, y^{(n-1)}$ sont continues dans un certain domaine contenant les valeurs $x_0, y_0, y'_0, \ldots, y_0^{(n-1)}$, il existe une solution unique $y = \varphi(x)$ de l'équation vérifiant les conditions initiales $y = y_0, y' = y'_0, \ldots, y^{(n-1)} = y_0^{(n-1)}$ pour $x = x_0$.

Ce résultat a déjà été établi pour le cas particulier d'une équation du 2^e ordre au § 2.2. La solution générale de (2.39) est une fonction $y = \varphi(x, C_1, C_2, \ldots, C_n)$ dépendant de *n* constantes arbitraires. Les conditions initiales étant fixées, il existe un jeu unique des constantes C_1, C_2, \ldots, C_n satisfaisant à ces conditions. On obtient alors une solution particulière de (2.39).

2.13. Les équations de la forme $y^{(n)}=f(x)$

L'équation la plus simple d'ordre n s'écrit :

$$y^{(n)} = f(x). (2.40)$$

Pour trouver sa solution générale, il suffit d'intégrer n fois. On a donc :

$$y^{(n-1)} = \int_{x_0}^x f(x) \, dx + C_1,$$



Figure 3.30 – Réseau orthogonal d'ellipses et d'hyperboles construit à partir de $z = d \cosh Z$.

Si X =Cte, en éliminant Y, on obtient dans le plan xOy :

$$\frac{x^2}{d^2\cosh^2 X} + \frac{y^2}{d^2\sinh^2 X} = 1$$

qui définit un réseau d'ellipses homofocales et de foyers F et F' distants de 2d. Si Y =Cte, on a en éliminant X,

$$\frac{x^2}{d^2 \cos^2 Y} - \frac{y^2}{d^2 \sin^2 Y} = 1,$$

qui définit un réseau d'hyperboles orthogonal au réseau d'ellipses précédent et avec les mêmes foyers (figure 3.30).

3.13.3. Applications physiques

Rappelons d'abord que dans (3.39), X et Y sont des fonctions harmoniques obéissant à l'équation de LAPLACE (3.4).

Etant donnée une courbe $y = \varphi(x)$ du plan des z, le problème consistant à trouver une relation Z = f(z) qui transforme la courbe en une parallèle à l'un des axes OX ou OY, afin d'obtenir un réseau de courbes orthogonales, n'est pas soluble en général. Aussi, se contente-t-on, à partir d'une transformation conforme donnée à priori, de trouver des réseaux orthogonaux de fonctions harmoniques à deux dimensions qui permettent de résoudre des cas particuliers de problèmes de champ de vecteurs dérivant d'un potentiel scalaire lorsque la direction du champ reste constamment parallèle à un plan. On sait, en effet, que dans ce cas, les lignes de force du champ sont orthogonales aux lignes équipotentielles.

Parmi les exemples physiques de couples orthogonaux de lignes de champ et de lignes équipotentielles, citons les lignes de champ électrostatique et les lignes de potentiel électrostatique constant pour une distribution de charges, les lignes de courant et les lignes équipotentielles d'un conducteur parcouru par un courant électrique, les lignes de flux de chaleur et les lignes d'isothermes d'un corps chauffé, les lignes de courant et celles d'égal potentiel de vitesse d'un fluide parfait, etc ...

Dans le cas de l'électrostatique, si l'on se donne une transformation conforme quelconque Z = f(z) et si X(x, y) est la fonction potentiel, les courbes X(x, y) =Cte sont les lignes équipotentielles et les courbes Y(x, y) = Cte sont les lignes de champ électrique avec $\vec{E}(x, y) = -\overrightarrow{\text{grad}} X(x, y)$. Dans l'exemple du § 3.13.2, si les ellipses sont des lignes équipotentielles correspondant à des sections droites de cylindres elliptiques electrisés formant des surfaces équipotentielles, les hyperboles représentent des lignes de force du champ électrique. avec une erreur relative inférieure à 10^{-3} . Pour x grand, on déduit de (4.27) que :

$$\frac{d}{dx}\ln x! \cong \ln x. \tag{4.28}$$

Certes d'un point de vue mathématique, il est très dangereux de calculer cette dérivée à partir d'une forme approchée qui n'est que le début d'une série asymptotique, mais il se trouve que le résultat (4.28) est correct.

4.6. LA FONCTION D'ERREUR

Il s'agit d'une fonction très importante pour la théorie des probabilités et, d'une manière générale, pour l'analyse des données dans les sciences expérimentales.

4.6.1. Définition et propriétés élémentaires

La fonction erf (x) d'une variable réelle x est l'intégrale de 0 à x de la fonction $(2/\sqrt{\pi})e^{-u^2}$, soit :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} e^{-u^{2}} du.$$
(4.29)

C'est une fonction impaire, erf (-x) = -erf(x), et développable en série entière :

$$e^{-u^{2}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k} \frac{u^{2k}}{k!}$$

:
$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k} \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)k!}.$$
 (4.30)

Si $x \to 0$, erf $(x) \cong 2x/\sqrt{\pi}$. D'autre part d'après (4.13), on a erf $(\infty) = 1$. On représente dans la figure 4.2 la fonction y = erf(x) pour $x \ge 0$.



d'où

5.7. LA FONCTION DE DIRAC ET SON IMAGE

La fonction de DIRAC ou **fonction delta** joue un rôle pratique très important comme nous le verrons dans toute la suite de cet ouvrage. Pour l'introduire simplement, considérons la fonction f(x) définie par :

$$f(x) = \begin{cases} 1/a & \text{pour } 0 < x < a \\ 0 & \text{pour } x > a. \end{cases}$$

Cette fonction n'est autre que $f_2(x)/a$ étudiée au § 5.6. On a, pour $x_1 < 0 < a < x_2,$ $\int_{x_1}^{x_2} f(x) \ dx = 1$ et :

T.L.
$$f(x) = F(p) = \frac{1 - e^{-pa}}{ap}$$
. (5.36)

La fonction de Dirac $\delta(x)$ peut être considérée comme la limite quand $a \to 0$ de la fonction f(x), c'est-à-dire la limite d'un rectangle de surface constante égale à l'unité et de largeur a, donc de hauteur 1/a lorsque $a \to 0$ (figure 5.6). Ainsi, on a :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0\\ \infty & \text{si } x = 0 \end{cases}$$
(5.37)

avec :

$$\int_{x_1}^{x_2} \delta(x) \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \, dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \, dx = 1, \qquad (5.37')$$

où ε est un nombre > 0 aussi petit que l'on veut. L'image de la fonction $\delta(x)$ s'obtient en prenant la limite pour $a \to 0$ de F(p) donnée par (5.36). Donc :

$$T.L.\delta(x) = 1. \tag{5.38}$$



Figure 5.6 – La fonction $\delta(x)$ comme limite d'un rectangle de surface unité.

Pour une fonction f(x) continue en x = 0 on a :

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\delta(x) \ dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x) \ dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} f(x)\delta(x) \ dx = f(0)$$
(5.39)

d'où :

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx = \pi b_n.$$
(6.6)

En résumé, d'après (6.4), (6.5) et (6.6), pour n entier ≥ 0 , on a :

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx \; ; \qquad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx \; . \tag{6.7}$$

Notons que si la fonction f(x) est paire, f(-x) = f(x), les coefficients b_n sont nuls; au contraire, si la fonction f(x) est impaire, f(-x) = -f(x), ce sont les coefficients a_n qui s'annulent.

Remarque. Si la fonction f(x) est périodique, avec une période 2π , le développement en série de FOURIER (6.2) est valable pour toutes les valeurs de x de $-\infty$ à $+\infty$ et il représente la fonction en tout point. Si f(x) n'est pas une fonction périodique, le développement (6.2) est encore valable, mais il ne représente la fonction que pour $-\pi < x < \pi$.

6.2. Exemples de développement en série de Fourier

1. Considérons la fonction périodique, de période 2π , f(x) définie par f(x) = x, $-\pi \le x \le \pi$ (figure 6.1). Il s'agit d'une fonction impaire; les coefficients a_n sont nuls et, d'après (6.7) :



Figure 6.1 – Fonction périodique f(x) = x $(-\pi \le x \le \pi)$.

soit :

$$b_n = \frac{1}{\pi} \left| \frac{-x \cos nx}{n} \right|_{-\pi}^{\pi} + \frac{1}{n\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \, dx = -\frac{2}{n} \cos n\pi = (-1)^{n+1} \frac{2}{n}.$$

7.4. L'ÉQUATION DE DIFFUSION

Considérons un milieu diffusif, c'est-à-dire un milieu dans lequel des particules d'un fluide en mouvement subissent des collisions. Il peut s'agir des molécules d'un gaz ou d'un liquide, des électrons dans un métal, etc. Désignons par $n(\vec{x}, t)$ le nombre de particules par unité de volume en un point \vec{x} au temps t et par $\vec{J}(\vec{x}, t)$ la densité de courant du fluide, c'est-à-dire le nombre de particules traversant une surface unité normale à la vitesse d'écoulement du fluide en ce point, par unité de temps. Le phénomène de diffusion est décrit par la loi de FICK :

$$\vec{J} = -D \ \overrightarrow{\text{grad}} \ n, \tag{7.32}$$

qui exprime que les particules ont tendance à aller des zones à forte concentration vers celles à faible concentration. D est le coefficient de diffusion. A une dimension, on aurait plus simplement $J_x = -D\partial n/\partial x$. Par ailleurs, l'équation de conservation du fluide s'écrit d'après l'équation (1.15) :

div
$$\vec{J} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0.$$
 (7.33)

En combinant (7.32) et (7.33) on obtient l'équation fondamentale de la diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \triangle n = D\left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}\right).$$
(7.34)

La conduction de la chaleur dans un matériau s'effectue très souvent grâce à un mécanisme de diffusion. Dans un milieu où il existe un gradient de température, $\overrightarrow{\text{grad}} T$, la densité de flux de chaleur \vec{j} est donnée, par analogie avec la loi de FICK (7.32), par la loi de FOURIER :

$$\vec{j} = -\kappa \overrightarrow{\text{grad}} T,$$
 (7.35)

où κ est le coefficient de conductibilité thermique. En l'absence de source de chaleur interne, si l'on effectue un bilan thermique dans un volume unité, on obtient une équation de conservation de la chaleur analogue à (7.33) qui s'écrit :

div
$$\vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$
 (7.36)

où $\rho(\vec{x}, t)$ est la densité d'énergie. Par ailleurs :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = C_v \frac{\partial T}{\partial t},\tag{7.37}$$

où C_v est la chaleur spécifique du milieu à volume constant et par unité de volume. En combinant (7.35), (7.36) et (7.37), on obtient l'équation de **diffusion de la chaleur** :

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \triangle T \tag{7.38}$$

qui a la même forme que (7.34) en prenant $D = \kappa/C_v$. Notons qu'en présence de sources de chaleur internes créant une chaleur q uniforme par unité de volume, on a :

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \triangle T + q. \tag{7.39}$$

CHAPITRE 8

ALGÈBRE LINÉAIRE, CALCUL MATRICIEL

Dans ce chapitre, après un bref rappel sur les propriétés des opérateurs et plus particulièrement des opérateurs linéaires, nous introduisons les matrices qui sont d'un usage courant dans de nombreux domaines des mathématiques et de la physique. Elles interviennent par exemple dans la résolution des systèmes d'équations linéaires, dans les opérations de changement de repère en géométrie, dans l'étude mécanique des vibrations des molécules au voisinage de leur position d'équilibre, dans les propriétés des réseaux électriques. Il faut aussi souligner qu'elles sont à la base du formalisme de la mécanique quantique. Nous commençons par donner les définitions et les propriétés élémentaires des matrices, puis nous montrons leur rôle dans la représentation des opérateurs linéaires dans les espaces vectoriels réels et complexes. Nous donnons ensuite quelques exemples d'applications avant de terminer par le formalisme général de Dirac.

De nombreuses propriétés des matrices mettent en jeu les déterminants dont les principales propriétés sont rappelées dans l'annexe III.

8.1. LES OPÉRATEURS

D'une manière générale, un opérateur F fait correspondre à certains objets mathématiques X d'autres objets F(X). Ces objets peuvent être des nombres réels ou complexes, des points, des vecteurs, des fonctions. Un opérateur peut être une fonction, une dérivée, une intégrale, une translation, une rotation, une symétrie par rapport à un plan, une inversion, une permutation, etc. Nous étudierons dans ce chapitre et le chapitre suivant les opérateurs linéaires particuliers que sont les matrices et les tenseurs. Nous avons déjà défini au chapitre 1 les opérateurs différentiels. Nous donnons ci-dessous quelques définitions et propriétés des opérateurs.

$$\begin{array}{c} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \\ \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{} \xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{} \xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{} \xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{} \xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{} \xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}} \stackrel{\circ}{\xrightarrow{}$$

Figure 8.9 – Système de lames à faces parallèles.

- 1. Exprimer a_{i+1} et b_{i+1} en fonction de a_i et b_i . Soit A la matrice correspondante; donner ses éléments en fonction de R.
- 2. Donner l'équation caractéristique de la matrice A et en déduire une relation algébrique simple à laquelle obéit A.
- 3. Poser A = E + B où E est la matrice unité et montrer que $A^n = E + nB$, (*n* entier > 0).
- 4. Calculer A^{2p} et en déduire les rapports a_{2p}/a_0 et b_0/a_0 que l'on exprimera en fonction du paramètre t = 2pR/(1-R).

Exercice 8.17. Soit

$$A = \begin{pmatrix} \cos x & -\sin x \\ \sin x & \cos x \end{pmatrix}.$$

- 1. Donner les valeurs propres et les vecteurs propres normés de la matrice A.
- 2. Calculer A^p où p est un paramètre réel.

Exercice 8.18. Soit

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 3\\ 3 & -4 \end{pmatrix};$$

calculer la racine réelle de $A^{1/3}$.

Exercice 8.19. On cherche les modes normaux des vibrations longitudinales d'une molécule triatomique linéaire et symétrique ABA. Les masses des atomes A et B sont m et M, respectivement, et la distance d'équilibre entre A et B est l. Les coordonnées des trois atomes à l'équilibre sont $x_1^0 = -l$, $x_2^0 = 0$, $x_3^0 = l$ (figure 8.10).



Figure 8.10 – Molécule linéaire triatomique symétrique.

On désigne par $u_i = x_i - x_i^0$ (i = 1, 2, 3) les petits déplacements des atomes selon l'axe x. On suppose que l'énergie potentielle de vibration est donnée par

$$V = \frac{1}{2}k\left[\left(u_1 - u_2\right)^2 + \left(u_3 - u_2\right)^2\right].$$



Si x_i sont les composantes d'un vecteur \vec{x} de E_3 , le critère de tensorialité permet d'écrire que

$$\sum_{i,j} T_{ij}^S x_i x_j = A,$$

où A est une constante. Il s'agit de l'équation d'une quadrique. On peut toujours choisir la norme de \vec{x} de manière à ce que A = 1.

Dans le système d'axes principaux l'équation de la quadrique devient :

$$\sum_I T^{\prime S}_{II} x^{\prime 2}_I = 1.$$

Figure 9.1 – Ellipsoïde associé à un tenseur symétrique : $a = 1/\sqrt{T_{11}^{\prime S}}$; $b = 1/\sqrt{T_{22}^{\prime S}}$; $c = 1/\sqrt{T_{33}^{\prime S}}$.

Si les éléments diagonaux $T_{II}^{\prime S}$ sont positifs, la quadrique est un ellipsoïde, ce qui permet de représenter géométriquement le tenseur (figure 9.1).

9.3.5. Exemples de tenseurs symétriques

On rencontre de nombreux tenseurs de rang 2 symétriques en physique et en mécanique. Citons :

- Le tenseur de **susceptibilité électrique** α_{ij} , dans un milieu diélectrique anisotrope, reliant la composante P_i de la polarisation électrique (moment dipolaire électrique par unité de volume) à la composante E_i du champ électrique appliqué :

$$P_i = \varepsilon_0 \sum_j \alpha_{ij} E_j$$
 (ε_0 est la permittivité du vide).

- Le tenseur de **susceptibilité magnétique** χ_{ij} , dans un milieu paramagnétique anisotrope, reliant la composante M_i de l'aimantation (moment magnétique par unité de volume) à la composante B_j du champ magnétique appliqué :

$$\mu_0 M_i = \sum_j \chi_{ij} B_j$$
 (μ_0 est la perméabilité du vide).

- Le **tenseur d'inertie** (voir exercice 9.2).
- Le tenseur de déformation. Soumis à des forces, les corps solides changent de forme et de volume. Pour décrire mathématiquement la déformation d'un corps, on choisit un système de coordonnées et on repère chaque point M par son rayon vecteur \vec{x} (de composantes $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$). Lorsque le corps se déforme, tous ses points se déplacent et le point M se retrouve en \vec{x}' avec des composantes x'_i ; son déplacement au cours de la déformation est alors représenté par le vecteur

10.7.4. Application à la résolution de l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique

L'équation de SCHRÖDINGER d'une particule de masse m soumise à une énergie potentielle $V(x) = Cx^2/2$ (ce qui correspond en mécanique classique à un oscillateur harmonique de fréquence propre $\omega = \sqrt{C/m}$) s'écrit :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2}Cx^2)\Psi = 0, \qquad (10.70)$$

où la fonction d'onde $\Psi(x)$ est la fonction inconnue qui doit s'annuler lorsque $x \to \pm \infty$, E représente l'énergie de la particule et apparaît ici comme un paramètre, \hbar est la constante de PLANCK $h/2\pi$. Effectuons le changement de variable x = aQ où a est une constante. L'équation (10.70) devient :

$$\frac{d^2\Psi(Q)}{dQ^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(Ea^2 - \frac{1}{2}Ca^4Q^2)\Psi(Q) = 0$$

et s'identifie à (10.69) à condition de choisir

– le coefficient de Q^2 égal à 1, soit $mCa^4/\hbar^2=1,$ ou encore

$$a^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{mC}} = \frac{\hbar}{m\omega},\tag{10.71}$$

– et le paramètre E de sorte que $2mEa^2/\hbar^2 = 2n + 1$, soit

$$E_n = \frac{\hbar^2}{ma^2}(n+1/2),$$

ou, finalement,

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega. \tag{10.72}$$

L'équation (10.72) nous donne les niveaux d'énergie du sytème et les fonctions d'onde associées $\Psi_n(Q)$ sont les solutions $u_n(Q)$. En définitive la solution $\Psi_n(x)$ associée à une valeur $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ de E s'écrit sous la forme :

$$\Psi_n(x) = \text{Cte } u_n(Q) = A_n e^{-(x^2/(2a^2))} H_n(x/a), \qquad (10.73)$$

où *a* est donné par (10.71) et A_n est une constante que l'on choisit habituellement de sorte que la fonction $\Psi_n(x)$ soit normée, c'est-à-dire telle que $\int_{-\infty}^{+\infty} [\Psi_n(x)]^2 dx = 1$. La fonction $\Psi_0(x)$ associée au niveau fondamental $E_0 = \hbar \omega/2$, s'écrit par exemple :

$$\Psi_0(x) = (a\sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-(x^2/(2a^2))}$$

On peut se demander si le processus d'identification utilisé conduit à toutes les solutions de (10.70). On peut montrer qu'il en est bien ainsi car les solutions obtenues $\Psi_n(x)$ sont alternativement paires (*n* pair) et impaires (*n* impair) avec un nombre de zéros égal à *n* conformément à la théorie générale des puits de potentiels symétriques¹.

^{1.} Voir par exemple : Y. AYANT et E. BELORIZKY, *Cours de mécanique quantique* (Dunod, Paris, 3^e édition, 2000), pp. 75–76.



Figure 11.7 – Allure des fonctions $J_{\nu}(x)$.

11.10. Applications des fonctions de Bessel

11.10.1. Résolution de l'équation $\Delta \Psi + \mathbf{k}^2 \Psi = 0$ dans le plan

Cherchons une solution $\Psi(x, y)$ de l'équation

$$\Delta \Psi + k^2 \Psi = 0 \tag{11.67}$$

qui soit uniforme, continue et indéfiniment dérivable par rapport à x et y à l'intérieur d'une couronne de rayons a et b (a < b). Dans (11.67) k est une constante réelle.

Si l'on choisit les coordonnées polaires r, φ de tout point du plan comme variables, la solution $\Psi(r, \varphi)$ est une fonction périodique de φ , de période 2π lorsque r est fixe, qui est développable en série de FOURIER :

$$\Psi(r,\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(r) e^{in\varphi}.$$
(11.68)

12.4. Etude des systèmes à réponse linéaire

12.4.1. Définition

On rencontre en physique un grand nombre de systèmes qui, excités par une grandeur x(t) d'entrée dépendant du temps t, donnent lieu à une grandeur de sortie y(t) ayant les propriétés suivantes :

- -y(t) est entièrement déterminée lorsque x(t) l'est et la correspondance entre les deux grandeurs est linéaire : $y(t) = \alpha x(t)$;
- La correspondance entre x(t) et y(t) est stationnaire dans le temps : si y(t) est la réponse à x(t), la réponse à $x(t + \Delta t)$ est $y(t + \Delta t)$;

Il y a une réponse de cause à effet entre l'excitation et la réponse : si x(t) = 0 pour $t < t_0$, y(t) = 0 pour $t < t_0$.

12.4.2. EXEMPLES

- Une substance magnétique isotrope, non ferromagnétique, à laquelle on applique un faible champ magnétique \vec{H} . Cette substance acquiert une aimantation (moment magnétique par unité de volume) \vec{M} colinéaire à \vec{H} . L'excitation \vec{H} et la réponse \vec{M} satisfont bien aux conditions énoncées dans le paragraphe 12.4.1.
- Un exemple analogue est celui d'un milieu polarisable où x(t) est un champ électrique et y(t) la polarisation électrique.
- Un circuit électrique passif où l'excitation est la tension appliquée aux bornes et où la réponse est l'intensité I ou encore la charge Q d'un condensateur faisant partie du circuit.

12.4.3. Propriétés des systèmes linéaires

Physiquement x(t) et y(t) sont réels, mais il est toujours loisible de les considérer comme complexes. Par ailleurs, la correspondance $y = \alpha x$ est complètement déterminée par la donnée de la réponse percussionnelle k(t), consécutive à l'excitation $x(t) = \delta(t)$. La fonction k(t) est réelle et nulle pour t < 0 d'après le § 12.4.1. Si $x(t) = \delta(t + \Delta t), y(t) = k(t + \Delta t)$ d'après le caractère stationnaire de la réponse. D'autre part :

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t')\delta(t-t')dt',$$

et par suite de la linéarité,

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t')k(t-t')dt' = \int_{-\infty}^{t} x(t')k(t-t')dt',$$