

Mathématiques pour Sciences Physiques II

polycopié provisoire

Gerald R. Kneller

Université d'Orléans
et
Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS
Rue Charles Sadron
45071 Orléans

Table des matières

Chapitre I. Equations linéaires, matrices	3
I.1. Systèmes d'équations linéaires	3
I.2. Solution formelle d'un système d'équations linéaires	4
I.3. Eléments du calcul matriciel	6
I.4. Solution d'équations linéaires	11
I.5. Déterminants	20
I.6. Vecteurs et changements de base	26
I.7. Transformations linéaires et changements de base	27
I.8. Formes spéciales de matrices	28
Chapitre II. Applications du calcul matriciel	43
II.1. Rotations	43
II.2. Vibrations, modes normaux	54
II.3. Systèmes d'équations différentielles linéaires	62
Chapitre III. Equations aux dérivées partielles	69
III.1. Equation d'onde	69
III.2. Equation de diffusion	72
Bibliographie	75

Chapitre I

Equations linéaires, matrices

I.1. Systèmes d'équations linéaires

Dans tous les domaines de la science la solution d'un problème particulier mène à des équations linéaires de la forme

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= y_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= y_2, \\ \vdots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= y_n, \end{aligned} \tag{I.1}$$

où deux lectures sont possibles :

- (1) Les quantités x_1, \dots, x_n sont données et on interprète y_1, \dots, y_n comme fonctions linéaires de ces variables.
- (2) On interprète les Eq. (I.1) comme un système d'équations linéaires pour les quantités x_1, \dots, x_n .

Une notation plus courte des équations (I.1) est

$$\boxed{\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = y_i, \quad i = 1, \dots, n} \tag{I.2}$$

et une notation encore plus compacte est obtenue en utilisant la notation matricielle. Introduisant la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{I.3}$$

de dimensions $n \times n$ et les vecteurs de colonne

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \tag{I.4}$$

de dimension n , on écrit

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}} \tag{I.5}$$

Définissant l'indice i dans la formule (I.2) comme indice de ligne de la matrice \mathbf{A} et j comme indice de colonne, l'élément y_k ($k = 1, \dots, n$) est obtenu en calculant le produit scalaire de la k -ième ligne de la matrice \mathbf{A} avec la colonne \mathbf{x} .

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kn} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ \boxed{y_k} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}. \quad (\text{I.6})$$

La notion "produit scalaire" est ici de nature technique et concerne le calcul matriciel. On abordera la définition d'un produit scalaire entre deux vecteurs en tant qu'objets mathématiques plus tard.

La matrice \mathbf{A} peut être exprimée par ses vecteurs de ligne et ses vecteurs de colonne,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{(l)} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^{(l)} \end{pmatrix} = \left(\mathbf{a}_1^{(c)}, \dots, \mathbf{a}_n^{(c)} \right), \quad (\text{I.7})$$

où $\mathbf{a}_i^{(l)}$ sont ses vecteurs de ligne,

$$\mathbf{a}_i^{(l)} = (a_{i1}, \dots, a_{in}), \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{I.8})$$

et $\mathbf{a}_j^{(c)}$ ses vecteurs de colonne,

$$\mathbf{a}_j^{(c)} = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.9})$$

Ici on définit le premier indice de l'élément a_{ij} comme indice de ligne et le deuxième comme indice de colonne,

$$a_{ij} = (\mathbf{a}_i^{(l)})_j = (\mathbf{a}_j^{(c)})_i. \quad (\text{I.10})$$

Avec ces définitions l'équation (I.5) se lit alors explicitement

$$\mathbf{a}_i^{(l)} \cdot \mathbf{x} = y_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{I.11})$$

I.2. Solution formelle d'un système d'équations linéaires

Interprétant (I.5) comme équation matricielle pour l'inconnue \mathbf{x} , la solution peut être formellement écrite comme

$$\boxed{\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{y}} \quad (\text{I.12})$$

où \mathbf{A}^{-1} est la matrice inverse \mathbf{A} . Elle vérifie

$$\boxed{\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{1}} \quad (\text{I.13})$$

où $\mathbf{1}$ est la matrice d'unité,

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.14})$$

Avec la notation matricielle la solution formelle des équation linéaires (I.1) s'écrit de la même manière que pour une équation scalaire de la forme, $ax = b$. Ici $x = a^{-1}b$ si $a \neq 0$ et la variante matricielle (I.5) a une solution si $\det(\mathbf{A}) \neq 0$, où $\det(\mathbf{A})$ est le déterminant de \mathbf{A} qui sera défini plus tard. La détermination de l'inverse d'une matrice de dimensions $n \times n$ correspond à la solution de n équations linéaires. Définissant la matrice inconnue

$$\mathbf{X} \equiv \mathbf{A}^{-1}, \quad (\text{I.15})$$

on cherche à déterminer \mathbf{X} par l'équation matricielle

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nn} \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{1}}, \quad (\text{I.16})$$

ce qui est équivalent à résoudre les n systèmes d'équations linéaires

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_j^{(c)} = \mathbf{e}_j^{(c)}, \quad j = 1, \dots, n, \quad (\text{I.17})$$

où $\mathbf{x}_j^{(c)}$ est la j -ème colonne de la matrice inverse recherchée et $\mathbf{e}_j^{(c)}$ la j -ème colonne de la matrice d'unité,

$$\mathbf{e}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{élément no. } j. \quad (\text{I.18})$$

Les opérations précédents définissent implicitement la multiplication de deux matrices quadratiques. En écrivant les équations (I.16) en composantes,

$$\boxed{\sum_{k=1}^n a_{ik}x_{kj} = \delta_{ij}} \quad (\text{I.19})$$

on écrit l'élément i, j de la matrice d'unité comme produit scalaire de la i -ème ligne de \mathbf{A} avec la j -ème colonne ce \mathbf{X} ,

$$(\mathbf{1})_{ij} = \delta_{ij} = \mathbf{a}_i^{(l)} \cdot \mathbf{x}_j^{(c)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.20})$$

La produit matriciel sera généralisé en section I.3.1 pour des matrices rectangulaires.

Il est trivial que la solution des équations (I.5) via le calcul explicite de la matrice inverse \mathbf{A} est inefficace du point de vue numérique, car il implique la solution de n systèmes d'équations linéaires au lieu d'un seul. Le concept de la matrice inverse est le plus souvent utilisé dans un contexte mathématique formel. L'exemple I.1 donne une illustration pour l'utilisation de la matrice inverse pour la solution formelle d'un système d'équations linéaires. La solution numérique d'un système d'équations linéaires sera traitée plus tard.

Exemple I.1. Matrice inverse: Comme exemple pour la solution formelle d'un système d'équations linéaires via la matrice inverse de la matrice des coefficients on considère le système $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$, où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

On vérifie que

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} -4 & 4 & -1 \\ 4 & -5 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

est la matrice inverse,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 4 & -1 \\ 4 & -5 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A},$$

et que

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{y} = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \\ -1 \end{pmatrix}$$

est la solution pour \mathbf{x} .

I.3. Éléments du calcul matriciel

I.3.1. Produit de matrices rectangulaires. Dans ce qui suit on considérera plus généralement des produits matriciels de la forme

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{W}, \quad (\text{I.21})$$

où \mathbf{U} est une matrice $m \times p$, \mathbf{V} est une matrice $p \times n$ et \mathbf{W} une matrice une matrice $m \times n$.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1p} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ u_{m1} & \dots & u_{mp} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} v_{11} & \dots & v_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ v_{p1} & \dots & v_{pn} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.22})$$

et la matrice résultante a les dimensions $m \times n$,

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_{11} & \dots & w_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ w_{m1} & \dots & w_{mn} \end{pmatrix}. \quad (\text{I.23})$$

Les éléments de la matrice de produit \mathbf{W} sont données par

$$w_{ij} = \sum_{k=1}^p u_{ik}v_{kj}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.24})$$

Les vecteurs de colonne de \mathbf{U} doivent avoir la même longueur que les vecteur de ligne de \mathbf{V} et le schéma de multiplication de deux matrices peut être raccourci comme

$$(m, p)(p, n) = (m, n), \quad (\text{I.25})$$

où p disparaît dans le produit ("contraction").

I.3.2. Matrice transposée. L'opération de transposition fait d'une matrice de dimensions $m \times p$ une matrice dimensions $p \times m$, en échangeant lignes et colonnes de la matrice considérée,

$$\mathbf{U}^T = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{m1} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ u_{1p} & \dots & u_{mp} \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad (\mathbf{U}^T)_{ij} = u_{ji}. \quad (\text{I.26})$$

On note que

$$\boxed{(\mathbf{U} \cdot \mathbf{V})^T = \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{U}^T} \quad (\text{I.27})$$

ce qui peut être montré comme suit :

$$(\mathbf{U} \cdot \mathbf{V})_{ij}^T = (\mathbf{U} \cdot \mathbf{V})_{ji} = \mathbf{u}_j^{(l)} \cdot \mathbf{v}_i^{(c)} = \mathbf{v}_i^{(c)} \cdot \mathbf{u}_j^{(l)} = \mathbf{v}_i^{(T,l)} \cdot \mathbf{u}_j^{(T,c)} = (\mathbf{V}^T \cdot \mathbf{U}^T)_{ij} \quad \square$$

Ici on utilise que la i -ème colonne de \mathbf{V} est la i -ème ligne de \mathbf{V}^T et que j -ème ligne de \mathbf{U} est la j -ème colonne de \mathbf{U}^T . Pour les matrices complexes on définit

$$\mathbf{U}^H = \begin{pmatrix} u_{11}^* & \dots & u_{m1}^* \\ \vdots & \dots & \vdots \\ u_{1p}^* & \dots & u_{mp}^* \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad (\mathbf{U}^H)_{ij} = u_{ji}^*, \quad (\text{I.28})$$

et l'identité (I.27) devient

$$\boxed{(\mathbf{U} \cdot \mathbf{V})^H = \mathbf{V}^H \cdot \mathbf{U}^H} \quad (\text{I.29})$$

En écrivant

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^{(l)} \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^{(l)} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V} = \left(\mathbf{v}_1^{(c)}, \dots, \mathbf{v}_n^{(c)} \right),$$

il suit que

$$(\mathbf{W})_{ij} = \mathbf{u}_i^{(l)} \cdot \mathbf{v}_j^{(c)}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.30})$$

I.3.3. Cas spéciaux : Matrices de colonne.

I.3.3.1. *Produit scalaire.* Le schéma (I.25) contient le produit scalaire euclidien de deux matrices de colonne comme cas spécial, car la multiplication d'une matrice de dimensions $1 \times n$ avec une matrice de dimensions $n \times 1$ donne une matrice de dimensions 1×1 , donc un scalaire,

$$(1, k)(k, 1) = (1, 1). \quad (\text{I.31})$$

Définissant

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad (\text{I.32})$$

le produit scalaire de \mathbf{x} et \mathbf{y} est défini par

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^n x_i y_i = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{y} = (\mathbf{y}, \mathbf{x}). \quad (\text{I.33})$$

Pour les matrices complexes on définit

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \sum_{i=1}^n x_i^* y_i = \mathbf{x}^H \cdot \mathbf{y} = (\mathbf{y}, \mathbf{x})^*. \quad (\text{I.34})$$

I.3.3.2. *Produit dyadique.* Partant encore du schéma (I.25) on voit que le produit matricielle d'une matrice de dimensions $m \times 1$ avec une matrice de dimensions $1 \times n$ donne une matrice de dimensions $m \times n$,

$$(n, 1)(1, m) = (n, m). \quad (\text{I.35})$$

Définissant

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad (\text{I.36})$$

on construit avec la règle générale (I.20) la matrice

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} \equiv \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}^T, \quad (\text{I.37})$$

sachant que les lignes dans la matrice de colonne \mathbf{x} et les colonnes dans la matrice de ligne \mathbf{y}^T ont la longueur 1.

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \cdot (y_1, \dots, y_n) = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & \dots & x_1 y_n \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_m y_1 & \dots & x_m y_n \end{pmatrix}. \quad (\text{I.38})$$

Pour cette raison on a simplement

$$(\mathbf{x} \otimes \mathbf{y})_{ij} = x_i y_j. \quad (\text{I.39})$$

Pour les matrices complexes on définit

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} \equiv \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}^H \quad (\text{I.40})$$

$$\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \cdot (y_1^*, \dots, y_n^*) = \begin{pmatrix} x_1 y_1^* & \dots & x_1 y_n^* \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_m y_1^* & \dots & x_m y_n^* \end{pmatrix}, \quad (\text{I.41})$$

et élément par élément

$$(\mathbf{x} \otimes \mathbf{y})_{ij} = x_i y_j^*. \quad (\text{I.42})$$

I.3.4. Projecteurs. Le produit dyadique peut être utilisé pour définir le projecteur sur un vecteur donné quelconque,

$$\boxed{\mathbf{P}(\mathbf{a}) := \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{a}}}. \quad (\text{I.43})$$

Ce projecteur vérifie

$$\mathbf{P}(\mathbf{a}) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{a}) = \mathbf{P}(\mathbf{a}), \quad (\text{I.44})$$

$$\mathbf{P}^T(\mathbf{a}) = \mathbf{P}(\mathbf{a}). \quad (\text{I.45})$$

Pour les matrices complexes on a

$$\boxed{\mathbf{P}(\mathbf{a}) := \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^H}{\mathbf{a}^H \cdot \mathbf{a}}}. \quad (\text{I.46})$$

Ici on a

$$\mathbf{P}(\mathbf{a}) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{a}) = \mathbf{P}(\mathbf{a}), \quad (\text{I.47})$$

$$\mathbf{P}^H(\mathbf{a}) = \mathbf{P}(\mathbf{a}). \quad (\text{I.48})$$

I.3.5. Matrices de forme spéciale. On liste ici des matrices ayant une forme et des propriétés particulières.

Matrices diagonales:

$$\mathbf{A} = \text{diag}(a_1, \dots, a_n) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{I.49})$$

La matrice d'unité est alors une forme spéciale d'une matrice orthogonale, où tous les éléments sont égaux 1,

$$\mathbf{1} = \text{diag}(1, \dots, 1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.50})$$

Matrices symétriques/hermitiennes: Une matrice, \mathbf{A} , est symétrique si

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{A} \quad \text{ou bien} \quad a_{ij} = a_{ji}, \quad (\text{I.51})$$

et elle est hermitienne si

$$\mathbf{A}^H = \mathbf{A} \quad \text{ou bien} \quad a_{ij} = a_{ji}^*. \quad (\text{I.52})$$

Il est évident que ces propriétés nécessitent que \mathbf{A} soit quadratique. Les matrices vérifiant

$$\mathbf{A}^T = -\mathbf{A} \quad \text{ou bien} \quad a_{ij} = -a_{ji}, \quad (\text{I.53})$$

sont appelées antisymétriques et les matrices ayant la propriété

$$\mathbf{A}^H = -\mathbf{A} \quad \text{ou bien} \quad a_{ij} = -a_{ji}^*, \quad (\text{I.54})$$

anti-hermitiennes. On note que toute matrice peut être décomposée en une partie symétrique et une partie antisymétrique,

$$\mathbf{A} = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)}_{\mathbf{A}^{(+)}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T)}_{\mathbf{A}^{(-)}}, \quad (\text{I.55})$$

et les matrices complexes peuvent être décomposées en une partie hermitienne et une partie anti-hermitienne,

$$\mathbf{A} = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^H)}_{\mathbf{A}^{(+)}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^H)}_{\mathbf{A}^{(-)}}. \quad (\text{I.56})$$

Matrices orthogonales/unitaires: Une matrice orthogonale est une matrice quadratique qui vérifie

$$\boxed{\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} = \mathbf{1}} \quad (\text{I.57})$$

Pour les matrices complexes on définit les matrice unitaires par la propriété

$$\boxed{\mathbf{A}^H \cdot \mathbf{A} = \mathbf{1}} \quad (\text{I.58})$$

Exemple I.2. Matrice orthogonale et unitaire: Un exemple pour une matrice orthogonale est

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix}.$$

On vérifie que

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{D}^T, \end{aligned}$$

et on note que \mathbf{D} décrit des rotations dans un plan, avec l'angle ϕ . Un exemple pour une matrice unitaire venant de la mécanique quantique est

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix}.$$

On vérifie que

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^H \cdot \mathbf{U} &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & -i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{U}^H. \end{aligned}$$

I.4. Solution d'équations linéaires

I.4.1. Algorithme de Gauß. Partant du système d'équations linéaires (I.1), on comprend que l'addition d'un multiple d'une équation à une autre mène à un système d'équation équivalent, i.e. à un système qui a la même solution, \mathbf{x} . On peut également permuter deux équations. De cette manière on peut

générer un système d'équations linéaires de la forme

$$\begin{aligned} r_{11}x_1 + r_{12}x_2 + \dots + r_{1n}x_n &= z_1, \\ 0 + r_{22}x_2 + \dots + r_{2n}x_n &= z_2, \\ \vdots & \\ 0 + 0 + \dots + r_{nn}x_n &= z_n, \end{aligned} \tag{I.59}$$

qui peut être résolu d'une manière récursive,

$$x_k = \frac{1}{r_{kk}} \left(z_k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{kj}x_j \right), \quad k = n, \dots, 1, \tag{I.60}$$

à condition que $r_{kk} \neq 0$ pour $k = 1, \dots, n$. La description suivante de l'algorithme de Gauss montre que ceci peut être évité en permutant des équations.

La transformation du système d'équations linéaires donné en Eq. (I.1) vers la forme (I.59) peut être formalisée d'une manière compacte en utilisant la notation matricielle.

Step 1: On permute d'abord les n équations linéaires tel que l'élément $a_{11} \neq 0$ et $|a_{11}|$ soit maximal dans la première colonne de la matrice \mathbf{A} (pivotisation). On évite ainsi de diviser par des petits nombres om même par 0. Ensuite on construit

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{A}}_{\mathbf{A}^{(1)}} \cdot \mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{y}}_{\mathbf{y}^{(1)}}$$

où $\mathbf{A}^{(1)}$ a la forme

$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}.$$

Step 2: (après pivotisation de $\mathbf{A}^{(1)}$)

$$\mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & -\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{\mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{A}^{(1)}}_{\mathbf{A}^{(2)}} \cdot \mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{y}^{(1)}}_{\mathbf{y}^{(2)}},$$

où $\mathbf{A}^{(2)}$ a la forme

$$\mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Step n – 1: (après pivotisation de $\mathbf{A}^{(n-2)}$)

$$\mathbf{L}_{n-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -\frac{a_{n,n-1}^{(n-2)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-2)}} & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{\mathbf{L}_{n-1} \cdot \mathbf{A}^{(n-2)}}_{\mathbf{A}^{(n-1)} \equiv \mathbf{R}} \cdot \mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{L}_{n-1} \cdot \mathbf{y}^{(n-2)}}_{\mathbf{y}^{(n-1)} \equiv \mathbf{z}},$$

où $\mathbf{A}^{(n-1)}$ a la forme triangulaire supérieure recherchée,

$$\mathbf{A}^{(n-1)} \equiv \mathbf{R} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & a_{13}^{(n-1)} & \dots & a_{1n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & a_{23}^{(n-1)} & \dots & a_{2n}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(n-1)} & \dots & a_{3n}^{(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$

La solution d'un système d'équations linéaires peut mener aux situations suivantes :

Il y a exactement une solution: Ceci est le cas si

$$r_{kk} \neq 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (\text{I.61})$$

Il y a un ensemble de solutions: Ceci est le cas si \mathbf{R} et \mathbf{z} ont la forme

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{R}} & \tilde{\mathbf{S}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{z}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

où $\tilde{\mathbf{R}}$ est une matrice triangulaire supérieure de dimensions $m \times m$, avec $m < n$, $\tilde{\mathbf{z}}$ un vecteur de colonne de longueur m et $\tilde{\mathbf{S}}$ une matrice quelconque de dimensions $m \times n$. Dans ce cas la solution pour \mathbf{x} peut être écrite sous la forme

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{R}}^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{z}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \mathbf{x}_h, \quad (\text{I.62})$$

où \mathbf{x}_h est la solution de

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_h = \mathbf{0}. \quad (\text{I.63})$$

Une solution non-triviale peut toujours être trouvée. Avec la forme explicite

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{R}} & \tilde{\mathbf{S}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

on voit \mathbf{u} est la solution du système d'équations linéaires

$$\tilde{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{u} = -\tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{v},$$

où \mathbf{v} peut être arbitraire,

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-m} \end{pmatrix}, \quad \alpha_k \in \mathbb{R}. \quad (\text{I.64})$$

Ceci montre que

$$\mathbf{x}_h = \begin{pmatrix} -\tilde{\mathbf{R}}^{-1} \cdot \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{v} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}. \quad (\text{I.65})$$

On appelle l'espace engendré par l'ensemble des vecteurs $\mathbf{x}_h(\alpha_1, \dots, \alpha_{n-m})$ le *noyau* de la matrice \mathbf{A} .

Il y n'a pas de solutions: Ceci est le cas si \mathbf{R} et \mathbf{z} ont la forme

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{R}} & \tilde{\mathbf{S}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{z}} \\ \boldsymbol{\xi} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}.$$

Exemple I.3. Algorithme de Gauss, une solution unique: On considère le système $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$ de l'exemple I.1, où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Step 1:

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & -5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Step 2:

$$\mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{a}, \quad \mathbf{y}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{z}.$$

La solution de $\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}$ est

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \\ -1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{y} \quad \square$$

Exemple I.4. Algorithme de Gauss, ensemble de solutions: On considère le système $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$, où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Step 1:

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & -4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Step 2:

$$\mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{a}, \quad \mathbf{y}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{z}.$$

La solution de $\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}$ est

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

I.4.2. Algorithme de Gauss et décomposition LU. L'algorithme de Gauss est directement liée à la décomposition dite "LU" de la matrice \mathbf{A} des coefficients

$$\boxed{\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}} \quad (\text{I.66})$$

où \mathbf{L} est triangulaire inférieure (*lower diagonal*) et \mathbf{U} triangulaire supérieure (*upper diagonal*),

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.67})$$

Avec Eq. (I.66) et la description de l'algorithme de Gauss (voir section I.4.1) on écrit donc

$$\mathbf{L}_1 \cdot \dots \cdot \mathbf{L}_{n-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{L}_1 \cdot \dots \cdot \mathbf{L}_{n-1} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{U}, \quad \text{où } \mathbf{U} \equiv \mathbf{R}, \quad (\text{I.68})$$

supposant la décomposition LU est unique. La construction de \mathbf{L} montre que ceci est effectivement le cas. On remarque d'abord que

$$(\mathbf{L}_1 \cdot \dots \cdot \mathbf{L}_{n-1}) \cdot \mathbf{L} = \mathbf{1}, \quad (\text{I.69})$$

et par conséquent

$$\mathbf{L} = (\mathbf{L}_1 \cdot \dots \cdot \mathbf{L}_{n-1})^{-1} = \mathbf{L}_1^{-1} \cdot \dots \cdot \mathbf{L}_{n-1}^{-1}. \quad (\text{I.70})$$

Les matrices inverses \mathbf{L}_k^{-1} ($k = 1, \dots, n-1$) sont facilement obtenues en écrivant les matrices \mathbf{L}_k sous la forme

$$\mathbf{L}_k = \mathbf{1} + \delta \mathbf{L}_k, \quad (\text{I.71})$$

où les matrices $\delta\mathbf{L}_k$ sont données par

$$\delta\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta\mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & -\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

$$\dots, \delta\mathbf{L}_{n-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -\frac{a_{n,n-1}^{(n-2)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-2)}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.72})$$

En utilisant que

$$\delta\mathbf{L}_k \cdot \delta\mathbf{L}_k = \mathbf{0} \quad (\text{I.73})$$

il suit

$$\mathbf{L}_k^{-1} \cdot \mathbf{L}_k = (\mathbf{1} - \delta\mathbf{L}_k) \cdot (\mathbf{1} + \delta\mathbf{L}_k) = \mathbf{1} + \delta\mathbf{L}_k \cdot \delta\mathbf{L}_k = \mathbf{1}.$$

et par conséquence

$$\mathbf{L}_k^{-1} = \mathbf{1} - \delta\mathbf{L}_k.$$

La matrice \mathbf{L} de la décomposition LU devient donc

$$\mathbf{L} = (\mathbf{1} - \delta\mathbf{L}_1) \cdot \dots \cdot (\mathbf{1} - \delta\mathbf{L}_{n-1}). \quad (\text{I.74})$$

Ce paragraphe montre qu'on peut utiliser la décomposition LU d'une matrice \mathbf{A} , qui est implémentée dans toute bibliothèque numérique pour les opérations standard en algèbre linéaire, afin de construire explicitement, et sans calcul manuel, le système d'équations linéaires qui sont obtenues par l'algorithme de Gauss. Avec $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$ on obtient le système d'équations transformé

$$\boxed{\mathbf{R} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z} \quad \text{où} \quad \mathbf{R} = \mathbf{U} \quad \text{et} \quad \mathbf{z} = \mathbf{L}^{-1} \cdot \mathbf{y}} \quad (\text{I.75})$$

Nous allons utiliser cette approche dans le calcul des vecteurs propres d'une matrice.

I.4.3. Algorithme de Gram-Schmid. On considère n vecteurs de colonne, \mathbf{a}_k , de longueur n quelconque, qui sont regroupés sous forme matricielle

$$\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n). \quad (\text{I.76})$$

On suppose que

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad (\text{I.77})$$

i.e. que le système d'équation linéaires, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$, n'a que la solution triviale, $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Ceci dit qu'aucune colonne \mathbf{a}_k peut être écrite comme combinaison linéaire des autres. De cette manière n'importe quel vecteur de colonne de longueur n peut être écrite comme combinaison linéaire des colonnes \mathbf{a}_k , que forment de cette manière une base (voir section I.6).

Partant des colonnes $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$, on cherche maintenant une autre base, $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$, qui est orthonormée,

$$\mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{q}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.78})$$

Utilisant la définition d'un projecteur sur un vecteur \mathbf{u} ,

$$\mathbf{P}(\mathbf{u}) := \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}^T}{\mathbf{u}^T \cdot \mathbf{u}},$$

la méthode Gram-Schmidt consiste à construire cette base orthonormale successivement, faisant en sorte que tout nouveau vecteur soit orthogonal à tous les vecteurs précédents et normalisant les vecteurs construits ainsi à la fin :

$$\begin{array}{ll} \mathbf{u}_1 = \mathbf{a}_1 & \mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{u}_1}{\|\mathbf{u}_1\|} \\ \mathbf{u}_2 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{P}(\mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{u}_2}{\|\mathbf{u}_2\|} \\ \mathbf{u}_3 = \mathbf{a}_3 - \mathbf{P}(\mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{a}_3 - \mathbf{P}(\mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{a}_3 & \mathbf{q}_3 = \frac{\mathbf{u}_3}{\|\mathbf{u}_3\|} \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{u}_n = \mathbf{a}_n - \sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{P}(\mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{a}_n & \mathbf{q}_n = \frac{\mathbf{u}_n}{\|\mathbf{u}_n\|} \end{array}$$

Ceci montre que la matrice \mathbf{Q} peut être écrite sous la forme

$$\boxed{\mathbf{Q} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}} \quad (\text{I.79})$$

où les colonnes de \mathbf{Q} sont les vecteurs \mathbf{q}_j ($j = 1, \dots, n$) construits d'après le schéma décrit ci-dessus,

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \quad (\text{I.80})$$

et \mathbf{R} est de forme triangulaire supérieure,

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \cdots & r_{2n} \\ 0 & 0 & r_{33} & \cdots & r_{3n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{pmatrix}. \quad (\text{I.81})$$

Par construction la matrice \mathbf{Q} est orthogonale,

$$\boxed{\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{1} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^T} \quad \text{ou bien} \quad \boxed{\mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{q}_j = \delta_{ij}} \quad (\text{I.82})$$

I.4.3.1. *Matrice inverse, solutions d'équations linéaires.* La méthode d'orthogonalisation de Gram-Schmidt peut être utilisée pour la solution de systèmes d'équations linéaires. On note d'abord l'éq. (I.79) montre que

$$\mathbf{Q} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{R} \Leftrightarrow \mathbf{1} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q}^T,$$

ce qui veut dire

$$\boxed{\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q}^T} \quad (\text{I.83})$$

La solution du système

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}.$$

s'écrit alors comme

$$\boxed{\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{y}} \quad (\text{I.84})$$

Exemple I.5. Matrice inverse par orthonormalization: On considère de nouveau le système $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$ de l'exemple I.1, où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Pour cet exemple on a $\mathbf{Q} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}$, où

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{10}{\sqrt{21}} & \frac{13}{\sqrt{6}} \\ 0 & \sqrt{\frac{7}{3}} & -8\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{6} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{4}{\sqrt{21}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \sqrt{\frac{2}{7}} & \frac{1}{\sqrt{21}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & -\frac{2}{\sqrt{21}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}.$$

On vérifie que $\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^T = \mathbf{1}$ et que (voir exemple I.1)

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q}^T = \begin{pmatrix} -4 & 4 & -1 \\ 4 & -5 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \end{pmatrix},$$

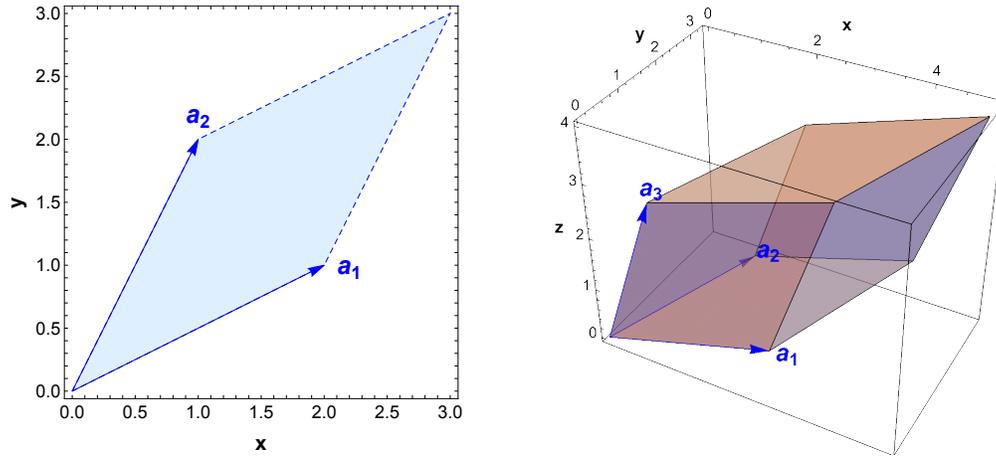


FIGURE 1. **A gauche** : Parallélipède engendré par les vecteurs de de colonne de matrice de dimensions 2×2 donnée par l'équation (I.88). **A droite** : Idem pour une matrice de dimensions 3×3 donnée par l'équation (I.89).

tel que

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{y} = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \\ -1 \end{pmatrix}$$

est la solution de système d'équations linéaires posé.

I.5. Déterminants

I.5.1. Définition. Le concept de déterminant est étroitement lié à celui de matrices, plus précisément de matrices quadratiques. Le déterminant d'une matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n) \quad (\text{I.85})$$

est le volume du parallélipède engendré par les vecteurs $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$. La définition est

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{\{j_1, j_2, \dots, j_n\} = P(1, 2, \dots, n)} (-1)^{\sigma(P)} a_{1j_1} a_{2j_2} \dots a_{nj_n} \quad (\text{I.86})$$

où la somme s'étend sur toutes les permutations $P(1, 2, \dots, n)$ de $1, 2, \dots, n$ et $\sigma(P)$ est le nombre de permutations d'éléments adjacents qui est nécessaire

afin de produire la permutation P respective. Souvent on utilise la notation

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \equiv \det(\mathbf{A}). \quad (\text{I.87})$$

Pour $n = 2$ on a

$$\det(\mathbf{A}) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

Les permutations sont ici

$$P = \left\{ \begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{array} \right\}, \quad (-1)^{\sigma(P)} = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \end{array} \right\}.$$

Pour $n = 3$ on obtient

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{A}) &= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ &\quad - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}. \end{aligned}$$

Les permutations sont ici

$$P = \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{array} \right\}, \quad (-1)^{\sigma(P)} = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{array} \right\}.$$

La figure 1 montre les parallélépipèdes engendrés, respectivement, pour la matrice 2×2 (à gauche)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A}) = 3, \quad (\text{I.88})$$

et pour la matrice 3×3 (à droite)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A}) = 24. \quad (\text{I.89})$$

I.5.2. Dépendance linéaire de vecteurs. On note que la définition (I.86) peut être obtenue d'une directe en introduisant formellement des vecteurs de bases $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$, tel que

$$\vec{a}_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} \vec{e}_i$$

est le vecteur correspondant à la j -ième colonne \mathbf{a}_j de la matrice \mathbf{A} , qui est donnée par l'éq. (I.85). Avec la définition d'un produit extérieur anti-commutatif,

$$\vec{a} \wedge \vec{b} = -\vec{b} \wedge \vec{a} \quad (\text{I.90})$$

on a

$$\boxed{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 \wedge \dots \wedge \vec{a}_n = \det(\mathbf{A}) \vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2 \wedge \dots \wedge \vec{e}_n} \quad (\text{I.91})$$

Un exemple simple pour $n = 2$ illustre la définition d'un déterminant suivant la définition (I.91) :

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 &= (a_{11}\vec{e}_1 + a_{21}\vec{e}_2) \wedge (a_{12}\vec{e}_1 + a_{22}\vec{e}_2) \\ &= a_{11}a_{12} \underbrace{\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_1}_{=0} + a_{11}a_{22}\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2 + a_{21}a_{12} \underbrace{\vec{e}_2 \wedge \vec{e}_1}_{=-\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2} + a_{21}a_{22} \underbrace{\vec{e}_2 \wedge \vec{e}_2}_{=0} \\ &= (a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12})\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2 = \det(\mathbf{A})\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2. \end{aligned}$$

Il est important de comprendre que la définition (I.90) n'est pas le produit vectoriel bien connu. La définition (I.91) montre bien que la dépendance linéaire de vecteurs \vec{a} et \mathbf{a} , respectivement, mène à $\det(\mathbf{A}) = 0$. Supposons que

$$\vec{a}_n = \sum_{k=1}^r c_k \vec{a}_k.$$

Dans ce cas

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 \wedge \dots \wedge \vec{a}_n &= \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 \wedge \dots \wedge \left(\sum_{k=1}^r c_k \vec{a}_k \right) \\ &= \sum_{k=1}^r c_k \underbrace{\left(\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 \wedge \dots \wedge \boxed{\vec{a}_k} \wedge \dots \wedge \boxed{\vec{a}_k} \right)}_{=0} = \underbrace{\det(\mathbf{A})}_{=0} \vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2 \wedge \dots \wedge \vec{e}_n. \end{aligned}$$

On peut alors conclure

$$\boxed{\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\} \text{ sont linéairement dépendant} \Leftrightarrow \det(\mathbf{A}) = 0} \quad (\text{I.92})$$

I.5.3. Propriétés particulières de déterminants. Les propriétés de base d'un déterminant d'une matrice quadratique \mathbf{A} sont

$$\boxed{\det(\mathbf{A}^T) = \det(\mathbf{A})} \quad (\text{I.93})$$

et pour le produit de deux matrices

$$\boxed{\det(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B})} \quad (\text{I.94})$$

Une conséquence immédiate est

$$\det(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{A}^{-1}) = \det(\mathbf{1}) = 1$$

et par conséquence

$$\boxed{\det(\mathbf{A}^{-1}) = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}} \quad (\text{I.95})$$

Une autre propriété très importante est la définition récursive d'un déterminant. Partant de la matrice (I.85) on construit ma matrice des mineurs, $\mathbf{A}^{(\min)}$, où l'élément i, j est donné par le déterminant de la matrice $(n-1) \times (n-1)$ qu'on obtient en éliminant la i -ème ligne et la j -ème colonne,

$$\mathbf{A}^{(\min)} = \begin{pmatrix} \det(\mathbf{A}_{1,1}^{(-)}) & \dots & \det(\mathbf{A}_{1,n}^{(-)}) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \det(\mathbf{A}_{n,1}^{(-)}) & \dots & \det(\mathbf{A}_{n,n}^{(-)}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.96})$$

Avec ceci le déterminant de \mathbf{A} peut être obtenu par une somme de déterminant de dimension $(n-1) \times (n-1)$, suivant une ligne, i , ou une colonne, j , de \mathbf{A} :

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{j=1}^n a_{ij} (-1)^{i+j} a_{ij}^{(\min)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{I.97})$$

$$= \sum_{i=1}^n a_{ij} (-1)^{i+j} a_{ij}^{(\min)}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (\text{I.98})$$

Pour une matrice triangulaire de la forme

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

la règle de développement de déterminants donne

$$\det(\mathbf{U}) = \prod_{i=1}^n u_{ii} \quad \text{et} \quad \det(\mathbf{L}) = \prod_{i=1}^n l_{ii} \quad (\text{I.99})$$

Exemple I.6. Determinant et matrice de mineurs: On considère la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -2 \\ 2 & 4 & 3 \\ 1 & -3 & 0 \end{pmatrix}.$$

dont le déterminant est $\det(\mathbf{A}) = 4$. Ici la matrice des mineurs est

$$\mathbf{A}^{(\min)} = \begin{pmatrix} 9 & -3 & -10 \\ -6 & 2 & -10 \\ 11 & 13 & 10 \end{pmatrix} \quad \text{et le schéma de signes} \quad \begin{pmatrix} + & - & + \\ - & + & - \\ + & - & + \end{pmatrix}.$$

Développant $\det(\mathbf{A})$ suivant le première ligne donne

$$\det(\mathbf{A}) = 3 \times 9 - 1 \times (-3) - 2 \times (-10) = 50$$

et suivant la première colonne

$$\det(\mathbf{A}) = 3 \times 9 - 2 \times (-6) + 1 \times 11 = 50.$$

On vérifie que le schéma fonctionne aussi pour les autres lignes et colonnes.

I.5.4. Determinants et solution d'équations linéaires. Les déterminants permettent aussi de calculer l'inverse d'une matrice et de résoudre des systèmes d'équations linéaires. Cette application élégante n'est pourtant pas utilisée pour des applications numériques. On définit la matrice des cofacteurs par

$$\mathbf{A}^{(\text{adj})}, \quad \text{où} \quad a_{ij}^{(\text{adj})} = (-1)^{i+j} a_{ji}^{(\min)} \quad (\text{I.100})$$

et avec ceci la matrice inverse devient

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \mathbf{A}^{(\text{adj})}, \quad \det(\mathbf{A}) \neq 0 \quad (\text{I.101})$$

Les solutions d'un système d'équations linéaires de la forme

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}, \quad \mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n) \quad (\text{I.102})$$

peuvent être calculées par le calcul de déterminants, en utilisant la règle de Cramer.¹

$$x_k = \frac{\det(\mathbf{A}_k)}{\det(\mathbf{A})}, \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{I.103})$$

$$\mathbf{A}_k = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{k-1}, \mathbf{y}, \mathbf{a}_{k+1}, \dots, \mathbf{a}_n) \quad (\text{I.104})$$

Dans la matrice \mathbf{A}_k la k -ième colonne de la matrice \mathbf{A} est remplacée par \mathbf{y} .

1. Gabriel Cramer, mathématicien suisse 1704–1752.

Exemple I.7. Règle de Cramer et inverse d'une matrice: On considère encore le système d'équations linéaires

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 4 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Ici on a $\det(\mathbf{A}) = 8$ et

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 6 \\ 1 & 6 & 8 \\ 2 & 8 & 8 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A}_1) = -8$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 6 \\ 4 & 1 & 8 \\ 6 & 2 & 8 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A}_2) = 12,$$

$$\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 4 & 6 & 1 \\ 6 & 8 & 2 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A}_3) = -4.$$

Comme $\det(\mathbf{A}) = 8$ on trouve

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Pour cet exemple on a

$$\mathbf{A}^{(\text{adj})} = \begin{pmatrix} -16 & 16 & -4 \\ 16 & -20 & 8 \\ -4 & 8 & -4 \end{pmatrix}.$$

et par conséquent

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \mathbf{A}^{(\text{adj})} = \begin{pmatrix} -2 & 2 & -\frac{1}{2} \\ 2 & -\frac{5}{2} & 1 \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

On vérifie que $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$.

I.6. Vecteurs et changements de base

Nous commençons cette section par une relation triviale pour un vecteur de colonne, \mathbf{v} , de dimensions n , en écrivant $\mathbf{v} = \mathbf{1} \cdot \mathbf{v}$, ce qui se lit explicitement comme

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

où bien comme

$$\mathbf{v} = v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + v_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + v_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Formellement le vecteur de colonne \mathbf{v} est représenté dans la base ortho-normée, $\mathcal{E}_n = \{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$,

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n v_i \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{e}_i^T \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}. \quad (\text{I.105})$$

On voit d'une manière évidente que tout vecteur de colonne \mathbf{v} de dimensions n peut être exprimé dans cette base \mathcal{E}_n . Pour introduire le concept de changement de base nous définissons

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) \quad (\text{I.106})$$

et formellement

$$\mathbf{v} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_E, \quad v_i = v_i^{(E)}, \quad (\text{I.107})$$

où \mathbf{v}_E sont les composantes de \mathbf{v} dans la base \mathcal{E}_n . Comme $\mathbf{E} = \mathbf{1}$ on a pour ce cas particulier $\mathbf{v} = \mathbf{v}_E$. Considérons maintenant une autre base, \mathcal{B}_n , avec les vecteurs $\{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$, regroupés dans la matrice

$$\mathbf{B} = (\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n) \quad (\text{I.108})$$

Chaque vecteur de base, \mathbf{b}_k , est une superposition des vecteurs de la base \mathcal{E}_n ,

$$\mathbf{b}_k = \sum_{i=1}^n b_{ki} \mathbf{e}_i \quad (\text{I.109})$$

Comme $\mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{E}$, on peut dire que la matrice \mathbf{B} transforme formellement les vecteurs de la base \mathcal{E}_n en les vecteurs de la base \mathcal{B}_n . De la même façon que la relation $\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_E = \mathbf{0}$ implique trivialement $\mathbf{v}_E = \mathbf{0}$ on demande que

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{v}_B = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{v}_B = \mathbf{0}, \quad \text{ou bien que } \det(\mathbf{B}) \neq 0, \quad (\text{I.110})$$

ce qui assure que \mathcal{B}_n est aussi une base et que la matrice \mathbf{B}^{-1} existe. Dans ce cas nous pouvons écrire

$$\mathbf{v} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{v}_E,$$

ou bien

$$\boxed{\mathbf{v} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{v}_B, \quad \text{avec} \quad \mathbf{v}_B = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{v}_E} \quad (\text{I.111})$$

En écrivant explicitement

$$\mathbf{v} = \sum_{k=1}^n v_k^{(B)} \mathbf{b}_k \quad (\text{I.112})$$

il est évident que les coefficients $v_k^{(B)}$, regroupés dans le vecteur de colonne \mathbf{v}_B , sont les composantes de \mathbf{v} par rapport à la base \mathcal{B}_n . Explicitement on a

$$\begin{pmatrix} v_1^{(B)} \\ \vdots \\ v_n^{(B)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11}^{-1} & \cdots & B_{1n}^{-1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ B_{n1}^{-1} & \cdots & B_{nn}^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1^{(E)} \\ \vdots \\ v_n^{(E)} \end{pmatrix}. \quad (\text{I.113})$$

Il est important de comprendre que les vecteurs de la nouvelle base, \mathcal{B}_n , ne sont *a priori* pas orthonormés. On a en général

$$\boxed{\mathbf{B}^T \cdot \mathbf{B} \equiv \mathbf{G} \stackrel{\text{a priori}}{\neq} \mathbf{1}} \quad (\text{I.114})$$

Si $\mathbf{G} = \mathbf{1}$ la matrice \mathbf{B} est alors orthogonale, c.a.d. $\mathbf{b}_i^T \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$. Pour des vecteurs complexes tout reste valable, écrivant

$$\mathbf{B}^H \cdot \mathbf{B} \equiv \mathbf{G} \stackrel{\text{a priori}}{\neq} \mathbf{1}, \quad (\text{I.115})$$

et si $\mathbf{G} = \mathbf{1}$ la matrice \mathbf{B} est unitaire, tel que $\mathbf{b}_i^H \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$.

I.7. Transformations linéaires et changements de base

On considère une transformation linéaire de la forme

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}} \quad (\text{I.116})$$

où \mathbf{x} et \mathbf{y} sont donnés par rapport à la base \mathcal{E}_n . Utilisant la définition de la matrice \mathbf{B} selon l'éq. (I.108) et partant de la relation (I.116) on peut maintenant écrire

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

et multiplication avec \mathbf{B}^{-1} par la gauche donne

$$\underbrace{\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}_{\mathbf{A}^{(B)}} \cdot \underbrace{\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{x}}_{\mathbf{x}^{(B)}} = \underbrace{\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{y}}_{\mathbf{y}^{(B)}}.$$

Par rapport à la base \mathcal{B} on obtient donc un système d'équations linéaires équivalent

$$\boxed{\mathbf{A}^{(B)} \cdot \mathbf{x}^{(B)} = \mathbf{y}^{(B)}, \quad \text{où} \quad \mathbf{A}^{(B)} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}} \quad (\text{I.117})$$

et $\mathbf{x}^{(B)} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{x}$ et $\mathbf{y}^{(B)} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{y}$ d'après la section précédente.

On note que la transformation (I.117) laisse invariant le déterminant :

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{A}^{(B)}) &= \det(\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \det(\mathbf{B}^{-1})\det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B}) \\ &= \frac{1}{\det(\mathbf{B})}\det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B}) = \det(\mathbf{A}), \end{aligned}$$

bref

$$\boxed{\det(\mathbf{A}^{(B)}) = \det(\mathbf{A})} \quad (\text{I.118})$$

Un autre invariant est la trace d'une matrice qui est définie par

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n a_{ii}. \quad (\text{I.119})$$

On montre que pour deux matrice quadratiques, \mathbf{A} et \mathbf{B} , de dimensions $n \times n$

$$\text{tr}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}), \quad (\text{I.120})$$

et cette relation peut être utilisée avec

$$\text{tr}(\mathbf{A}^{(B)}) = \text{tr}(\mathbf{B}^{-1} \cdot \boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}) = \text{tr}(\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}} \cdot \mathbf{B}^{-1}) = \text{tr}(\mathbf{A}),$$

et par conséquent

$$\boxed{\text{tr}(\mathbf{A}^{(B)}) = \text{tr}(\mathbf{A})} \quad (\text{I.121})$$

I.8. Formes spéciales de matrices

I.8.1. Valeurs et vecteurs propres d'une matrice. Quand on regarde une matrice comme transformation linéaire d'un vecteur on peut considérer le cas spécial où une tel transformation donne un nouveau vecteur qui est parallèle au vecteur original,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}. \quad (\text{I.122})$$

Les vecteurs $\{\mathbf{u}_i\}$ qui vérifient cette relation sont les *vecteurs propres* de la matrice et les constantes $\{\lambda_i\}$ les valeurs propres associées. En écrivant l'éq. (I.122) sous la forme

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{I.123})$$

on voit qu'une solution non-triviale, $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$, nécessite que

$$\boxed{\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0} \quad (\text{I.124})$$

Pour une matrice $n \times n$ le déterminant $\det(\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \lambda \mathbf{1})$ est un polynome d'ordre n en λ ,

$$p(\lambda) \equiv \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = a_0 + a_1 \lambda + \dots + a_n \lambda^n, \quad (\text{I.125})$$

qu'on appelle le *polynôme caractéristique* de la matrice \mathbf{A} . Les racines de ce polynôme sont les valeurs propres

$$\boxed{p(\lambda_i) = 0} \quad (\text{I.126})$$

et les vecteurs propres associées, $\{\mathbf{u}_i\}$, vérifient

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i} \quad (\text{I.127})$$

On remarque que les coefficients du polynôme caractéristique peuvent être choisis tel que $a_n = 1$, sans changer les racines. Pour une matrice réelle les racines complexes du polynôme caractéristique se présentent sous forme de paire de racines complexes conjuguées.

On voit facilement qu'une matrice quadratique vérifie son équation caractéristique, qui est défini par

$$p(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^n a_k \mathbf{A}^k. \quad (\text{I.128})$$

Ceci est un exemple pour une fonction d'une matrice qui sera traitée en plus de détails dans la suite. Sachant que $p(\mathbf{A})$ est une matrice, on peut multiplier cette matrice avec un des vecteurs propres de la matrice. Ceci donne

$$p(\mathbf{A}) \cdot \mathbf{u}_j = \left(\sum_{k=0}^n a_k \mathbf{A}^k \right) \cdot \mathbf{u}_j = \underbrace{\left(\sum_{k=0}^n a_k \lambda_j^k \right)}_{p(\lambda_j)=0} \mathbf{1} \cdot \mathbf{u}_j = \mathbf{0}.$$

Comme $\mathbf{u}_j \neq \mathbf{0}$, on peut conclure que

$$\boxed{p(\mathbf{A}) = \mathbf{0}}$$

On remarque que les cas suivant peuvent se présenter pour une matrice de dimensions $n \times n$:

- (1) Le polynôme $p(\lambda)$ a n racines distinctes, $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Dans ce cas, les vecteurs propres associées, $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$, forment une base du \mathbb{R}^n .
- (2) Le polynôme $p(\lambda)$ a $p < n$ racines distinctes, $\lambda_1, \dots, \lambda_p$, avec les multiplicités m_1, \dots, m_p , respectivement, tel que $\sum_{k=1}^p m_k = n$. A chaque valeur propre, λ_k , sont associés m_k vecteurs propres linéairement indépendant, $\mathbf{u}_{k,1}, \dots, \mathbf{u}_{k,m_k}$. Dans ce cas l'ensemble des vecteurs propres de la matrice forme toujours une base du \mathbb{R}^n .
- (3) Le polynôme $p(\lambda)$ a $p < n$ racines distinctes, $\lambda_1, \dots, \lambda_p$, avec les multiplicités m_1, \dots, m_p , respectivement, tel que $\sum_{k=1}^p m_k = p$. A chaque valeur propre, λ_k , sont associés $n_k < m_k$ vecteurs propres linéairement indépendant, $\mathbf{u}_{k,1}, \dots, \mathbf{u}_{k,n_k}$. Dans ce cas l'ensemble des vecteurs propres de la matrice ne forment pas une base du \mathbb{R}^n .

Dans les cas 1 et 2 la matrice \mathbf{A} est diagonalisable. On considère quelques exemples

(1) **Matrice non-symétrique.** On considère la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ici le polynôme caractéristique est

$$p(\lambda) = \lambda^2 - 7\lambda + 6 = (\lambda - 6)(\lambda - 1).$$

La condition $p(\lambda) = 0$ mène aux valeurs et vecteurs propres

$$\lambda_{1,2} = \{6, 1\}, \quad \mathbf{u}_{1,2} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} \frac{4}{\sqrt{17}} \\ \frac{1}{\sqrt{17}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right) \right\}.$$

La matrice \mathbf{A} correspond donc au cas 1. Les vecteurs propres sont normalisés, mais ne forment pas une base orthonormée, car la matrice métrique a la forme

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{3}{\sqrt{34}} \\ -\frac{3}{\sqrt{34}} & 1 \end{pmatrix}, \quad G_{ij} = \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{u}_j.$$

(2) **Matrice symétrique.** On donne la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ici le polynôme caractéristique est

$$p(\lambda) = \lambda^2 - 2\lambda - 3 = (\lambda - 3)(\lambda + 1).$$

La condition $p(\lambda) = 0$ mène aux valeurs et vecteurs propres

$$\lambda_{1,2} = \{3, -1\}, \quad \mathbf{u}_{1,2} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right) \right\}.$$

La matrice \mathbf{A} correspond donc également au cas 1, mais ici les vecteurs propres normalisés forment une base orthonormée,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad G_{ij} = \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{u}_j,$$

car \mathbf{A} est symétrique.

- (3) **Matrice non-symétrique, valeurs propres multiples.** On considère la matrice 3×3

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -2 & 6 & -3 \\ -4 & 9 & -4 \\ -4 & 8 & -3 \end{pmatrix}.$$

Ici le polynôme caractéristique a la forme

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + 4\lambda^2 - 5\lambda + 2 = -(\lambda - 2)(\lambda - 1)^2,$$

ce qui montre que la valeur propre 1 a la multiplicité 2. Ici les valeurs propres et vecteurs propres associés sont donc

$$\lambda_{1,2,3} = \{2, 1, 1\}, \quad \mathbf{u}_{1,2,3} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{41}} \\ \frac{4}{\sqrt{41}} \\ \frac{4}{\sqrt{41}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

La matrice \mathbf{A} est diagonalisable, mais les vecteurs propres normalisés ne forment pas une base orthonormée,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{82}} & 2\sqrt{\frac{5}{41}} \\ \frac{1}{\sqrt{82}} & 1 & -\sqrt{\frac{2}{5}} \\ 2\sqrt{\frac{5}{41}} & -\sqrt{\frac{2}{5}} & 1 \end{pmatrix}, \quad G_{ij} = \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{u}_j.$$

- (4) **Matrice symétrique, valeurs propres multiples.** On considère la matrice 3×3 symétrique

$$\mathbf{A} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 13 & -2 & 4 \\ -2 & 10 & -2 \\ 4 & -2 & 13 \end{pmatrix}.$$

Le polynôme caractéristique est

$$p(\lambda) = \lambda^3 + 4\lambda^2 - 5\lambda + 2 = -(\lambda - 2)(\lambda - 1)^2.$$

Ici $\lambda = 1$ est une valeur propre de multiplicité 2. On trouve les valeurs et vecteurs propres

$$\lambda_{1,2,3} = \{2, 1, 1\}, \quad \mathbf{u}_{1,2,3} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Les vecteurs propres forment une base et sont normalisés, mais pas encore orthonormés

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & 1 \end{pmatrix}, \quad G_{ij} = \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{u}_j.$$

Les deux vecteurs propres correspondant à la valeur propre $\lambda = 1$ engendrent un sous-espace $\mathbb{R}^2 \subset \mathbb{R}^3$. Ils peuvent être orthogonalisés (par la méthode de Gram-Schmidt par exemple), car toute combinaison linéaire de \mathbf{u}_2 et \mathbf{u}_3 est également un vecteur propre pour $\lambda = 1$. Ceci donne

$$\mathbf{u}'_{1,2,3} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{3\sqrt{2}} \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{1}{3\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right\}$$

et on vérifie que

$$\mathbf{G}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad G'_{ij} = \mathbf{u}'_i{}^T \cdot \mathbf{u}'_j.$$

- (5) **Matrice non-diagonalisable.** On considère finalement une matrice qui n'est pas diagonalisable,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 4 & -1 & 0 \\ 8 & -7 & 3 \end{pmatrix}$$

dont les polynôme caractéristique a la forme

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + 4\lambda^2 - 5\lambda + 2 = -(\lambda - 2)(\lambda - 1)^2.$$

Ici les valeurs et vecteurs propres (normalisés) sont

$$\lambda_{1,2,3} = \{2, 1, 1\}, \quad \mathbf{u}_{1,2} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{41}} \\ \frac{4}{\sqrt{41}} \\ \frac{4}{\sqrt{41}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ \sqrt{\frac{2}{7}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} \end{pmatrix} \right\}.$$

Il y a seulement un vecteur propre $\neq \mathbf{0}$ pour la valeur propre $\lambda = 1$.

I.8.2. Matrices diagonalisables.

I.8.2.1. *Forme spectrale.* Comme déjà indiqué, les matrices pour lesquelles l'ensemble des vecteurs propres $\{\mathbf{u}_i\}$ forment une base, sont *diagonalisables*. Dans ce cas on a n vecteurs propres linéairement indépendants, qui sont associés à n valeurs propres, $\{\lambda_k\}$, dont $m \leq n$ sont différents. Chacun de ces valeurs propres a une multiplicité m_k , tel que $\sum_k m_k = n$. En définissant

$$\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n) = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ u_{n1} & u_{n2} & u_{n3} & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.129})$$

et la matrice diagonale

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad (\text{I.130})$$

l'ensemble des équations (I.127) peut être écrit sous forme matricielle

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}} \quad (\text{I.131})$$

Comme les vecteurs propres $\{\mathbf{u}_i\}$ forment une base il suit que

$$\det(\mathbf{U}) \neq 0 \quad (\text{I.132})$$

et l'inverse existe, tel que

$$\boxed{\mathbf{U}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{\Lambda}} \quad (\text{I.133})$$

Faisant référence à la section (I.7), nous trouvons alors qu'une matrice diagonalisable est diagonale dans la base de ses vecteurs propres. La relation (I.135) peut être inversée et donne

$$\boxed{\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1}} \quad (\text{I.134})$$

On remarque que la matrice inverse de \mathbf{A} est donnée par

$$\boxed{\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}^{-1} \cdot \mathbf{U}^{-1}} \quad (\text{I.135})$$

où

$$\mathbf{\Lambda}^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n^{-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.136})$$

Au cas où la matrice \mathbf{A} est symétrique,

$$\boxed{\mathbf{A}^T = \mathbf{A}} \quad (\text{I.137})$$

il suit de la relation (I.135) que

$$(\mathbf{U}^T)^{-1} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^T = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1}$$

et on peut conclure que $\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1}$, i.e. que la matrice \mathbf{U} est orthogonale

$$\boxed{\mathbf{U}^T \cdot \mathbf{U} = \mathbf{1} \quad \text{ou bien} \quad \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{u}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n} \quad (\text{I.138})$$

Avec invariants présentés dans la section I.7 il suit de la transformation (I.135) que $\det(\mathbf{\Lambda}) = \det(\mathbf{A})$, ce qui montre que

$$\det(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^n \lambda_i. \quad (\text{I.139})$$

De la même façon on a $\text{tr}(\mathbf{\Lambda}) = \text{tr}(\mathbf{A})$, où bien

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i. \quad (\text{I.140})$$

I.8.2.2. *Fonctions de matrices diagonalisables.* On considère une fonction $f(z)$ qui peut être représentée par la série de Taylor

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(0) \frac{z^k}{k!}. \quad (\text{I.141})$$

La fonction $f(\mathbf{A})$ d'une matrice de dimensions $n \times n$ est alors définie par

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \mathbf{A}^k. \quad (\text{I.142})$$

Ici on peut utiliser la représentation (I.135), qui mène à

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^2 &= (\mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1}) \cdot (\mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1}) = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}^2 \cdot \mathbf{U}^{-1}, \\ \mathbf{A}^3 &= \mathbf{A}^2 \cdot \mathbf{A} = (\mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}^2 \cdot \mathbf{U}^{-1}) \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}^3 \cdot \mathbf{U}^{-1} \\ &\vdots \end{aligned}$$

et généralement à

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda}^n \cdot \mathbf{U}^{-1}.$$

Par conséquent

$$\boxed{f(\mathbf{A}) = \mathbf{U} \cdot f(\mathbf{\Lambda}) \cdot \mathbf{U}^{-1}} \quad (\text{I.143})$$

où $f(\mathbf{\Lambda})$ est donnée par

$$f(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \mathbf{\Lambda}^k = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & f(\lambda_3) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & f(\lambda_n) \end{pmatrix}. \quad (\text{I.144})$$

La fonction $f(\mathbf{A})$ existe si $f(\lambda_j)$ converge pour chaque valeur propre λ_j .

Exemple I.8. Fonction d'une matrice: Regardons un exemple simple, où

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

et où on souhaite calculer $f(\mathbf{A}) = \exp(\mathbf{A})$. Les valeurs propres de \mathbf{A} sont

$$\lambda_{1,2} = \{3, -1\}$$

et les vecteurs propres (normalisés) associées

$$\mathbf{u}_{1,2} = \left\{ \left(\begin{array}{c} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{array} \right) \right\}.$$

Avec ceci on a

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \mathbf{U}^T.$$

On vérifie que

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

et par conséquent

$$\exp(\mathbf{A}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^3 & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2e} + \frac{e^3}{2} & \frac{e^3}{2} - \frac{1}{2e} \\ \frac{e^3}{2} - \frac{1}{2e} & \frac{1}{2e} + \frac{e^3}{2} \end{pmatrix}.$$

Exemple I.9. Fonction d'une matrice, valeurs propres complexes: On considère la matrice

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et souhaite calculer

$$f(\rho) = \exp(\phi\rho), \quad \phi \in \mathbb{R}.$$

Les valeurs propres de ρ sont

$$\lambda = \{i, -i\}$$

et les vecteurs propres (normalisés) associées

$$\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right\}.$$

Par conséquent

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \quad \mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \mathbf{U}^H,$$

et on peut écrire

$$\rho = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}^{-1}, \quad \mathbf{\Lambda} = \mathbf{U}^{-1} \cdot \rho \cdot \mathbf{U}.$$

Avec ceci

$$\begin{aligned} \exp(\phi\rho) &= \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

On note que cette matrice décrit des rotations de vecteurs dans un plan par un angle ϕ (voir section II.1.1, Eq. II.4) et ρ est le générateur de ces rotations.

I.8.3. Réduction de Jordan.

I.8.3.1. *Définition.* La forme générale (I.127) du problème de vecteurs et valeurs propres ne mène pas pour toute matrice de dimension $n \times n$ à n vecteurs propres qui sont linéairement indépendants, formant une base du \mathbb{R}^n . On peut pourtant toujours trouver une transformation linéaire inversible, représentée par une matrice \mathbf{T} , qui transforme une matrice quadratique en une forme proche de diagonale,

$$\boxed{\mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{J}} \quad (\text{I.145})$$

où \mathbf{J} est la matrice de Jordan "bloc diagonale",

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{J}_2 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{J}_3 & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{J}_m \end{pmatrix}. \quad (\text{I.146})$$

Les blocs individuels ont la dimension $n_l \times n_l$, où n_l est la multiplicité de la valeur propre λ_l , et la forme

$$\mathbf{J}_l = \begin{pmatrix} \lambda_l & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_l & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_l \end{pmatrix}. \quad (\text{I.147})$$

L'équation (I.145) peut être inversé pour écrire exprimer \mathbf{A}

$$\boxed{\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1}} \quad (\text{I.148})$$

On remarque d'abord que les expressions (I.139) et (I.140), respectivement, pour le déterminant et la trace d'une matrice quadratique par ses valeurs propres restent valable pour le cas général,

$$\boxed{\det(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^n \lambda_i} \quad (\text{I.149})$$

et pour la trace

$$\boxed{\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i} \quad (\text{I.150})$$

Exemple I.10. Matrice non-diagonalisable: On considère la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 27 & 48 & 81 \\ -6 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

dont le polynôme caractéristique est

$$p(\lambda) = \begin{vmatrix} 27 - \lambda & 48 & 81 \\ -6 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 30\lambda^2 - 288\lambda + 864.$$

La forme factorisée

$$p(\lambda) = -(\lambda - 12)^2(\lambda - 6)$$

montre que les racines sont

$$\lambda = \{12, 12, 6\}$$

i.e. $\lambda_1 = 12$ avec multiplicité 2 et $\lambda_2 = 6$ avec multiplicité 1. Les vecteurs propres correspondants sont

$$\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\} = \left\{ \begin{pmatrix} 18 \\ -9 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

et ne forment donc pas une base du \mathbb{R}^3 . La matrice \mathbf{A} possède pourtant une réduction de Jordan de la forme

$$\{\mathbf{T}, \mathbf{J}\} = \left\{ \begin{pmatrix} 3 & 18 & 2 \\ -3 & -9 & -\frac{1}{4} \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 1 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix} \right\}$$

qui permet d'écrire

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1}, \quad \text{ou} \quad \mathbf{J} = \mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{T}.$$

On note que

$$\mathbf{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{4}{3} & \frac{9}{2} \\ -\frac{1}{12} & -\frac{2}{3} & -\frac{7}{4} \\ 1 & 4 & 9 \end{pmatrix}.$$

I.8.3.2. *Fonctions de matrices non-diagonalisables.* On considère de nouveau une fonction $f(z)$ qui peut être représentée par la série de Taylor

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(0) \frac{z^k}{k!}, \quad (\text{I.151})$$

tel que

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \mathbf{A}^k. \quad (\text{I.152})$$

Ici la matrice n'est pas diagonalisable, mais à la place de la décomposition spectrale (I.134) on peut utiliser la décomposition Block-Jordan (I.148), qui mène à

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^2 &= (\mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{U}^{-T}) \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1}) = \mathbf{U} \cdot \mathbf{J}^2 \cdot \mathbf{U}^{-1}, \\ \mathbf{A}^3 &= \mathbf{A}^2 \cdot \mathbf{A} = (\mathbf{T} \cdot \mathbf{J}^2 \cdot \mathbf{T}^{-1}) \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J}^3 \cdot \mathbf{T}^{-1} \\ &\vdots \end{aligned}$$

et généralement à

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{A}^n \cdot \mathbf{U}^{-1}. \quad (\text{I.153})$$

Par conséquent

$$\boxed{f(\mathbf{A}) = \mathbf{T} \cdot f(\mathbf{J}) \cdot \mathbf{T}^{-1}} \quad (\text{I.154})$$

où $f(\mathbf{J})$ est donnée par

$$f(\mathbf{J}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \mathbf{J}^k. \quad (\text{I.155})$$

Ici on utilise la forme (I.146) de la matrice de Jordan, \mathbf{J} , dont les blocs \mathbf{J}_l sont donnés par l'éq. (I.147). Pour chaque bloc

$$f(\mathbf{J}_l) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \mathbf{J}_l^k. \quad (\text{I.156})$$

En écrivant

$$\mathbf{J}_l(\lambda) = \underbrace{\begin{pmatrix} \lambda_l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_l & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_l \end{pmatrix}}_{\lambda_l \mathbf{1}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{K}_l} = \lambda \mathbf{1} + \mathbf{K}_l,$$

on obtient

$$\mathbf{J}_l^k(\lambda) = (\lambda \mathbf{1} + \mathbf{K}_l)^k = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \lambda^{k-i} \mathbf{K}_l^i.$$

Si n_l est la dimension de \mathbf{K}_l , les éléments des puissances de la matrice \mathbf{K}_l sont donnés par

$$(\mathbf{K}_l^i)_{mn} = \begin{cases} \delta_{m,m+i} & \text{pour } 0 \leq i \leq n_l - 1, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Pour une matrice \mathbf{K}_l de dimension 3 on trouve par exemple

$$\mathbf{K}_l^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_l^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{K}_l^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_l^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \dots$$

Avec ceci

$$\begin{aligned} f(\mathbf{J}_l(\lambda)) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \left\{ \sum_{i=0}^{n_l-1} \binom{k}{i} \lambda^{k-i} \mathbf{K}_l^i \right\} \\ &= \sum_{i=0}^{n_l-1} \mathbf{K}_l^i \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \binom{k}{i} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \lambda^{k-i} \right\} = \sum_{i=0}^{n_l-1} \mathbf{K}_l^i \frac{f^{(i)}(\lambda_l)}{i!}. \end{aligned}$$

Pour l'exemple ci-dessus

$$f(\mathbf{J}_l(\lambda)) = \begin{pmatrix} f(\lambda_l) & f'(\lambda_l) & \frac{1}{2}f''(\lambda_l) \\ 0 & f(\lambda_l) & f'(\lambda_l) \\ 0 & 0 & f(\lambda_l) \end{pmatrix}.$$

La fonction $f(\mathbf{J})$ est donc donnée par

$$f(\mathbf{J}) = \begin{pmatrix} f(\mathbf{J}_1) & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & f(\mathbf{J}_2) & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & f(\mathbf{J}_3) & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & f(\mathbf{J}_m) \end{pmatrix} \quad (\text{I.157})$$

où la fonction pour chaque bloc s'écrit

$$f(\mathbf{J}_l(\lambda)) = \sum_{i=0}^{n_l-1} \mathbf{K}_l^i \frac{f^{(i)}(\lambda_l)}{i!} \quad (\text{I.158})$$

Exemple I.11. Fonction d'une matrice non-diagonalisable: On considère la matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 27 & 48 & 81 \\ -6 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

de l'exemple I.10 et on cherche la fonction

$$f(\mathbf{A}) = \exp(\mathbf{A}).$$

Avec la décomposition blocs-Jordan

$$\{\mathbf{T}, \mathbf{J}\} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} 3 & 18 & 2 \\ -3 & -9 & -\frac{1}{4} \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 1 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix} \right) \right\}$$

et la fonction

$$f(\mathbf{J}) = \begin{pmatrix} e^6 & 0 & 0 \\ 0 & e^{12} & e^{12} \\ 0 & 0 & e^{12} \end{pmatrix},$$

on obtient

$$f(\mathbf{A}) = \mathbf{T} \cdot f(\mathbf{J}) \cdot \mathbf{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(e^6 + 37e^{12}) & 4(e^6 + 17e^{12}) & \frac{27}{2}(e^6 + 11e^{12}) \\ \frac{1}{2}(-e^6 - 17e^{12}) & -4e^6 - 31e^{12} & -\frac{27}{2}(e^6 + 5e^{12}) \\ \frac{1}{6}(e^6 + 11e^{12}) & \frac{4}{3}(e^6 + 5e^{12}) & \frac{1}{2}(9e^6 + 29e^{12}) \end{pmatrix}.$$

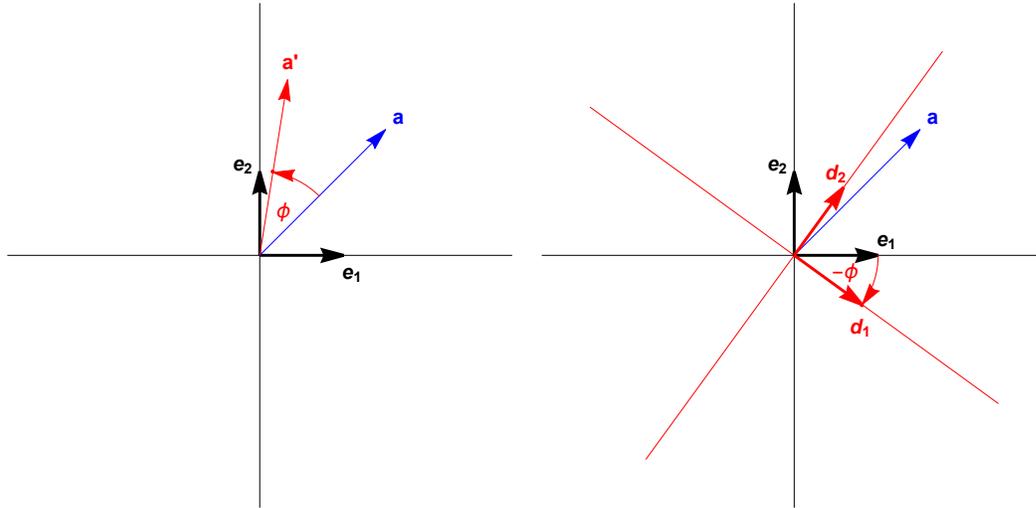


FIGURE 1. **A gauche** : Rotation active d'un vecteur a vers un nouveau vecteur a' dans une base fixe, $\{e_1, e_2\}$. **A droite** : Rotation passive d'un vecteur a qui change de coordonnées à cause d'un changement de base $\{e_1, e_2\} \rightarrow \{d_1, d_2\}$.

Chapitre II

Applications du calcul matriciel

II.1. Rotations

II.1.1. Rotations dans un plan.

II.1.1.1. *Rotations actives.* Nous commençons avec les rotations dans un plan, qui sont paramétrées par un angle de rotation, ϕ . Nous considérons d'abord la rotation active d'un vecteur a dans une base orthonormée, $\{e_1, e_2\}$, et nous regroupant ses composantes par rapport à cette base dans une matrice de colonne,

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^2 a_i \mathbf{e}_i, \quad (\text{II.1})$$

où $\{e_1, e_2\} \equiv \mathcal{E}_2$ forment la base d'un espace euclidien à dimension 2,

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.2})$$

Le vecteur \mathbf{a} subit maintenant une rotation $\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}'$ comme indiqué dans la partie gauche de la figure 1, et le changement des coordonnées est décrit par

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.3})$$

où, en introduisant la matrice de rotation,

$$\mathbf{D}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.4})$$

par l'équation matricielle compacte,

$$\mathbf{a}' = \mathbf{D}(\phi) \cdot \mathbf{a}. \quad (\text{II.5})$$

On vérifie que $\mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} = \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} = \mathbf{1}$, et on voit que \mathbf{D} préserve la longueur de \mathbf{a} qui est donnée par $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{a}}$. On vérifie facilement que $\|\mathbf{a}'\| = \sqrt{\mathbf{a}'^T \cdot \mathbf{a}'} = \sqrt{(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a})^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{a}} = \|\mathbf{a}\|$.

II.1.1.2. *Rotations passives.* Le changement des coordonnées d'un vecteur de la forme (II.5) peut aussi être générée par une rotation du repère, i.e. par le changement des vecteurs de base, sans que vecteur même change. Partant d'une base euclidienne en 2 dimensions, on génère une nouvelle base également orthonormée,

$$\mathcal{E}_2 = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\} \longrightarrow \mathcal{D}_2\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2\}, \quad (\text{II.6})$$

En notation matricielle

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) \longrightarrow \mathbf{D} = (\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2), \quad (\text{II.7})$$

où les nouveaux vecteurs de base sont construits suivant

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^2 D_{ij}(\phi) \mathbf{e}_j, \quad (\text{II.8})$$

et la matrice formée par les vecteurs de colonne \mathbf{d}_k est orthogonale,

$$\mathbf{D} = (\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2), \quad \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} = \mathbf{1}. \quad (\text{II.9})$$

Suivant les considérations dans la section I.6 on peut maintenant formellement écrire $\mathbf{a} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{a}^{(E)} = \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}^{(E)}$ ou bien

$$\mathbf{a}^{(D)} = \mathbf{D}^T \cdot \mathbf{a}^{(E)}, \quad (\text{II.10})$$

utilisant que $\mathbf{D}^{-1} = \mathbf{D}^T$. Si l'on veut que

$$\mathbf{a}^{(D)} = \mathbf{D}(\phi) \cdot \mathbf{a}^{(E)},$$

où $\mathbf{D}(\phi)$ est la matrice de rotation donnée en Eq. (II.4), il faut alors que

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^2 D_{ij}(-\phi) \mathbf{e}_j. \quad (\text{II.11})$$

Cette situation est montrée dans la figure 1.

II.1.2. Rotations infinitésimales, forme exponentielle de $\mathbf{D}(\phi)$. Pour une rotation infinitésimale on peut approcher

$$\mathbf{D}(\phi) \approx \mathbf{D}(0) + \phi \left. \frac{d\mathbf{D}(\phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0},$$

où $\mathbf{D}(0) = \mathbf{1}$. On définit le *générateur* d'une rotation infinitésimale par

$$\boldsymbol{\rho} = \left. \frac{d\mathbf{D}(\phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.12})$$

Avec cette définition

$$\frac{d\mathbf{D}(\phi)}{d\phi} = \boldsymbol{\rho}\mathbf{D}(\phi). \quad (\text{II.13})$$

Comme $\mathbf{D}(0) = \mathbf{1}$, cette équation différentielle a la solution

$$\mathbf{D}(\phi) = \exp(\phi\boldsymbol{\rho}). \quad (\text{II.14})$$

La forme de ma série pour l'exponentielle montre que les formes (II.14) et (II.4) sont équivalentes. En utilisant l'identité

$$\boldsymbol{\rho}^2 = -\mathbf{1} \quad (\text{II.15})$$

on obtient

$$\begin{aligned} \exp(\phi\boldsymbol{\rho}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{n!} \boldsymbol{\rho}^n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k}}{(2k)!} \boldsymbol{\rho}^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k+1}}{(2k+1)!} \boldsymbol{\rho}^{2k+1} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k}}{(2k)!} (-\mathbf{1})^k + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k+1}}{(2k+1)!} (-\mathbf{1})^k \boldsymbol{\rho} \\ &= \mathbf{1} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \phi^{2k} \right\} + \boldsymbol{\rho} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \phi^{2k+1} \right\} \\ &= \cos \phi \mathbf{1} + \sin \phi \boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

II.1.3. Rotation dans l'espace. Considérons d'abord la rotation active d'un vecteur

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + a_3\mathbf{e}_3 \longrightarrow \mathbf{a}' = a'_1\mathbf{e}_1 + a'_2\mathbf{e}_2 + a'_3\mathbf{e}_3, \quad (\text{II.16})$$

où $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\} \equiv \mathcal{E}_3$ forment la base d'un espace euclidien à dimension 3,

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.17})$$

On écrit ces rotations individuelles comme

$$\mathbf{a}' = \mathbf{D}(\mathbf{e}_k, \phi) \cdot \mathbf{a}, \quad (\text{II.18})$$

où $k = x, y, z$, et

$$\mathbf{D}(\mathbf{e}_1, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (\text{II.19})$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{e}_2, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (\text{II.20})$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{e}_3, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.21})$$

Les trois *générateurs d'une rotation infinitésimale* qui sont associés aux matrices de rotation ci-dessus sont

$$\boldsymbol{\rho}_1 = \left. \frac{d\mathbf{D}(\mathbf{e}_1, \phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.22})$$

$$\boldsymbol{\rho}_2 = \left. \frac{d\mathbf{D}(\mathbf{e}_2, \phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.23})$$

$$\boldsymbol{\rho}_3 = \left. \frac{d\mathbf{D}(\mathbf{e}_3, \phi)}{d\phi} \right|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.24})$$

Les trois générateurs ne commutent pas et vérifient la relation

$$[\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2] = \boldsymbol{\rho}_3, \quad (\text{cycl.}) \quad (\text{II.25})$$

Regardons maintenant la construction d'une matrice de rotation dans l'espace pour un axe e rotation quelconque. Pour une rotation infinitésimale autour de l'axe \mathbf{n} on a d'abord

$$\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) \approx \mathbf{1} + \phi \mathbf{N}, \quad (\text{II.26})$$

où \mathbf{n} est un vecteur d'unité qui pointe en direction de l'axe de rotation,

$$\mathbf{n} = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2 + n_3 \mathbf{e}_3, \quad \text{où } n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1, \quad (\text{II.27})$$

et la matrice \mathbf{N} a la forme

$$\mathbf{N} = \sum_{k=1}^3 n_k \boldsymbol{\rho}_k = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.28})$$

Ceci montre que pour une rotation infinitésimale

$$\boxed{\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) \cdot \mathbf{a} \approx \mathbf{a} + \phi \mathbf{n} \wedge \mathbf{a}} \quad (\text{II.29})$$

Formellement, la matrice de rotation pour une rotation finie autour d'un axe \mathbf{n} est donnée par

$$\boxed{\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) = \exp(\phi \mathbf{N})} \quad (\text{II.30})$$

L'évaluation de cette série est un peu plus compliquée que pour les rotations dans un plan. On vérifie d'abord que

$$\mathbf{N}^2 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T - \mathbf{1} = \begin{pmatrix} n_x^2 - 1 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_x n_y & n_y^2 - 1 & n_y n_z \\ n_x n_z & n_y n_z & n_z^2 - 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.31})$$

Avec ceci, on développe

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{n!} \mathbf{N}^n = \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi^{2k}}{(2k)!} \mathbf{N}^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k+1}}{(2k+1)!} \mathbf{N}^{2k+1} \\ &= \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi^{2k}}{(2k)!} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T - \mathbf{1})^k + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi^{2k+1}}{(2k+1)!} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T - \mathbf{1})^k \cdot \mathbf{N}. \end{aligned}$$

Ici on peut utiliser que

$$\mathbf{P}_{\parallel} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T = \begin{pmatrix} n_x^2 & n_x n_y & n_x n_z \\ n_x n_y & n_y^2 & n_y n_z \\ n_x n_z & n_y n_z & n_z^2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.32})$$

est le projecteur sur l'axe \mathbf{n} et

$$\mathbf{P}_{\perp} = \mathbf{1} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T = \begin{pmatrix} 1 - n_x^2 & -n_x n_y & -n_x n_z \\ -n_x n_y & 1 - n_y^2 & -n_y n_z \\ -n_x n_z & -n_y n_z & 1 - n_z^2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.33})$$

est le projecteur sur le plan orthogonal à \mathbf{n} . Ceci donne

$$\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \phi^{2k}}{(2k)!} \mathbf{P}_{\perp}^k + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \phi^{2k+1}}{(2k+1)!} \mathbf{P}_{\perp}^k \cdot \mathbf{N}.$$

Comme \mathbf{P}_{\perp} est un projecteur, il suit que $\mathbf{P}_{\perp}^k = \mathbf{P}_{\perp}$ pour $k \in \mathbb{N}$. Une autre relation très utile est $\mathbf{P}_{\parallel} \mathbf{N} = \mathbf{0}$, et par conséquent $\mathbf{P}_{\perp} \mathbf{N} = \mathbf{N}$. Avec ceci

$$\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{1} + \mathbf{P}_{\perp} \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \phi^{2k} \right\} + \mathbf{N} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \phi^{2k+1} \right\},$$

ou bien

$$\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{1} + (\cos \phi - 1) \mathbf{P}_{\perp} + \sin(\phi) \mathbf{N}. \quad (\text{II.34})$$

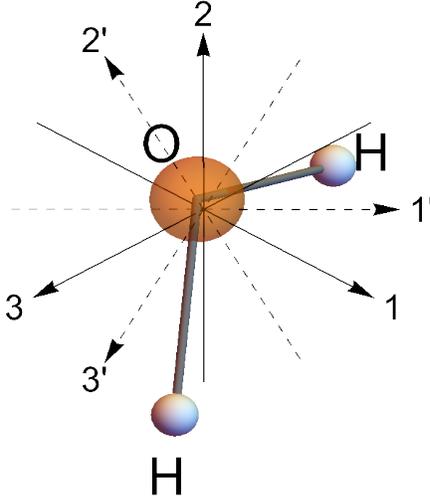


FIGURE 2. Molécule d'eau dans le repère du laboratoire (axes 1, 2, 3) et fixé à la molécule (axes 1', 2', 3').

Avec $\mathbf{1} - \mathbf{P}_\perp = \mathbf{P}_\parallel$, on obtient la forme équivalente [1]

$$\mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi) = \mathbf{P}_\parallel + \cos(\phi)\mathbf{P}_\perp + \sin(\phi)\mathbf{N} \quad (\text{II.35})$$

La généralisation de la relation (II.29) pour une rotation finie est alors

$$\mathbf{a}' = \mathbf{a}_\parallel + \cos(\phi)\mathbf{a}_\perp + \sin(\phi)\mathbf{n} \wedge \mathbf{a} \quad (\text{II.36})$$

où

$$\mathbf{a}_\parallel = \mathbf{P}_\parallel \cdot \mathbf{a} = (\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{a})\mathbf{n}, \quad (\text{II.37})$$

$$\mathbf{a}_\perp = \mathbf{P}_\perp \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} - (\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{a})\mathbf{n}. \quad (\text{II.38})$$

On retrouve la formule (II.29) pour $\phi \ll 1$, avec $\cos(\phi) \approx 1$ et $\sin(\phi) \approx \phi$.

II.1.4. Vitesse angulaire.

II.1.4.1. *Repères en rotation relative.* On considère un corps rigide, composé de points matériels, qui tourne autour de son centre de masses, et une base orthonormée qui est fixée à ce corps. Un exemple est la molécule d'eau qui est montrée dans la figure 2. Ici les axes 1, 2, 3 indiquent la direction des vecteurs d'une base euclidienne

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \quad (\text{II.39})$$

et les axes 1', 2', 3' indiquent les directions des vecteurs de la base

$$\mathbf{D} = (\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3) \quad (\text{II.40})$$

fixée sur la molécule. Les deux bases sont orthonormées

$$\mathbf{e}_i^T \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}, \quad \mathbf{e}'_k{}^T \cdot \mathbf{e}'_l = \delta_{kl}. \quad (\text{II.41})$$

La matrice $\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}(t)$ est une matrice de rotation qui dépend du temps, car le corps tourne. La forme la plus simple

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}(\mathbf{n}, \phi(t)), \quad (\text{II.42})$$

qui décrit une rotation autour d'un axe \mathbf{n} fixe, mais l'axe de rotation peut aussi varier avec le temps, i.e.

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}(\mathbf{n}(t), \phi(t)). \quad (\text{II.43})$$

Pour le moment nous ne spécifions pas la forme exacte et on note que d'autres jeux de paramètres que $\{\mathbf{n}(t), \phi\}$ sont utilisés comme coordonnées angulaires.

II.1.4.2. *Construire la vitesse angulaire.* Partant de l'orthogonalité de la matrice $\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}(t)$,

$$\mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t) = \mathbf{D}^T(t) \cdot \mathbf{D}(t) = \mathbf{1}, \quad (\text{II.44})$$

on obtient par différentiation par rapport à t (les points désignent des dérivées par rapport à t),

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t)) &= \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{D}}^T(t) \\ &= \underbrace{\dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t)}_{\boldsymbol{\Omega}} + \underbrace{\left(\dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t) \right)^T}_{\boldsymbol{\Omega}^T} = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Ceci montre que

$$\boxed{\dot{\mathbf{D}}(t) = \boldsymbol{\Omega}(t) \cdot \mathbf{D}(t)} \quad (\text{II.45})$$

où $\boldsymbol{\Omega}(t)$ est une matrice antisymétrique qui peut être écrite dans la forme

$$\boldsymbol{\Omega}(t) = \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z(t) & \omega_y(t) \\ \omega_z(t) & 0 & -\omega_x(t) \\ -\omega_y(t) & \omega_x(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.46})$$

De la même façon écrit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\mathbf{D}^T(t) \cdot \mathbf{D}(t)) &= \dot{\mathbf{D}}^T(t) \cdot \mathbf{D}(t) + \mathbf{D}^T(t) \dot{\mathbf{D}}(t) \\ &= \underbrace{\left(\mathbf{D}^T(t) \dot{\mathbf{D}}(t) \right)^T}_{\boldsymbol{\Omega}'^T} + \underbrace{\mathbf{D}^T(t) \dot{\mathbf{D}}(t)}_{\boldsymbol{\Omega}'} = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

d'où on dérive

$$\boxed{\dot{\mathbf{D}}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \boldsymbol{\Omega}'(t)} \quad (\text{II.47})$$

où $\Omega(t)$ est une autre matrice antisymétrique de la forme

$$\Omega'(t) = \mathbf{D}^T(t) \cdot \dot{\mathbf{D}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega'_z(t) & \omega'_y(t) \\ \omega'_z(t) & 0 & -\omega'_x(t) \\ -\omega'_y(t) & \omega'_x(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.48})$$

Considérons maintenant la dynamique d'un point $\mathbf{r}(t)$ dans le système du laboratoire,

$$\boxed{\mathbf{r}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{r}'(t)} \quad (\text{II.49})$$

où $\mathbf{r}'(t)$ sont les coordonnées du point dans le repère mobile fixé au corps rigide,

$$\boxed{\mathbf{r}'(t) = \mathbf{D}^T(t) \cdot \mathbf{r}(t)} \quad (\text{II.50})$$

Différentiation de l'éq. (II.49) par rapport au temps donne ici

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}(t) &= \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{r}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}'(t) = \Omega(t) \cdot \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{r}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}'(t) \\ &= \Omega(t) \cdot \mathbf{r}(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}'(t). \end{aligned}$$

Avec la forme (II.46) pour Ω et les définitions

$$\mathbf{v}(t) \equiv \dot{\mathbf{r}}(t) \quad \text{et} \quad \mathbf{v}'(t) \equiv \dot{\mathbf{r}}'(t)$$

nous trouvons donc

$$\boxed{\mathbf{v}(t) = \boldsymbol{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t)} \quad (\text{II.51})$$

où le vecteur de colonne

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix} \quad (\text{II.52})$$

contient les composantes de la vitesse angulaire du point matériel dans le système du laboratoire. Il est important d'observer que $\mathbf{r}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{r}'(t)$ mais $\mathbf{v}(t) \neq \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t)$, car la rotation du repère mobile ajoute une vitesse de rotation. Partant de l'équation (II.49) on peut également écrire

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}(t) &= \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{r}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}'(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \Omega'(t) \cdot \mathbf{r}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}'(t) \\ &= \mathbf{D}(t) \cdot (\Omega'(t) \cdot \mathbf{r}'(t) + \dot{\mathbf{r}}'(t)), \end{aligned}$$

ce qui donne la forme alternative pour la vitesse du point matériel dans le repère fixe,

$$\boxed{\mathbf{v}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot (\boldsymbol{\omega}'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \mathbf{v}'(t))} \quad (\text{II.53})$$

où le vecteur de colonne

$$\boldsymbol{\omega}' = \begin{pmatrix} \omega'_x \\ \omega'_y \\ \omega'_z \end{pmatrix} \quad (\text{II.54})$$

contient les composantes de la vitesse angulaire du point matériel dans le repère mobile fixé au corps. On note que (l'argument t est omis)

$$\boxed{\Omega = \mathbf{D} \cdot \Omega' \cdot \mathbf{D}^T} \quad (\text{II.55})$$

$$\boxed{\omega = \mathbf{D} \cdot \omega'} \quad (\text{II.56})$$

II.1.5. Accélération de Coriolis et centrifuge. Il suit de l'éq. (II.51) par une différentiation supplémentaire que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{v}}(t) &= \dot{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \omega(t) \wedge \mathbf{v}(t) + \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{v}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{v}}'(t) \\ &= \dot{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \underbrace{\omega(t) \wedge (\omega(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t))}_{\mathbf{v}(t)} + \underbrace{\omega(t) \wedge \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t)}_{\dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{v}'(t)} + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{v}}'(t). \end{aligned}$$

Ceci donne en résumé

$$\dot{\mathbf{v}}(t) = \dot{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \omega(t) \wedge \omega(t) \wedge \mathbf{r}(t) + 2\omega(t) \wedge \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t) + \mathbf{D}(t) \cdot \dot{\mathbf{v}}'(t).$$

et avec les définitions

$$\mathbf{a}(t) \equiv \dot{\mathbf{v}}(t) \quad \text{et} \quad \mathbf{a}'(t) \equiv \dot{\mathbf{v}}'(t)$$

on obtient

$$\boxed{\mathbf{a}(t) = \dot{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}(t) + \underbrace{\omega(t) \wedge \omega(t) \wedge \mathbf{r}(t)}_{\text{centrifuge}} + \underbrace{2\omega(t) \wedge \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{v}'(t)}_{\text{Coriolis}} + \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{a}'(t)} \quad (\text{II.57})$$

où les termes dits centrifuge et Coriolis sont explicitement marqués. On peut également partir l'éq. (II.53) par rapport à t , dont la dérivée par rapport à t donne

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{v}}(t) &= \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot (\omega'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \mathbf{v}'(t)) + \mathbf{D}(t) \cdot \frac{d}{dt} (\omega'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \mathbf{v}'(t)) \\ &= \mathbf{D}(t) \cdot \left(\omega'(t) \wedge (\omega'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \mathbf{v}'(t)) \right) + \mathbf{D}(t) \cdot (\dot{\omega}'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \omega'(t) \wedge \dot{\mathbf{v}}'(t) + \mathbf{a}'(t)), \end{aligned}$$

ou bien

$$\boxed{\mathbf{a}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \left(\dot{\omega}'(t) \wedge \mathbf{r}'(t) + \underbrace{\omega'(t) \wedge \omega'(t) \wedge \mathbf{r}'(t)}_{\text{centrifuge}} + \underbrace{2\omega'(t) \wedge \mathbf{v}'(t)}_{\text{Coriolis}} + \mathbf{a}'(t) \right)} \quad (\text{II.58})$$

II.1.6. Tenseur d'inertie. On considère un ensemble de points matériel dont la position par rapport au repère mobile sont fixes

$$\boxed{\mathbf{r}_\alpha(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{r}'_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N} \quad (\text{II.59})$$

Les vitesses de ces points par rapport au repère fixe sont alors données par

$$\mathbf{v}_\alpha(t) = \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{r}'_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (\text{II.60})$$

Ceci peut être écrit dans les deux formes équivalentes

$$\mathbf{v}_\alpha(t) = \boldsymbol{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}_\alpha(t) \quad (\text{II.61})$$

$$\mathbf{v}_\alpha(t) = \mathbf{D}(t) \cdot (\boldsymbol{\omega}'(t) \wedge \mathbf{r}'_\alpha) \quad (\text{II.62})$$

Pour l'énergie cinétique du corps rigide on obtient alors

$$\boxed{E_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha (\boldsymbol{\omega}(t) \wedge \mathbf{r}_\alpha(t))^2 = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T(t) \cdot \boldsymbol{\theta}(t) \cdot \boldsymbol{\omega}(t)} \quad (\text{II.63})$$

$$\boxed{E_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha (\boldsymbol{\omega}'(t) \wedge \mathbf{r}'_\alpha)^2 = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}'^T(t) \cdot \boldsymbol{\theta}' \cdot \boldsymbol{\omega}'(t)} \quad (\text{II.64})$$

où $\boldsymbol{\theta}(t)$ est la matrice/le tenseur d'inertie dans le repère fixe,

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \begin{pmatrix} y_\alpha^2(t) + z_\alpha^2(t) & -x_\alpha(t)y_\alpha(t) & -x_\alpha(t)z_\alpha(t) \\ -x_\alpha(t)y_\alpha(t) & x_\alpha^2(t) + z_\alpha^2(t) & -y_\alpha(t)z_\alpha(t) \\ -x_\alpha(t)z_\alpha(t) & -y_\alpha(t)z_\alpha(t) & x_\alpha^2(t) + y_\alpha^2(t) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.65})$$

et $\boldsymbol{\theta}'$ celui fixé au corps,

$$\boldsymbol{\theta}' = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \begin{pmatrix} y_\alpha'^2 + z_\alpha'^2 & -x_\alpha'y_\alpha' & -x_\alpha'z_\alpha' \\ -x_\alpha'y_\alpha' & x_\alpha'^2 + z_\alpha'^2 & -y_\alpha'z_\alpha' \\ -x_\alpha'z_\alpha' & -y_\alpha'z_\alpha' & x_\alpha'^2 + y_\alpha'^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.66})$$

On note que

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \mathbf{D}(t) \cdot \boldsymbol{\theta}' \cdot \mathbf{D}^T(t) \quad (\text{II.67})$$

$$\boldsymbol{\theta}' = \mathbf{D}^T(t) \cdot \boldsymbol{\theta}(t) \cdot \mathbf{D}(t). \quad (\text{II.68})$$

Un repère fixé au corps particulier est celui dans lequel $\boldsymbol{\theta}'$ est diagonal, i.e.

$$\boxed{\boldsymbol{\theta}' \cdot \mathbf{e}'_i = \lambda_i \mathbf{e}'_i, \quad i = 1, 2, 3} \quad (\text{II.69})$$

Une tel repère peut toujours être trouvé, car la matrice d'inertie est symétrique. Les valeurs propres sont les *moments d'inertie principaux* et la forme diagonale de $\boldsymbol{\theta}'$ est

$$\boldsymbol{\theta}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.70})$$

Le repère des axes $1', 2', 3'$ montré dans la figure 2 indique les axes principaux d'une molécule d'eau.

II.1.7. Vitesses angulaires avec un axe de rotation fixe. Les vitesses angulaires correspondant à une rotation avec un axe fixe coïncident et sont constants. Il suit de l'éq. (II.35) que

$$\boxed{\mathbf{D}(t) = \mathbf{P}_{\parallel} + \cos(\omega t)\mathbf{P}_{\perp} + \sin(\omega t)\mathbf{N}} \quad (\text{II.71})$$

ce qui donne

$$\boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t) = \omega \mathbf{N}, \quad (\text{II.72})$$

$$\boldsymbol{\Omega}' = \mathbf{D}^T(t) \cdot \dot{\mathbf{D}}(t) = \omega \mathbf{N}. \quad (\text{II.73})$$

On écrit explicitement

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}' = \begin{pmatrix} 0 & -\omega n_z & \omega n_y \\ \omega n_z & 0 & -\omega n_x \\ -\omega n_y & \omega n_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.74})$$

d'où on extrait

$$\boxed{\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}' = \omega \mathbf{n}} \quad (\text{II.75})$$

Dans ce cas l'énergie cinétique du corps rigide est constante

$$\boxed{E_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}'^T \cdot \boldsymbol{\theta}' \cdot \boldsymbol{\omega}' = \text{const.}} \quad (\text{II.76})$$

et peut être écrite sous la forme

$$E_{\text{cin}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \lambda_i \omega_i'^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \lambda_i \omega_i^2 \quad (\text{II.77})$$

si $\{\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3\}$ sont les axes principaux.

II.1.8. Vitesses angulaires avec un axe de rotation variable. Si l'axe de rotation est variable, les vitesses angulaires dans le repère du laboratoire et dans le repère fixé aux corps ont des composantes différentes. Dans ce cas

$$\boxed{\mathbf{D}(t) = \mathbf{P}_{\parallel}(t) + \cos(\phi(t))\mathbf{P}_{\perp}(t) + \sin(\phi(t))\mathbf{N}(t)} \quad (\text{II.78})$$

Dans ce cas les expressions pour $\boldsymbol{\Omega}(t)$ et $\boldsymbol{\Omega}'(t)$ deviennent différentes et compliquées. On donne ici uniquement les composantes pour les vecteurs des vitesses angulaires. Partant de

$$\boldsymbol{\Omega}(t) = \dot{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{D}^T(t), \quad (\text{II.79})$$

$$\boldsymbol{\Omega}'(t) = \mathbf{D}^T(t) \cdot \dot{\mathbf{D}}(t) \quad (\text{II.80})$$

on obtient

$$\boldsymbol{\omega}(t) = \begin{pmatrix} n_x(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_x(t) + (\cos(\phi(t)) - 1)(n_z(t)\dot{n}_y(t) - n_y(t)\dot{n}_z(t)) \\ -n_z(t)(\cos(\phi(t)) - 1)\dot{n}_x(t) + n_x(t)(\cos(\phi(t)) - 1)\dot{n}_z(t) + n_y(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_y(t) \\ (\cos(\phi(t)) - 1)(n_y(t)\dot{n}_x(t) - n_x(t)\dot{n}_y(t)) + n_z(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_z(t) \end{pmatrix} \quad (\text{II.81})$$

pour la vitesse angulaire dans le repère du laboratoire et

$$\boldsymbol{\omega}'(t) = \begin{pmatrix} n_x(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_x(t) - (\cos(\phi(t)) - 1)(n_z(t)\dot{n}_y(t) - n_y(t)\dot{n}_z(t)) \\ n_z(t)(\cos(\phi(t)) - 1)\dot{n}_x(t) - n_x(t)(\cos(\phi(t)) - 1)\dot{n}_z(t) + n_y(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_y(t) \\ -(\cos(\phi(t)) - 1)(n_y(t)\dot{n}_x(t) - n_x(t)\dot{n}_y(t)) + n_z(t)\dot{\phi}(t) + \sin(\phi(t))\dot{n}_z(t) \end{pmatrix} \quad (\text{II.82})$$

pour celle dans repère mobile fixé au corps rigide.

II.2. Vibrations, modes normaux

II.2.1. Oscillateur harmonique forcé, résonance. On considère une particule de masse m qui effectue un mouvement unidimensionnel sous l'influence d'une force externe, d'une force de rappel et d'une force de friction. Si x est la position de la particule et x_0 sa position d'équilibre, la force de rappel est donnée par $F_h = -K(x - x_0)$, où $K > 0$ est la constante élastique. La force de friction est une fonction de la vitesse de la particule et l'équation de Newton est une équation différentielle linéaire si la force de friction a la forme $F_r = -m\gamma\dot{x}$,

$$m\ddot{x} = -K(x - x_0) - m\gamma\dot{x} + F_{\text{ext}}(t). \quad (\text{II.83})$$

En introduisant la nouvelle coordonnée $u = x - x_0$ et la fréquence angulaire (pulsation) $\omega_0 = \sqrt{K/m}$ cette équation prend la forme canonique

$$\ddot{u} + \gamma\dot{u} + \omega_0^2 u = \frac{F_{\text{ext}}(t)}{m} \quad (\text{II.84})$$

Supposons que la force externe a la forme

$$F_{\text{ext}}(t) = \Re\{F_0 \exp(i\omega t)\} \quad (\text{II.85})$$

où $F_0 \in \mathbb{C}$ est l'amplitude complexe de la force et $\omega > 0$. Pour trouver une solution particulière pour $u(t)$ on fait l'hypothèse que

$$u_p(t) = \Re\{u_0(\omega) \exp(i\omega t)\}, \quad (\text{II.86})$$

où $u_0 \in \mathbb{C}$ est l'amplitude complexe de la solution $u(t)$. On suppose alors que le mouvement forcé de l'oscillateur a la même fréquence (pulsation) que la force externe. L'insertion de (II.85) et (II.86) dans l'équation du mouvement (II.84) montre que

$$u_0(\omega) = \frac{F_0/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (\text{II.87})$$

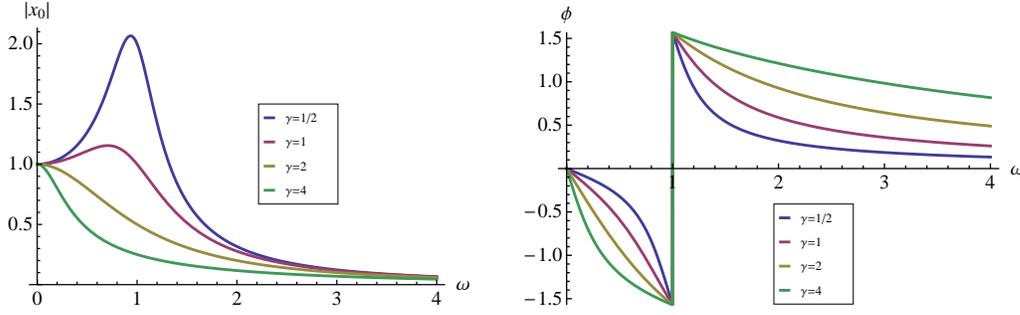


FIGURE 3. Amplitude $|u_0|$ (à gauche) et différence de phases ϕ (à droite) comme fonction de ω . Ici $\omega_0 = 1$, $|F_0|/m = 1$ et $\gamma = 1/2, 1, 2, 4$.

L'amplitude de la solution particulière a donc la forme

$$|u_0(\omega)| = \frac{|F_0|/m}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2\omega^2}} \quad (\text{II.88})$$

qui montre qu'elle prend un maximum si $\sqrt{\dots}$ prend un minimum. Comme \sqrt{x} croît d'une manière strictement monotone avec x , $\sqrt{f(x)}$ prend un minimum où $f(x)$ prend un minimum. Comme $\omega > 0$, on trouve comme seule solution

$$\omega_{\text{res}} = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4} \quad (\text{II.89})$$

si $\gamma < 2\omega_0$. Pour $\gamma \geq 2\omega_0$ il n'y a pas de phénomène de résonance et pour un oscillateur non-amorti l'amplitude diverge à $\omega = \omega_0$. La partie gauche de la figure 3 montre l'évolution de l'amplitude en fonction de ω pour différentes valeurs de γ , posant $\omega_0 = 1$, $|F_0|/m = 1$. Si $F_0 = |F_0| \exp(i\alpha)$, la phase de $u_0(\omega)$ est donnée par $\arg(u_0(\omega)) = \alpha + \phi(\omega)$, où

$$\phi(\omega) = \arctan\left(\frac{\gamma\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}\right) \quad (\text{II.90})$$

est la différence de phase entre $F_{\text{ext}}(t)$ et $u(t)$. Une force externe $F_{\text{ext}}(t) = |F_0| \cos(\omega t + \alpha)$ produit donc une solution particulière

$$u_p(t) = |u_0(\omega)| \cos(\omega t + \alpha + \phi(\omega)). \quad (\text{II.91})$$

La solution (II.91) n'est qu'une solution particulière de l'équation du mouvement (II.84) à laquelle on peut ajouter une solution de l'équation homogène,

$$\ddot{u} + \gamma\dot{u} + \omega_0^2 u = 0. \quad (\text{II.92})$$

Posant $u(t) = \exp(\lambda t)$, on trouve que

$$(\lambda^2 + \gamma\lambda + \omega_0^2) \exp(\lambda t) = 0.$$

Comme $\exp(\lambda t) \neq 0$, cette équation a des solutions si λ vérifie $p(\lambda) = 0$, où $p(\lambda) = \lambda^2 + \gamma\lambda + \omega_0^2$ est le polynôme caractéristique de l'équation homogène (II.92). Ce polynôme a deux racines,

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2}, \quad (\text{II.93})$$

et supposant que ces deux racines sont différentes, on obtient alors deux solutions de base $u_k(t) = \exp(\lambda_k t)$ ($k = 1, 2$). Comme (II.83) est une équation différentielle linéaire, la solution est donnée par une superposition quelconque des solutions de base,

$$u_h(t; C_1, C_2) = C_1 \exp(\lambda_1 t) + C_2 \exp(\lambda_2 t), \quad (\text{II.94})$$

où $C_{1,2}$ sont des constantes. Si $\lambda_1 = \lambda_2$ les deux solutions de base sont $u_1(t) = \exp(\lambda_1 t)$ et $u_2(t) = t \exp(\lambda_1 t)$, tel que

$$u_h(t; C_1, C_2) = C_1 \exp(\lambda_1 t) + C_2 t \exp(\lambda_1 t). \quad (\text{II.95})$$

La solution complète de l'équation du mouvement (II.83) a donc la forme

$$\boxed{u(t) = u_p(t) + u_h(t; C_1, C_2)} \quad (\text{II.96})$$

où les constantes peuvent être fixées par les conditions initiales pour $u(t)$ et $\dot{u}(t)$. Comme $\gamma > 0$, il suit avec (II.93) et les formes générales (II.94) ou (II.95) pour $u_h(t)$ que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u_h(t; C_1, C_2) = 0, \quad (\text{II.97})$$

quelques soient les valeurs de C_1 et C_2 , ou bien quelques soient les valeurs de $u(0)$ et de $\dot{u}(0)$. Pour $t \gg 1/\gamma$ la solution $u(t)$ se comporte donc toujours comme la solution particulière

$$\boxed{u(t) \sim u_p(t)} \quad (\text{II.98})$$

qui définit le régime *stationnaire*.

II.2.2. Oscillateurs non-amortis couplés, modes normaux.

II.2.2.1. *Equilibre, potentiel quadratique.* Un point d'équilibre d'un système de N points matériels est déterminé par la condition que les forces en ce point sont nulles. Si $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ est l'énergie potentielle du système, ces points sont caractérisés par la condition $\partial V / \partial \mathbf{r}_\alpha = \mathbf{0}$, où $\alpha = 1, \dots, N$. Pour la discussion suivante il est commode d'introduire l'ensemble $X = \{x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N\}$, ainsi que la notation matricielle \mathbf{X} pour le vecteur de colonne contenant les coordonnées X . Si l'on développe V autour d'un point

d'équilibre $X^{(0)}$, on obtient

$$V(X) = V(X^{(0)}) + \sum_{i=1}^{3N} \left. \frac{\partial V}{\partial X_i} \right|_{X=X^{(0)}} (X_i - X_i^{(0)}) + \sum_{i,j=1}^{3N} \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_{X=X^{(0)}} (X_i - X_i^{(0)})(X_j - X_j^{(0)}) + \dots \quad (\text{II.99})$$

Le premier terme est une constante qui est arbitraire, le deuxième est zéro et le premier terme non-nul est le terme quadratique dans les déviations des positions par rapport aux valeurs d'équilibre. Si l'on introduit les déviations $u_k = X_k - X_k^{(0)}$ et le vecteur \mathbf{u} correspondant comme coordonnées dynamiques, on peut faire l'approximation

$$V \approx \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \quad (\text{II.100})$$

pour les mouvements autour de l'équilibre, où \mathbf{K} est une matrice de dimension $3N \times 3N$ dont les éléments sont donnés par

$$K_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial X_i \partial X_j} \right|_{X=X^{(0)}}. \quad (\text{II.101})$$

On suppose que \mathbf{K} est positive semi-définite, tel que toutes ses valeurs propres sont positives ou zéro.

II.2.2.2. *Equations du mouvement, modes normaux.* La fonction de Lagrange du système dynamique peut être écrite dans une forme compacte en introduisant la matrice diagonale

$$\mathbf{M} = \text{diag}(m_1, m_1, m_1, \dots, m_N, m_N, m_N) \quad (\text{II.102})$$

de dimensions $3N \times 3N$. Ici on a $3N$ équations de mouvement couplées qu'on peut écrire sous forme matricielle,

$$\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{II.103})$$

et montre que \mathcal{L} décrit un système de $3N$ oscillateurs qui sont couplés via la matrice symétrique \mathbf{K} .

Afin de découpler les équations (II.103) on introduit d'abord les coordonnées pondérées et la matrice des constantes de forces pondérée, afin d'éliminer les masses,

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{M}^{1/2} \cdot \mathbf{u}, \quad (\text{II.104})$$

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{M}^{-1/2}, \quad (\text{II.105})$$

ce qui mène à la nouvelle forme

$$\ddot{\tilde{\mathbf{u}}} + \tilde{\mathbf{K}} \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad (\text{II.106})$$

des équation du mouvement. La matrice pondérée $\tilde{\mathbf{K}}$ est positive semi-définie comme la matrice non-pondérée, \mathbf{K} , et pour cette raison elle peut être diagonalisée par une matrice orthogonale, $\tilde{\mathbf{D}}$, tel que

$$\boxed{\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{\mathbf{D}} \cdot \Omega^2 \cdot \tilde{\mathbf{D}}^T} \quad (\text{II.107})$$

où Ω^2 est une matrice diagonale

$$\Omega^2 = \text{diag}(\Omega_1^2, \dots, \Omega_{3N}^2). \quad (\text{II.108})$$

La i -ème colonne de $\tilde{\mathbf{D}} = (\tilde{\mathbf{d}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{d}}_{3N})$ est le vecteur propre associé avec la valeur propre Ω_i^2 ,

$$\tilde{\mathbf{K}} \cdot \tilde{\mathbf{d}}_i = \Omega_i^2 \tilde{\mathbf{d}}_i. \quad (\text{II.109})$$

On appelle les vecteurs $\{\tilde{\mathbf{d}}_i\}$ les *modes normaux* du système et $\{\Omega_i \geq 0\}$ les *fréquences normales* associées. Utilisant la forme spectrale de la matrice (II.107) les équations du mouvement (II.103) deviennent d'abord

$$\ddot{\tilde{\mathbf{u}}} + \tilde{\mathbf{D}} \cdot \Omega^2 \cdot \underbrace{\tilde{\mathbf{D}}^T \cdot \tilde{\mathbf{u}}}_{\mathbf{q}} = \mathbf{0}.$$

Multiplication par la gauche avec $\tilde{\mathbf{D}}^T$ et introduction des coordonnées généralisées q_i

$$\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{D}}^T \cdot \tilde{\mathbf{u}} \quad (\text{II.110})$$

mène à

$$\boxed{\ddot{\mathbf{q}} + \Omega^2 \cdot \mathbf{q} = \mathbf{0}} \quad (\text{II.111})$$

qui constituent $3N$ équations du mouvement indépendantes, car la matrice Ω est diagonale,

$$\boxed{\ddot{q}_k + \Omega_k^2 q_k = 0, \quad k = 1, \dots, 3N} \quad (\text{II.112})$$

On appelle les coordonnées $\{q_k\}$ les *coordonnées normales* du système. Ils s'agit de coordonnées généralisées qui simplifient au maximum la forme des équations du mouvement. Les équations (II.112) décrivent la dynamique de $3N$ oscillateurs harmoniques non-couplés et les solutions sont bien connues

$$q_k(t) = \begin{cases} q_k(0) \cos \Omega_k t + \frac{\dot{q}_k(0)}{\Omega_k} \sin \Omega_k t & \text{si } \Omega_k > 0, \\ q_k(0) + \dot{q}_k(0)t & \text{si } \Omega_k = 0. \end{cases} \quad (\text{II.113})$$

Avec les relations (II.104) et (II.110) on a

$$\mathbf{q}(t) = \tilde{\mathbf{D}}^T \cdot \mathbf{M}^{1/2} \cdot \mathbf{u}(t) \quad (\text{II.114})$$

ce qui permet de construire des conditions initiales des coordonnées normales q_k à partir des celles pour les déplacements u_k et l'inversion de (II.114),

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{q}(t), \quad (\text{II.115})$$

permet de construire ensuite la solution complète des équations du mouvement II.103.

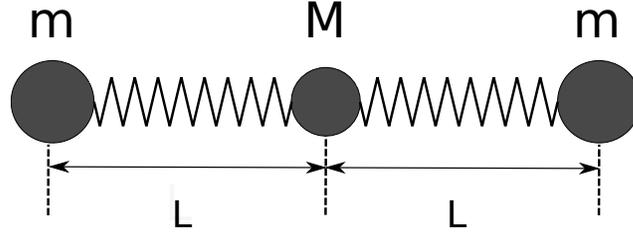


FIGURE 4. Molécule linéaire CO_2 . Ici $m = m_O$, $M = m_C$ et $L = 0.116$ nm.

Il est illustratif de regarder les directions dans l'espace qui sont définies par (II.115), posant successivement $\mathbf{q} = \mathbf{e}_k$ ($k = 1, \dots, 3N$). Comme $\tilde{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{e}_k = \tilde{\mathbf{d}}_k$ on a

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{M}^{-1/2} \cdot \tilde{\mathbf{d}}_k. \quad (\text{II.116})$$

Ces directions correspondent, respectivement, aux directions des modes normaux dans l'espace physique.

Exemple II.1. Molécule linéaire: On considère la molécule linéaire CO_2 comme exemple pour le calcul de modes normaux (voir figure 4). Pour simplifier, on ne considère que des mouvements le long de l'axe de la molécule. Par symétrie, les distances d'équilibre $\overline{O-C}$ et $\overline{C-O}$ sont identiques, $L = 0.116$ nm, et l'énergie potentielle a la forme

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{\kappa}{2}(x_2 - x_1 - L)^2 + \frac{\kappa}{2}(x_3 - x_2 - L)^2, \quad (\text{II.117})$$

où $\kappa > 0$ est la constante élastique et les particules sont numérotées de gauche à droite. Définissant $\mathbf{X} = (x_1, x_2, x_3)^T$ comme position d'équilibre est ici $\mathbf{X}^{(0)} = (0, L, 2L)^T$ si l'on positionne la particule 1 à $x = 0$. Avec $\mathbf{u} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{(0)}$ le potentiel V est donné par la forme quadratique

$$V = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \quad (\text{II.118})$$

où la matrice \mathbf{K} a la forme

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \kappa & -\kappa & 0 \\ -\kappa & 2\kappa & -\kappa \\ 0 & -\kappa & \kappa \end{pmatrix}. \quad (\text{II.119})$$

Avec la matrice des masses

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix} \quad (\text{II.120})$$



FIGURE 5. Chaîne linéaire d'oscillateurs identiques.

on obtient pour la matrice des constantes de force pondérée

$$\tilde{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{m} & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & 0 \\ -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & \frac{2\kappa}{M} & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} \\ 0 & -\frac{\kappa}{\sqrt{mM}} & \frac{\kappa}{m} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.121})$$

Les valeurs propres de cette matrice sont les fréquences normales du système,

$$\Omega_1 = 0, \quad \Omega_2 = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad \Omega_3 = \sqrt{\kappa \left(\frac{1}{m} + \frac{2}{M} \right)}. \quad (\text{II.122})$$

Posant $m = \alpha M$ on trouve avec avec (II.116) pour les modes normaux dans l'espace physique

$$\mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\alpha^2+2}} \\ -\frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{2\alpha^2+1}} \\ \frac{1}{\sqrt{4\alpha^2+2}} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.123})$$

L'interprétation de ces modes est la suivante :

Mode 1: $\boxed{\rightarrow \rightarrow \rightarrow}$: Tous les atomes font les mêmes déplacements, ce qui ne change pas l'énergie potentielle du système. Ceci est reflété par $\Omega_1 = 0$.

Mode 2: $\boxed{\leftarrow \mid \rightarrow}$: Les atomes 1 et 3 font des déplacements opposés, atome 2 au milieu restant au repos.

Mode 3: $\boxed{\rightarrow \leftarrow \rightarrow}$: L'atome au milieu fait des déplacements opposés aux déplacements identiques des atomes 1 et 3.

II.2.3. Chaîne linéaire. Reprenant l'exemple de la molécule linéaire on peut construire un système modèle de N oscillateurs identiques de masse m qui sont couplés à leurs voisins par la même constante de force, κ , ayant une distance d'équilibre Δx (voir fig. 5). Si les bouts de cette chaîne linéaire ne sont

pas fixés, le potentiel prend la forme

$$V(X) = \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (x_{k+1} - x_k - \Delta x)^2 \quad (\text{II.124})$$

où $X = \{x_1, \dots, x_N\}$. Comme pour la molécule linéaire on définit le vecteur de position $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)^T$ et la position d'équilibre est donnée par $\mathbf{X}^{(0)} = (0, L, \dots, (N-1)L)^T$ si le premier oscillateur est positionné à $x = 0$. Comme pour la molécule linéaire, l'approximation (II.100) devient exacte, avec $\mathbf{u} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{(0)}$. Il est utile de regarder la structure générale des équations du mouvement,

$$\ddot{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{II.125})$$

en prenant un exemple concret. Pour $N = 10$ la matrice $\tilde{\mathbf{K}}$ prend la forme

$$\tilde{\mathbf{K}} = \Omega^2 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.126})$$

où $\Omega = \sqrt{\kappa/m}$. Si l'on change la notation, tel que l'indice i des composantes u_i du vecteur \mathbf{u} devient une position discrète, les équations du mouvement peuvent être mises dans la forme

$$\frac{\partial^2 u(i, t)}{\partial t^2} - \Omega^2 (u(i+1, t) - 2u(i, t) + u(i-1, t)) = 0, \quad i = 2, \dots, N-2. \quad (\text{II.127})$$

Ici on s'aperçoit que

$$\frac{u(i+1, t) - 2u(i, t) + u(i-1, t)}{\Delta x^2} \rightarrow \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (\text{II.128})$$

si $\Delta x \rightarrow 0$. Définissant la vitesse de propagation

$$c = \Omega \Delta x \quad (\text{II.129})$$

l'équation (II.127) devient une équation d'onde si $\Delta x \rightarrow 0$ et $N \rightarrow \infty$, tel que c reste constante.

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{II.130})$$

Cette équation d'onde décrit la propagation de compressions longitudinales dans la chaîne linéaire.

II.3. Systèmes d'équations différentielles linéaires

II.3.1. Equations homogènes. Les équations de mouvement d'oscillateurs harmoniques couplés (voir l'éq. (II.106 pour la version en coordonnées pondérées par les masses) sont un exemple pour un système d'équations différentielles couplées à coefficients constants. Dans la suite on considérait des systèmes de la forme générale

$$\boxed{\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}(t) = \mathbf{0}} \quad (\text{II.131})$$

qui ont la forme concrète

$$\begin{pmatrix} \frac{dy_1(t)}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dy_n(t)}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \vdots \\ y_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.132})$$

Tout système d'équations différentielles ordre 2, 3, ... peut être transformé en cette forme en introduisant les dérivées $d^2\mathbf{y}(t)/dt^2$, $d^3\mathbf{y}(t)/dt^3$ etc. comme fonctions inconnues. Avec la définition

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}(t) \\ \tilde{\mathbf{p}}(t) \end{pmatrix}, \quad \text{où} \quad \tilde{\mathbf{p}}(t) = \frac{d\tilde{\mathbf{u}}(t)}{dt},$$

les équations (II.106) peuvent par exemple être écrites sous la forme

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{d\tilde{\mathbf{u}}(t)}{dt} \\ \frac{d\tilde{\mathbf{p}}(t)}{dt} \end{pmatrix}}_{d\mathbf{y}(t)/dt} + \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \tilde{\mathbf{K}} & \mathbf{0} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}(t) \\ \tilde{\mathbf{p}}(t) \end{pmatrix}}_{\mathbf{y}(t)}.$$

La solution formelle du système d'équations différentielles (II.131) s'écrit

$$\boxed{\mathbf{y}(t) = \exp(-t\mathbf{A}) \cdot \mathbf{y}(0)} \quad (\text{II.133})$$

où $\mathbf{y}(0)$ sont les conditions initiales du problème. Le propagateur

$$\boxed{\mathbf{U}(t) \equiv \exp(-t\mathbf{A})} \quad (\text{II.134})$$

est une fonction matricielle qui peut être calculée via l'expression (I.154) qui se réduit à la forme (I.143) si la matrice \mathbf{A} est diagonalisable. On remarque que la norme de la solution $\mathbf{y}(t)$ est préservée,

$$\|\mathbf{y}(t)\| = \|\mathbf{y}(0)\|, \quad (\text{II.135})$$

si

$$\boxed{\mathbf{U}^T(t) \cdot \mathbf{U}(t) = \mathbf{1} \iff \mathbf{A}^T = -\mathbf{A}} \quad (\text{II.136})$$

Pour les équations différentielles linéaires complexes on généralise

$$\boxed{\mathbf{U}^H(t) \cdot \mathbf{U}(t) = \mathbf{1} \iff \mathbf{A}^H = -\mathbf{A}} \quad (\text{II.137})$$

II.3.2. Equations inhomogènes. Pour un système propulsé par une “force” externe on considéra des systèmes de la forme générale

$$\boxed{\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t)} \quad (\text{II.138})$$

ou bien explicitement

$$\begin{pmatrix} \frac{dy_1(t)}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dy_n(t)}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \vdots \\ y_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(t) \\ \vdots \\ f_n(t) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.139})$$

La solution de tels systèmes peut être obtenue par transformation de Laplace, et on donne ici la forme générique de la solution,

$$\boxed{\mathbf{y}(t) = \underbrace{\exp(-t\mathbf{A}) \cdot \mathbf{y}(0)}_{\mathbf{y}_h(t)} + \underbrace{\int_0^t dt' \exp(-(t-t')\mathbf{A}) \cdot \mathbf{f}(t')}_{\mathbf{y}_p(t)}, \quad t \geq 0} \quad (\text{II.140})$$

dont la validité peut être vérifiée par insertion dans l'éq. (II.138). Ici $\mathbf{y}_h(t)$ est la solution de l'équation différentielle homogène et $\mathbf{y}_p(t)$ est une solution particulière de l'équation différentielle inhomogène. Un aspect qui est souvent important pour un système dynamique qui est décrit par les fonctions $y_k(t)$ est la *stabilité*. On voit bien que propagateur $\mathbf{U}(t) = \exp(-t\mathbf{A})$ décrit une solution stable, i.e. globalement oscillante ou décroissante, si les valeurs propres de la matrice \mathbf{A} vérifient

$$\boxed{\Re\{\lambda_k\} \geq 0, \quad k = 1, \dots, m} \quad (\text{II.141})$$

partant de m valeurs propres différentes. Dans ce cas

$$\boxed{\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{y}(t) = \mathbf{y}_p(t)} \quad (\text{II.142})$$

ce qui montre que la solution particulière décrit le *régime stationnaire*.

Exemple II.2. Oscillateur harmonique: On considère les équations de mouvement

$$\dot{y}_1(t) = \Omega y_2(t), \quad (\text{II.143})$$

$$\dot{y}_2(t) = -\Omega y_1(t), \quad (\text{II.144})$$

dont la forme matricielle est

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(t) \\ \dot{y}_2(t) \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

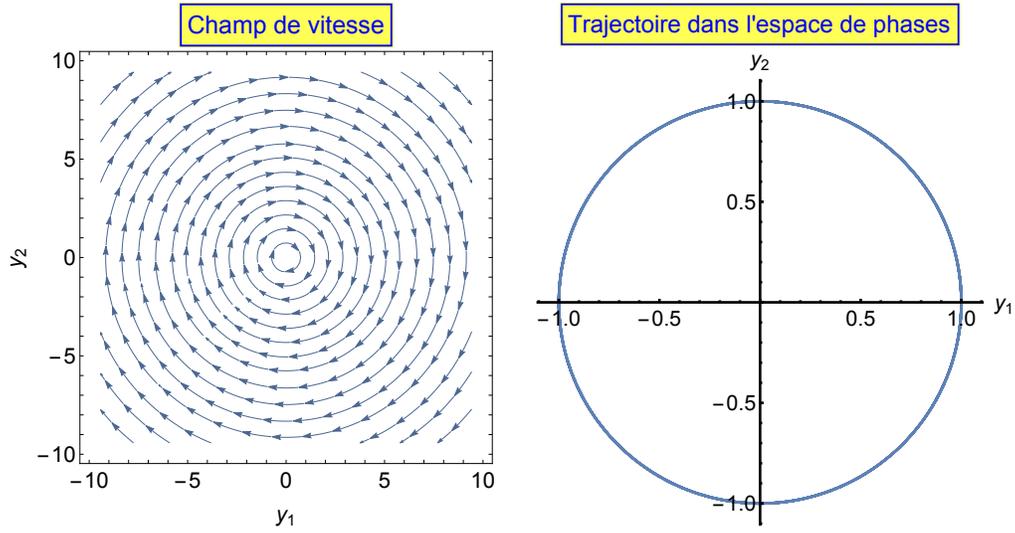


FIGURE 6. **A gauche :** Champ de vitesse V pour les équations du mouvement (II.143) et (II.146). **A droite :** Trajectoire (II.2) dans l'espace de phases pour $\Omega = 1$ et les conditions initiales $y_1(0) = 1, y_2(0) = 0$.

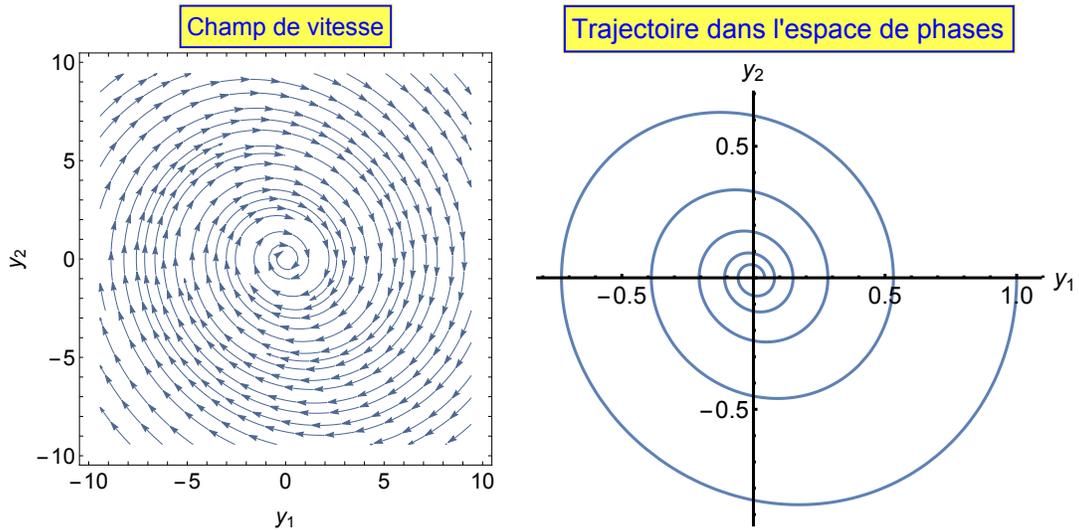


FIGURE 7. **A gauche :** Champ de vitesse V pour les équations du mouvement (II.145) et (II.146). **A droite :** Trajectoire (II.3) dans l'espace de phases pour $\Omega = 1, \eta = 0.2$ et les conditions initiales $y_1(0) = 1, y_2(0) = 0$.

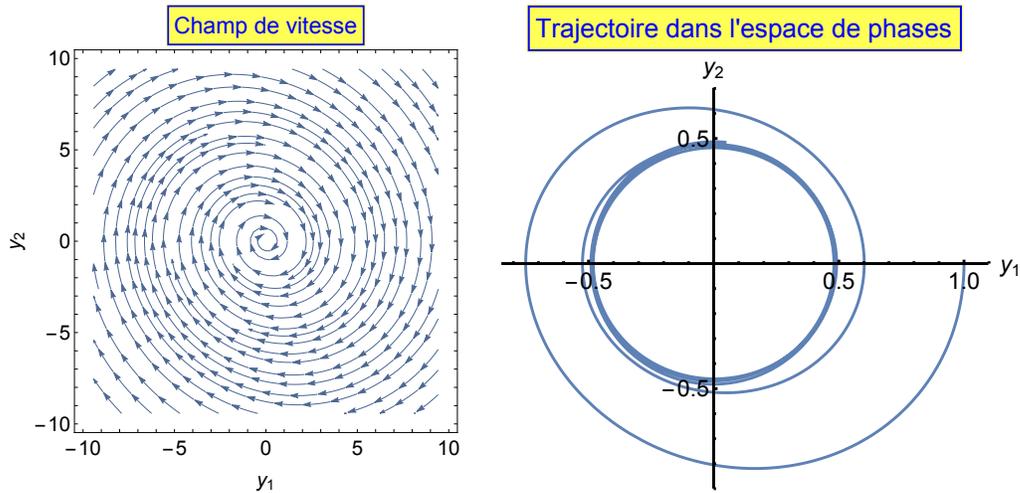


FIGURE 8. **A gauche** : Champ de vitesse \mathbf{V} pour les équations du mouvement (II.147) et (II.148). **A droite** : Trajectoire (II.4) dans l'espace de phases pour $\Omega = 1$, $\eta = 0.2$, $\epsilon = 0.1$ et les conditions initiales $y_1(0) = 1$, $y_2(0) = 0$.

Il s'agit des équations de mouvement canonique d'un oscillateur linéaire amorti de fréquence Ω , avec une constante de relaxation η . La matrice \mathbf{A} est ici diagonalisable et la décomposition de Jordan,

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1},$$

donne

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -i\Omega & 0 \\ 0 & i\Omega \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} -i & i \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Calculant le propagateur de la solution par

$$\exp(-t\mathbf{A}) = \mathbf{T} \cdot \exp(-t\mathbf{J}) \cdot \mathbf{T}^{-1}$$

on obtient ici la trajectoire (voir fig. 6)

$$\begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(t\Omega) & \sin(t\Omega) \\ -\sin(t\Omega) & \cos(t\Omega) \end{pmatrix}}_{\exp(-t\mathbf{A})} \cdot \begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix},$$

qui représente un cercle, i.e. une trajectoire fermée. Visiblement, le propagateur $\exp(-t\mathbf{A})$ est une matrice de rotation et ne change pas la norme du vecteur dans l'espace de phases.

Exemple II.3. Oscillateur harmonique avec friction: On considère les équations de mouvement

$$\dot{y}_1(t) = \Omega y_2(t), \quad (\text{II.145})$$

$$\dot{y}_2(t) = -\Omega y_1(t) - \eta y_2(t), \quad (\text{II.146})$$

dont la forme matricielle est

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(t) \\ \dot{y}_2(t) \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & \eta \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Il s'agit des équations de mouvement canonique d'un oscillateur linéaire amorti de fréquence Ω , avec une constante de relaxation η . La matrice \mathbf{A} est ici diagonalisable et la décomposition de Jordan,

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1},$$

donne

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\eta-a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a+\eta}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} -\frac{a+\eta}{2\Omega} & \frac{a-\eta}{2\Omega} \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

où a est défini par

$$a = \sqrt{\eta^2 - 4\Omega^2}.$$

Calculant le propagateur de la solution par

$$\exp(-t\mathbf{A}) = \mathbf{T} \cdot \exp(t\mathbf{J}) \cdot \mathbf{T}^{-1}$$

on obtient ici la trajectoire (voir fig. 7)

$$\begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}((a+\eta)e^{at}+a-\eta)}{2a} & \frac{\Omega(e^{at}-1)e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}}{a} \\ -\frac{\Omega(e^{at}-1)e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}}{a} & \frac{e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}((a-\eta)e^{at}+a+\eta)}{2a} \end{pmatrix}}_{\exp(-t\mathbf{A})} \cdot \begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix}.$$

Dans cet exemple on doit distinguer entre le régime où a est imaginaire (régime oscillatoire) et le régime où a est réel (régime non-oscillatoire). On note que a est imaginaire pour les paramètres donnés dans la légende de la fig. 7.

Exemple II.4. Oscillateur harmonique propulsé avec friction: Dans le dernier exemple de cette série considère un oscillateur avec friction propulsé par une force externe périodique. Les équations du mouvement sont ici

$$\dot{y}_1(t) = \Omega y_2(t), \quad (\text{II.147})$$

$$\dot{y}_2(t) = -\Omega y_1(t) - \eta y_2(t) + \epsilon \cos(t), \quad (\text{II.148})$$

dont la forme matricielle est

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(t) \\ \dot{y}_2(t) \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & \eta \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ \epsilon \cos(t) \end{pmatrix}}_{\mathbf{f}(t)}.$$

La matrice \mathbf{A} est la même que dans l'exemple précédent,

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T}^{-1},$$

Définissant l'abréviation

$$\mathbf{G}(t) = \exp(-t\mathbf{A}) = \mathbf{T} \cdot \exp(t\mathbf{J}) \cdot \mathbf{T}^{-1},$$

où la forme explicite de $\mathbf{G}(t)$ est

$$\mathbf{G}(t) = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}((a+\eta)e^{at}+a-\eta)}{2a} & \frac{\Omega(e^{at}-1)e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}}{a} \\ -\frac{\Omega(e^{at}-1)e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}}{a} & \frac{e^{-\frac{1}{2}t(a+\eta)}((a-\eta)e^{at}+a+\eta)}{2a} \end{pmatrix}$$

on obtient ici la trajectoire (voir fig. 8)

$$\mathbf{y}(t) = \exp(-t\mathbf{A}) \cdot \mathbf{y}(0) + \int_0^t dt' \exp(-(t-t')\mathbf{A}) \cdot \mathbf{f}(t'), \quad t \geq 0.$$

La fig. 8 montre que la trajectoire tend ici vers un cycle limite qui représente le régime stationnaire.

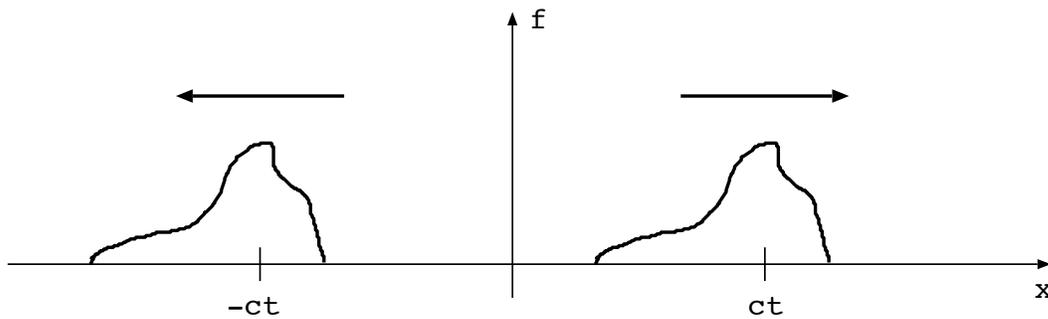


FIGURE 1. Propagation d'un signal $f(x \mp ct)$.

Chapitre III

Equations aux dérivées partielles

III.1. Equation d'onde

III.1.1. Ondes unidimensionnelles. La chaîne linéaire est un système dont les équations de mouvements couplées des oscillateurs individuels mènent à une équation aux dérivées partielles de la forme

$$\boxed{\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0} \quad (\text{III.1})$$

si l'on considère une distribution continue d'oscillateurs. Ceci est une équation différentielle aux dérivées partielles linéaire d'ordre 2 qui décrit un phénomène de propagation. Pour comprendre cela on écrit l'éq. (III.1) dans la forme

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) u(x, t) = 0.$$

ou dans la forme équivalente

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) u(x, t) = 0.$$

Comme

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x + ct) &= 0, \\ \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x - ct) &= 0, \end{aligned}$$

pour une fonction $f(x)$ quelconque, $u(x, t)$ doit avoir la forme

$$\boxed{u(x, t) = c_1 f(x - ct) + c_2 f(x + ct)} \quad (\text{III.2})$$

La figure 1 montre les solutions de base $f(x \mp ct)$ pour une fonction $f(x)$ quelconque. On remarque que

$$u(x, t) = \text{const. pour } x = \pm ct \quad (\text{III.3})$$

et on appelle $x = \pm ct$ les caractéristiques de l'équation d'onde, où $\pm c$ est la vitesse de propagation.

III.1.2. Ondes tridimensionnelles. Les ondes en trois dimensions sont décrites par l'équation d'onde

$$\boxed{\left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right\} u(\mathbf{r}, t) = 0} \quad (\text{III.4})$$

Ici Δ est l'opérateur de Laplace. En coordonnées cartésiennes il a la forme

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{III.5})$$

Si l'on introduit un vecteur d'unité

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}, \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1, \quad (\text{III.6})$$

on voit que

$$\left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right\} f(\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{r} \mp ct) = 0$$

et la solution générale est à la forme

$$\boxed{u(\mathbf{r}, t) = c_1 f(\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{r} - ct) + c_2 f(\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{r} + ct)} \quad (\text{III.7})$$

Ici

$$u(\mathbf{r}, t) = \text{const. pour } \mathbf{n}^T \cdot \mathbf{r} \mp ct = 0, \quad (\text{III.8})$$

où la condition

$$\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{r} \mp ct = 0 \quad (\text{III.9})$$

décrivent les caractéristiques de l'équation d'onde qui sont ici des plans. Ici $v_p = \pm cn$ est la vitesse de propagation. Une forme particulière pour la solution sont les ondes planes

$$u(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\mp\omega t)}, \quad \text{où } \omega = c|\mathbf{k}|. \quad (\text{III.10})$$

On vérifie que

$$Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\mp\omega t)} = Ae^{i|\mathbf{k}|(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}\mp\omega t/|\mathbf{k}|)} = Ae^{i|\mathbf{k}|(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}\mp ct)}$$

est de la forme générale $f(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} \mp ct)$

En coordonnées sphériques le Laplacien a la forme

$$\Delta = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}}_{\Delta_r} + \underbrace{\frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}}_{\Delta_\Omega}, \quad (\text{III.11})$$

où Δ_r et Δ_Ω sont, respectivement la partie radiale et angulaire. Les ondes sphériques vérifient l'équation d'onde

$$\boxed{\left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta_r \right\} u(r, t) = 0} \quad (\text{III.12})$$

Ici on vérifie que

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{f(r \mp ct)}{r} = 0, \quad (\text{III.13})$$

où $f(r)$ est une fonction quelconque, et la solution générale a la forme

$$\boxed{u(r, t) = c_1 \frac{f(r - ct)}{r} + c_2 \frac{f(r + ct)}{r}} \quad (\text{III.14})$$

Une forme spéciale sont les ondes sphériques

$$u(r, t) = A \frac{e^{i(kr \mp \omega t)}}{r}, \quad \text{où } \omega = ck, \quad (\text{III.15})$$

car

$$A \frac{e^{i(kr \mp \omega t)}}{r} = A \frac{e^{i(k(r \mp \omega t/k))}}{r} = A \frac{e^{i(k(r \mp ct))}}{r}$$

est de la forme $f(r \mp ct)/r$.

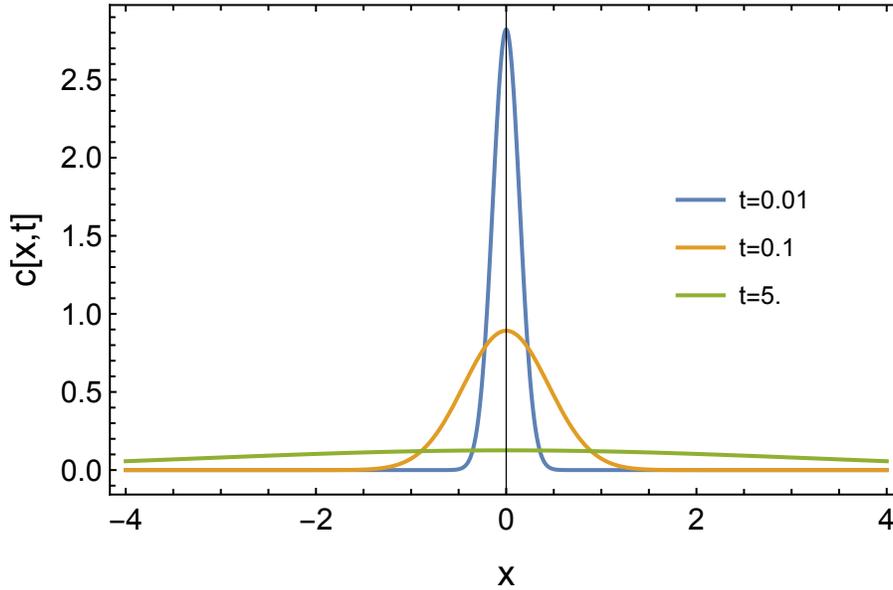


FIGURE 2. Evolution de la concentration pour la diffusion libre en une dimension

III.2. Equation de diffusion

Une équation aux dérivées partielles qui est de grande importance pour les processus de diffusion et de transport en général est l'équation de diffusion

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = D \Delta c(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III.16})$$

La solution $c(\mathbf{r}, t)$ décrit la concentration de particules et D est le coefficient de diffusion. L'équation de diffusion a été introduite par Adolf Fick [2] comme équation phénoménologique, inspirée par l'équation de conduction de la chaleur de Joseph Fourier et interprétée 50 ans plus tard par A. Einstein [3]. Elle peut être construite en deux pas. Le premier est de dire que la concentration doit vérifier une équation de continuité de la forme

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{III.17})$$

où la densité de courant est donnée par

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D \nabla c(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III.18})$$

La forme intégrale de l'équation de continuité est

$$\underbrace{\partial_t \int_V d^3r c(\mathbf{r}, t)}_{N_V(t)} = - \underbrace{\oint_{\partial V} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}_{I_{\partial V}(t)} = 0, \quad (\text{III.19})$$

et exprime que tout changement du nombre de particules dans un volume V se fait par le flux à travers la surface du volume. A l'intérieur du volume des particules ne sont ni détruites ni créées, indépendamment de sa taille, ce qui décrit la conservation du nombre de particules si $V \rightarrow \infty$, supposant que $I_{\partial V}(t) \rightarrow 0$. La solution de l'équation de diffusion se fait d'une manière élégante par transformation de Fourier, mais comme cet outil n'est pas encore développé, nous donnons la solution

$$c(\mathbf{r}, t) = N \frac{e^{-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}}}{(\sqrt{4\pi Dt})^3} \quad (\text{III.20})$$

qui peut être vérifiée par insertion. Elle vérifie en particulier

$$\int_V d^3r c(\mathbf{r}, t) = N \quad (\text{III.21})$$

où N est le nombre de particules et sa largeur croît $\sim t^{1/2}$,

$$\sigma(t) = \sqrt{2Dt}. \quad (\text{III.22})$$

A $t = 0$ la largeur est nulle, et la condition initiale est donc que toutes les particules sont concentrées à $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, car $\sigma(0) = 0$. La figure 2 montre l'évolution d'un profil de diffusion en une dimension. la solution (III.20) peut être utilisée afin d'extraire le champ de vitesse des particules diffuseurs. Avec

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III.23})$$

et la définition (III.18) pour la densité de courant, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ le résultat est

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{r}}{2t}, \quad (\text{III.24})$$

et montre que le champ de vitesse a symétrie radiale et il tend d'une valeur initiale infinie à zéro, quand l'équilibre est atteint. On remarque que la solution (III.20) ne décrit pas un phénomène de propagation, comme l'équation d'onde, où la forme de la solution initiale est maintenue au cours du temps. On remarque aussi que, au contraire à l'équation d'onde, $c(\mathbf{r}, -t)$ n'est pas aussi une solution de l'équation de diffusion, qui n'est juste pas invariante par rapport à une réflexion de l'axe de temps $t \rightarrow -t$. Les phénomènes de diffusion est un phénomène irréversible. Une goutte d'encre dans un verre d'eau qui est initialement concentrée en un point va toujours s'étaler au cours du temps, mais on n'observe jamais le contraire.

Bibliographie

- [1] S.L. Altmann. *Rotations, Quaternions, and Double Groups*. Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [2] Adolf Fick. Ueber Diffusion. *Annalen der physik*, 170(1) :59–86, 1855.
- [3] A Einstein. über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der physik*, 322(8) :549–560, 1905.
- [4] G.H. Golub and C.F. van Loan. *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, 1996.