

RESEARCH OUTPUTS / RÉSULTATS DE RECHERCHE

Méthodes mathématiques appliquées à la chimie

Nguyen, Van Hien; Delhalle, Joseph; Andre, Jean-Marie

Publication date:
2000

[Link to publication](#)

Citation for published version (HARVARD):

Nguyen, VH, Delhalle, J & Andre, J-M 2000, *Méthodes mathématiques appliquées à la chimie*.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Méthodes mathématiques
appliquées à la chimie

Nguyen Van Hien, Joseph Delhalle, Jean-Marie André

CHAPITRE 1 ENSEMBLES, NOTION DE FONCTION.....	1
1.1. INTRODUCTION A LA NOTION DE FONCTION	1
1.2. ENSEMBLES.....	5
1.3. DES ENTIERS AUX NOMBRES COMPLEXES	5
1.3.1. Les nombres N , Z , Q et R	5
1.3.2. Les nombres C	7
Equations du second degré.....	8
Nombres complexes	9
Le nombre i , la notation $x + iy$	10
Imaginaires conjugués.....	11
Equations du second degré (suite)	11
1.3.2. Les nombres et le calcul par ordinateur.....	12
1.4. FONCTIONS	13
1.5. EXERCICES.....	15
CHAPITRE 2 SUITES NUMÉRIQUES. NOTION DE LIMITE.....	16
2.1. LIMITE	16
2.1.1. Suites, convergence	16
2.1.2. Propriétés élémentaires des suites convergentes	19
Suite partielle	20
Suite bornée.....	21
Limites infinies	21
Calcul de limites usuelles.....	24
2.2. FONCTIONS CONTINUES D'UNE VARIABLE	25
2.2.1. Valeurs limites d'une fonction.....	25
2.2.2. Fonction continue	28
2.2.2. Propriétés élémentaires des fonctions continues.....	29
2.2.3. Fonctions continues sur un intervalle fermé et borné.....	31
Fonctions strictement monotones	34
Définition et étude des exposants fractionnaires.....	36
2.3. EXERCICES.....	38
CHAPITRE 3 FONCTIONS UTILES (I).....	39
3.1. FONCTION LINEAIRE AFFINE.....	39

3.1.1. Définition et propriétés	39
3.1.2. Anamorphose linéaire	41
Loi des gaz parfaits	41
Ordre d'une réaction chimique.....	42
Energie d'activation	42
3.2. LOI DE PROPORTIONNALITE INVERSE.....	42
3.2.1. Définition et propriétés	42
Isotherme d'adsorption de Langmuir	45
3.3. QUELQUES LIEUX GEOMETRIQUES	46
3.3.1. Le Cercle.....	46
3.3.2. L'Ellipse	47
3.3.3. L'Hyperbole.....	48
3.3.4. La Parabole	49
3.5. EXERCICES.....	51
CHAPITRE 4 DERIVEE	53
4.1. INTRODUCTION.....	53
4.1.1. Interprétation géométrique : tangente	57
4.1.2. Valeurs approchées d'une fonction	58
4.2. VITESSE DE REACTION	59
4.2.1. Vitesse moyenne	60
4.2.2. Vitesse instantanée.....	60
4.3. PROPRIETES DES DERIVEES.....	61
4.3.1. Propriétés élémentaires.....	61
4.3.1. Dérivation des fonctions composées.....	62
Loi des gaz parfaits	65
Ordre d'une réaction chimique.....	65
Energie d'activation.....	65
CHAPITRE 5 FONCTIONS DE PLUSIEURS VARIABLES (I).....	66
5.1. NOTION DE FONCTION DE PLUSIEURS VARIABLES	66
5.2. FONCTIONS CONTINUES.....	67
5.3. LES DERIVEES PARTIELLES	68
Interprétation géométrique de dérivées partielles	69

Dérivées partielles d'ordre supérieure	70
5.4. FONCTIONS DIFFERENTIABLES	71
5.5. REGLE DE DIFFERENTIATION DES FONCTIONS COMPOSEES.....	73
5.5. LA DIFFERENTIELLE TOTALE.....	79
LES FACTEURS INTEGRANTS	86
CHAPITRE 6 FONCTIONS DE PLUSIEURS VARIABLES (II).....	91
6.1. INTEGRALES DOUBLES.....	91
6.2. CALCUL PRATIQUE D'UNE INTEGRALE DOUBLE	92
6.3. CHANGEMENTS DE VARIABLES DANS LES INTEGRALES DOUBLES.....	95
Changement de variables cas général	98
6.4. INTEGRALES TRIPLES	98
6.5. CALCUL PRATIQUE D'UNE TRIPLE	99
6.6. CALCUL D'UNE TRIPLE EN COORDONNEES CYLINDRIQUES ET SPHERIQUES	102
6.6.1. Coordonnées cylindriques.....	102
6.6.2. Coordonnées sphériques.....	103
6.7. THEOREME DE GREEN (LIEN ENTRE INTEGRALE CURVILIGNE ET INTEGRALE DOUBLE).....	104
6.8. THEOREME DE LA DIVERGENCE DE GAUSS ET THEOREME DE LA CIRCULATION DE STOKES - INTEGRALE SUR UNE SURFACE.....	108
CHAPITRE 11 ANALYSE DE FOURIER	113
11.1. SERIES DE FOURIER.....	113
11.1.1. Définitions.....	113
11.1.2. Détermination des coefficients de Fourier	115
11.1.3. Calcul d'erreur dans les séries de Fourier finies.....	121
11.1.4. Développement de fonctions paires et impaires.....	126
11.1.5. Série de Fourier de période T quelconque.....	127
11.1.6. Forme exponentielle de séries de Fourier.....	131
11.1.7. Théorème de PARSEVAL.....	135

11.1.8. Séries de Fourier comme développements en série de fonctions orthogonales.....	137
Approche «à la Von Neumann»	137
Approche «à la DIRAC»	139
11.2. TRANSFORMÉE DE FOURIER	139
11.2.1. Définitions.....	139
11.2.2. Propriétés des transformées de Fourier.....	141
Additivité.....	142
Déplacement («Shift»).....	142
Facteur d'échelle («Scaling»).....	143
Théorème de convolution	143
Transformée de Fourier d'une impulsion rectangulaire.....	145
Transformée de Fourier d'une fonction gaussienne.....	146
Transformée de Fourier d'une fonction exponentielle	147
La fonction de Dirac comme transformée de Fourier à une et trois dimensions	147
11.3. DETERMINATION NUMÉRIQUE DES SÉRIES ET TRANSFORMÉES DE FOURIER.....	149
11.4. EXEMPLES D'UTILISATION EN CHIMIE	150
11.4.1. Introduction	150
11.4.2. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en spectroscopie	151
11.4.3. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en détermination de structures moléculaires	162
Séries de Fourier spatiales à une dimension	163
Séries de Fourier spatiales à trois dimensions	165
11.4.4. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en dynamique moléculaire	170
11.4.5. Quelques autres applications	174
Facteur de diffusion atomique	174
Diffraction X de structures liquides.....	174
Génération de seconde harmonique en optique linéaire.....	174
Détermination de la structure du DNA par Crick et Watson	176

Barrières de rotation interne.....	176
11.5. EXERCICES	176
11.6. BIBLIOGRAPHIE SELECTIVE.....	176

1

Ensembles, notion de fonction

Dans ce chapitre sont introduites les notions nécessaires à la construction du cours. Elles seront également utiles au lecteur intéressé par des matières qui ne sont pas reprises ici.

1.1. INTRODUCTION A LA NOTION DE FONCTION

Les grandeurs auxquelles nous avons affaire peuvent être classées en *constantes* et *variables*. Certaines grandeurs ont une dépendance mutuelle qui peut souvent être exprimée par une *relation* ou *équation mathématique* traduisant une loi chimique, physique ou autre. Cette interdépendance peut s'étendre à plus de deux variables mais nous n'envisageons pour le moment que le cas de deux variables en état de dépendance mutuelle. L'une de ces variables est choisie comme *variable indépendante* tandis que l'autre, la *variable dépendante*, est *fonction* de la variable indépendante.

Prenons comme exemple concret le mouvement rectiligne uniforme, dans lequel nous supposons que l'origine des temps et l'origine des espaces coïncident. Dans ce cas particulier, la vitesse v du mobile est une constante, les variables sont d'une part le temps écoulé t , d'autre part l'espace parcouru e . Le temps est choisi comme variable indépendante et l'espace parcouru e est la variable dépendante. La relation qui existe entre ces deux variables s'exprime par l'équation 1.1 qui traduit en langage mathématique la loi du

$$e = v \cdot t, \quad (1.1)$$

mouvement rectiligne uniforme : l'espace parcouru est proportionnel au temps écoulé. L'espace parcouru e est fonction du temps t et la forme de cette fonction - dans ce cas particulier - est une simple proportionnalité, v jouant le rôle de coefficient de proportionnalité.

Le choix de la variable indépendante dépend de la façon dont le problème est posé. Si l'on s'intéresse à l'espace e parcouru après un temps donné t par un mobile animé d'un mouvement rectiligne de vitesse constante v , le temps est la variable indépendante. Si au contraire on s'intéresse au temps mis par le mobile pour parcourir un espace donné e , alors l'espace parcouru est la variable indépendante. Le temps t sera alors la variable dépendante et la relation d'interdépendance s'écrira,

$$t = \frac{e}{v}, \quad (1.2)$$

où t est fonction de e . En fait, il est proportionnel à e , le coefficient de proportionnalité étant ici l'inverse v^{-1} de la vitesse constante. D'une façon générale, la variable indépendante sera la donnée du problème, la variable dépendante sera l'inconnue à déterminer.

Une fonction peut comporter plus de deux variables. Par exemple, le volume V occupé par une mole d'un gaz parfait est une variable dépendante qui dépend à la fois de la pression P subie par le gaz et de la température absolue T à laquelle il est soumis, suivant la relation connue sous le nom de loi des gaz parfaits,

$$PV = RT, \quad (1.3)$$

où $R (= 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1})$ est la constante des gaz parfaits. La pression P et la température absolue T sont alors les deux variables indépendantes. Ici encore, la variable indépendante dépend de la façon dont le problème est posé et la relation $PV = RT$ pourra s'écrire,

$$V = \frac{RT}{P}, \quad (1.4a)$$

$$T = \frac{PV}{R}, \quad (1.4b)$$

$$P = \frac{RT}{V}. \quad (1.4c)$$

Pour que les deux variables soient fonction l'une de l'autre, il n'est nullement nécessaire que leur dépendance s'exprime au moyen des

symboles mathématiques usuels. Deux autres formes de représentation sont importantes : la représentation graphique et la représentation sous forme d'un tableau.

La courbe représentée sur la figure 1.1, aussi appelée isotherme, représente la variation de la pression P (en atm) en fonction du volume V (en l) d'une mole de CO_2 à une température constante T (293.15 K) à laquelle le gaz peut exister en équilibre avec le liquide. Bien que cette

Figure 1.1 - Graphe de l'isotherme d'une mole de CO_2 ($T = 293.15$ K).

courbe ne puisse être représentée par une équation simple, le graphe donne pour chaque valeur positive V une valeur de P et décrit entièrement la fonction dans le domaine retenu. Les résultats expérimentaux s'obtiennent souvent sous forme de graphe (sur les oscilloscopes, potentiomètres enregistreurs, spectromètres, etc.). Un inconvénient de cette représentation est qu'il n'est pas toujours possible, suite à une précision trop limitée, d'exploiter les valeurs des variables que l'on pourrait lire directement sur le graphe de leur fonction.

Température										
(°C)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0,000	0,006	0,006	0,007	0,007	0,008	0,009	0,009	0,010	0,011	0,011
10,00	0,012	0,013	0,014	0,015	0,016	0,017	0,018	0,019	0,020	0,022
20,00	0,023	0,025	0,026	0,028	0,029	0,031	0,033	0,035	0,037	0,040
30,00	0,042	0,044	0,047	0,050	0,053	0,056	0,059	0,062	0,065	0,069
40,00	0,073	0,077	0,081	0,085	0,090	0,095	0,100	0,105	0,110	0,116
50,0	0,122	0,128	0,134	0,141	0,148	0,156	0,163	0,171	0,179	0,188

Tableau 1.1 - Pression de vapeur saturante (en atm) de l'eau en fonction de la température (en °C).

Le tableau 1.1 ci-dessus rassemble des données sur l'évolution de la pression de vapeur saturante de l'eau avec la température. La pression de vapeur saturante apparaît comme une fonction de la température mais elle n'est pas exprimée par des symboles mathématiques usuels, cette fonction est définie par le tableau 1.1. Un désavantage de cette représentation est qu'il est malaisé de déterminer la variable dépendante pour d'autres valeurs de la variable indépendante que celles reprises dans le tableau sans recourir à des techniques d'approximation (moindres carrés, interpolation, etc.). C'est par exemple le cas lorsque les informations sont entachées d'erreurs expérimentales. Les cercles de la figure 1.2 correspondent aux résultats expérimentaux de mesure de la solubilité S (en mol.l⁻¹) du chlorure d'argent dissous dans le chlorure d'argent (AgCl) en fonction de la concentration en ions chlorure [Cl⁻] (en mol.l⁻¹) dans la solution. Il est évidemment ridicule de tracer un graphique discontinu en joignant les points successifs par des éléments de droites (cf. fig. 1.2). On peut cependant obtenir une courbe continue passant entre tous les points en s'efforçant de minimiser la somme des carrés des écarts entre les points expérimentaux et ceux de cette courbe.

Figure 1.2 - Graphe de la solubilité S de AgCl en fonction de la concentration en ions chlorure $[\text{Cl}^-]$ dans la solution.

Une fonction donnée par une équation mathématique peut se représenter sous forme de tableau ou graphiquement; toute fonction donnée sous la forme d'un tableau peut être représentée graphiquement mais avec une précision limitée. L'inverse n'est pas toujours possible : une fonction définie par un tableau ou graphiquement ne se laisse pas toujours traduire en une équation mathématique.

1.2. ENSEMBLES

Avant de systématiser la notion de fonction

1.3. DES ENTIERS AUX NOMBRES COMPLEXES

Ce paragraphe a pour but de rappeler des notions de base relatives aux nombres, nous supposons le lecteur déjà familier avec ces notions.

1.3.1. Les nombres \mathbf{N} , \mathbf{Z} , \mathbf{Q} et \mathbf{R}

Les nombres les plus simples sont les *entiers naturels* 0,1,2, ... qui servent à dénombrer les collections finies d'objets. L'ensemble dont les éléments sont les entiers naturels se désigne par la lettre \mathbf{N} .

Viennent ensuite les *entiers rationnels* ; ce sont les nombres ..., -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, ... L'ensemble formé par ces nombres se désigne par le lettre \mathbf{Z} (initiale du mot allemand «Zahl» qui veut dire nombre).

La troisième catégorie de nombre est celle des *nombre rationnels* ; ce sont les quotients p/q où p et q sont des entiers rationnels avec $q \neq 0$ (on peut même supposer $q > 0$, au besoin en changeant le signe de p). Chaque nombre rationnel est représenté par une infinité de fractions p/q distinctes, étant entendu que la relation $a/b = c/d$ équivaut à $ad = bc$. L'ensemble des nombres rationnels (de signe quelconque) se désigne par la lettre **Q**, initiale du mot quotient.

Les nombres réels ont été introduits géométriquement par les Grecs pour résoudre le problème de la mesure des grandeurs. La façon la plus simple de les définir et la mieux adaptée aux besoins du calcul numérique est de déclarer qu'un tel nombre est un développement décimal illimité précédé d'un signe «+» (que l'on se dispense d'écrire explicitement) ou «—» (que l'on mentionne effectivement). Rappelons que deux développements décimaux illimités peuvent fort bien représenter le même nombre réel, par l'exemple :

$$0.4219999999999999..... = 0.42200000000000000000.....$$

Les nombres rationnels peuvent être considérés comme des réels particuliers, par exemple :

$$17/13 = 1.307692307692307692307692307692307692307.....$$

On note qu'ils sont caractérisés par le fait que leur développement décimal est périodique. Dans l'exemple précédent, le bloc périodique est «307692».

Les nombres réels non rationnels sont dits *irrationnels*. c'est le cas, par exemple de $\sqrt{2} = 1.4142135...$ et du nombre $\pi = 3.14159...$ Il existe cependant une formidable différence entre ces deux nombres. Le nombre $x = \sqrt{2}$ est *algébrique*, c'est-à-dire qu'il est racine d'au moins une équation

$$a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = 0, \tag{1.5}$$

à coefficients $a_n, a_{n-1}, \dots, a_1, a_0$ *rationnels*. Ainsi $x = \sqrt{2}$ est racine de l'équation $x^2 - 2 = 0$. En revanche on a pu démontrer (Lindemann, 1882) que le nombre π n'est pas algébrique, ce que l'on exprime en disant qu'il est *transcendant*. L'ensemble des nombres réels se désigne par la lettre **R** et

entre les différents nombres rencontrés dans ce paragraphe on a les relations suivantes : $\mathbf{N} \subset \mathbf{Z} \subset \mathbf{Q} \subset \mathbf{R}$.

Rappelons que l'on peut effectuer quatre opérations algébriques fondamentales sur les nombres réels, il s'agit de :

- (i) on a $x + y = y + x$ quels que soient x et y ;
- (ii) on a $x + (y + z) = (x + y) + z$ quels que soient x , y et z ;
- (iii) il existe un nombre 0 tel que l'on ait $x + 0 = x$ pour tout x ;
- (iv) quels que soient a et b , il existe un nombre x tel que $a + x = b$;
- (v) on a $xy = yx$ quels que soient x et y ;
- (vi) on a $x \cdot (yz) = (xy) \cdot z$ quels que soient x , y , z ;
- (vii) il existe un nombre 1 tel que l'on ait $1x = x$ pour tout x ;
- (viii) quels que soient a et b , avec $a \neq 0$, il existe un nombre x tel que $ax = b$;
- (ix) on a $x \cdot (y + z) = xy + xz$ quels que soient x , y , z .

Dans ces énoncés, x , y , z , a , b , ... désignent des nombres réels. On exprime ces constatations en disant que, relativement aux deux opérations fondamentales (addition et multiplication), \mathbf{R} est un *corps commutatif*. Toutes les identités remarquables et plus généralement toutes les formules *algébriques* imaginables découlent logiquement des propriétés (i) à (ix) ci-dessus. C'est le cas d'identités telles que :

$$(x + y)^2 = x^2 + 2xy + y^2$$

$$x^2 - y^2 = (x - y) \cdot (x + y)$$

$$x^n - y^n = (x - y) \cdot (x^{n-1} + x^{n-2}y + \dots + xy^{n-2} + y^{n-1})$$

1.3.2. Les nombres \mathbf{C}

Blabla

Equations du second degré

Une équation du second degré est de la forme $ax^2 + bx + c = 0$ ($a \neq 0$). En posant $y = x + b/2a$ on peut mettre cette équation sous la forme,

$$y^2 = \frac{(b^2 - 4ac)}{4a^2} \quad (1.6)$$

en sorte que la résolution d'une équation du second degré se ramène à celle d'une équation de la forme $y^2 = k$ qui possède deux solutions si $k > 0$, une solution si $k = 0$ et aucune solution si $k < 0$. En posant $y = z\sqrt{-k}$ on est ramené à résoudre l'équation $z^2 + 1 = 0$ qui n'a pas de racine dans le corps des nombres réels. L'introduction des nombres complexes a pour but de remplacer le corps \mathbf{R} des nombres réels par un corps plus grand dans lequel l'équation $z^2 + 1 = 0$ possède des racines. En fait, l'introduction de ces nombres complexes permet en fait de résoudre toutes les équations algébriques de degré quelconque. Ceci est résumé dans le Théorème Fondamental de l'Algèbre (Théorème de d'Alembert-Gauss, fin du XVIIIème siècle) : «Toute équation algébrique à coefficients réels ou complexes possède au moins une racine dans le corps des nombres complexes».

Avant de considérer les nombres complexes, il est utile de faire quelques remarques préliminaires qui faciliteront la compréhension ultérieure. Supposons que nous ayons construit un corps commutatif \mathbf{C} contenant le corps \mathbf{R} des nombres réels, d'une part, et une racine que nous noterons i de l'équation $z^2 + 1 = 0$, d'autre part. Alors \mathbf{C} contiendra l'expression $a + ib$ quels que soient a, b réels. Les règles de calcul usuelles, supposées vérifiées dans \mathbf{C} , conduisent aux formules :

$$(a + ib) + (c + id) = (a + c) + i \cdot (b + d) \quad (1.7a)$$

$$(a + ib) \cdot (c + id) = (ac - bd) + i \cdot (ad + bc) \quad (1.7b)$$

La première formule (1.7a) est évidente, la seconde (1.7b) se déduit de la relation $(a + ib) \cdot (c + id) = ac + iad + ibc + i^2bd$ avec $i^2 = -1$. On prend les formules (1.7a) et (1.7b), obtenues en supposant le problème résolu, comme point de départ pour la définition des nombres complexes. Observons que ce

qui compte avant tout dans l'expression $a + ib$ c'est le couple formé par les deux nombres réels a et b . Les formules (1.7a) et (1.8b) montrant clairement comment on peut écrire la somme ou le produit de deux nombres complexes sans faire intervenir le mystérieux symbole i .

Nombres complexes : définition et opérations

Nous appellerons tout *nombre complexe* tout couple $z = (x, y)$ de nombres réels x, y (respectivement appelés la *partie réelle* et la *partie imaginaire* du nombre complexe). Si $z = (x, y)$ et si $z' = (u, v)$, la relation $z = z'$ équivaut à $x = u$ et $y = v$ en vertu de la règle fondamentale de calcul des couples en Théorie des Ensembles. On définit la somme de deux nombres complexes à l'aide de la formule,

$$(x, y) + (u, v) = (x + u, y + v) \quad (1.8a)$$

et leur produit en posant :

$$(x, y) \cdot (u, v) = (xu - yv, xv + yu) \quad (1.8b)$$

Ces deux dernières formules sont évidemment inspirées des équations (1.7a) et (1.7b) du paragraphe 1.3.2.

Remarquons dès à présent que les définitions (1.8a) et (1.8b) impliquent,

$$(x, 0) + (y, 0) = (x + y, 0) \quad (1.9a)$$

$$(x, 0) \cdot (y, 0) = (xy, 0) \quad (1.9b)$$

quels que soient x, y réels. Il s'ensuit que si l'on associe à chaque nombre réel x le nombre complexe $(x, 0)$, toute relation algébrique entre les nombres réels sera transformée en une relation analogue entre les nombres complexes correspondants. Il n'y aura dès lors pas lieu de distinguer le nombre réel x du nombre complexe $(x, 0)$ correspondant et il suit que l'on peut regarder les nombres réels comme de simples cas particuliers des nombres complexes

L'addition des nombres complexes est *commutative* et *associative*. Il existe un nombre complexe noté 0 tel que l'on ait $z + 0 = z$ pour tout nombre complexe z - à savoir le nombre $(0, 0)$. Enfin, quels que soient les

nombres complexes (a,b) et (c,d) , l'équation $(a,b) + (x,y) = (c,d)$ possède une (et une seule) solution donnée par $x = c - a$ et $y = d - b$.

La multiplication est de même *commutative* et *associative*. Il existe enfin un nombre complexe, noté 1, tel que l'on ait $1z = z$ quel que soit z , à savoir le nombre $(1,0)$.

Il reste à montrer que les nombres complexes forment un corps en établissant, d'une part, que l'on peut toujours effectuer des divisions (sauf bien entendu par le nombre complexe nul) et, d'autre part, en prouvant l'identité de la distributivité $z \cdot (z' + z'') = zz' + zz''$. Le lecteur justifiera lui-même ce dernier point à l'aide de calculs directs (Ex. 1.5). Soit à résoudre l'équation,

$$(a,b) \cdot (x,y) = (c,d) \quad (1.10)$$

qui, en combinant les deux relations $ax - by = c$ et $ay + bx = d$, revient à :

$$(a^2 + b^2) \cdot x = ac + bd, \quad (a^2 + b^2) \cdot y = ad - bc \quad (1.11)$$

Si $(a,b) \neq (0,0)$, on a $a^2 + b^2 \neq 0$ et (1.11) implique :

$$x = \frac{ac + bd}{a^2 + b^2}, \quad y = \frac{ad - bc}{a^2 + b^2} \quad (1.12)$$

Il est aisé de contrôler que, pour ces valeurs de x et y , la relation (1.8) est vérifiée.

Le nombre i , la notation $x + iy$

Pour tout nombre complexe (x,y) on a $(x,y) = (x,0) + (0,1) \cdot (y,0) = (x,0) + (0,y)$ ce qui permet d'abandonner la notation (a,b) et d'adopter, sans risque de confusion, les conventions suivantes d'écriture : *le nombre complexe $(0,1)$ sera désigné par la lettre i* et pour tout nombre réel x , le nombre complexe $(x,0)$ sera désigné par x . Avec ces conventions, la relation ci-dessus s'écrit,

$$(x,y) = x + iy, \quad (1.13)$$

notation que désormais nous utiliserons exclusivement pour désigner le nombres complexes. L'ensemble des nombres complexes est noté \mathbf{C} .

Remarquons que pour savoir calculer sur les nombres complexes il suffit de connaître les propriétés suivantes :

- (i) les nombres complexes forment un corps commutatif \mathbf{C} , ce qui entraîne la validité des propriétés (i) à (ix) du paragraphe 1.3.1.;
- (ii) le corps \mathbf{C} contient le corps \mathbf{R} des nombres réels et les opérations sur les nombres complexes sont compatibles avec celles que l'on connaît déjà dans \mathbf{R} ;
- (iii) il existe un nombre complexe i tel que tout nombre complexe z puisse s'écrire sous la forme $z = x + iy$ avec x, y réels;
- (iv) on a la relation $i^2 = -1$. Celle-ci s'obtient en observant que $i^2 = (0,1) \cdot (0,1) = (-1,0) = -1$.

Imaginaires conjugués

Etant donné un nombre complexe $z = x + iy$ avec x et y réels, on appelle x la *partie réelle* et y la *partie imaginaire* de z ; on les désigne souvent par les notations : $x = \operatorname{Re}(z)$, et $y = \operatorname{Im}(z)$. On appelle *conjugué* de z le nombre complexe z^* . On a donc $\operatorname{Re}(z^*) = \operatorname{Re}(z)$ et $\operatorname{Im}(z^*) = -\operatorname{Im}(z)$. Il est facile de vérifier les formules suivantes,

$$(z_1 + z_2)^* = z_1^* + z_2^* \quad \text{et} \quad (z_1 \cdot z_2)^* = z_1^* \cdot z_2^*, \quad (1.14)$$

qui permettent de calculer le conjugué d'une somme ou d'un produit.

Un nombre complexe est réel si et seulement si $z^* = z$. On dit d'autre part que z est imaginaire si $\operatorname{Re}(z) = 0$; il revient au même d'exiger que $z^* = -z$. Soit $z = x + iy$ un nombre complexe; on a alors $zz^* = x^2 + y^2$ (Ex. 1.7). Ce résultat montre que le produit zz^* est toujours réel positif et ne peut être nul que si $z = 0$.

Equations du second degré (suite)

Soit $az^2 + bz + c = 0$ ($a \neq 0$) une équation du second degré à coefficients complexes qui peut être réécrite sous la forme :

$$\left(z + \frac{b}{2a}\right)^2 = \frac{(b^2 - 4ac)}{4a^2}, \quad (1.15)$$

Considérons tout d'abord le problème qui consiste à résoudre l'équation

$(x + iy)^2 = \alpha + i\beta$ avec x, y, α, β réels. Elle se décompose en deux relations $x^2 - y^2 = \alpha$ et $2xy = \beta$.

- (i) Si $\beta \neq 0$, on a nécessairement $x \neq 0$ et l'on déduit que $y = \beta/2x$ et $x^2 - 2\beta/4x^2 = \alpha$ qui se réduit à l'équation bicarrée : $4x^2 - 4\alpha x^2 - \beta^2 = 0$. On tire d'abord $x^2 = \alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ et comme le premier membre est positif on doit prendre le signe +. Il vient que $x = \varepsilon \sqrt{\alpha + \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}$ et $y = \beta/2x$, avec $\varepsilon = +1$ ou -1 .
- (ii) Si $\beta = 0$, on a soit $x = 0$, soit $y = 0$. Si $x = 0$, il vient $y^2 = -\alpha$ et si $y = 0$, il vient au contraire $x^2 = \alpha$. La seconde éventualité ne peut se présenter que pour $\alpha \geq 0$ et la première pour $\alpha \leq 0$; autrement dit :
- pour $\beta = 0$ et $\alpha > 0$, on a $x = \varepsilon \sqrt{\alpha}$ et $y = 0$,
 - pour $\beta \neq 0$ et $\alpha > 0$, on a $x = 0$ et $y = \varepsilon \sqrt{-\alpha}$,
 - pour $\alpha = \beta = 0$, on a $x = y = 0$.

Cette discussion montre que tout nombre complexe non nul possède deux racines carrées distinctes et opposées, tandis que 0 ne possède évidemment qu'une seule racine carrée, à savoir 0.

Dès lors l'équation $az^2 + bz + c = 0$ ($a \neq 0$) admet toujours au moins une solution et au plus deux, donnée(s) par la formule,

$$z = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (1.16)$$

où le symbole $\sqrt{b^2 - 4ac}$ représente l'une quelconque des racines carrées du nombre $b^2 - 4ac$, l'insertion du signe « \pm » n'étant pas nécessaire puisqu'on ne peut pas parler du «signe» d'un nombre complexe. De ce qui précède il découle que l'équation du second degré $az^2 + bz + c = 0$ ($a \neq 0$) possède *une* racine si $b^2 - 4ac = 0$ et en possède *deux* si $b^2 - 4ac \neq 0$. Ceci vérifie le Théorème Fondamental de l'Algèbre évoqué précédemment.

1.3.2. Les nombres et le calcul par ordinateur

>>>> la suite devrait intervenir dans les chapitres ultérieurs après avoir introduit les fonctions trigonométriques et les vecteurs <<<<<

1.4. FONCTIONS

Dans ce paragraphe la notion de fonction est systématisée, étape indispensable aux analyses mathématiques et à leurs conséquences dans les applications aux sciences les plus diverses.

Définition

Soient \mathbf{X} et \mathbf{Y} deux ensembles. Intuitivement, on appelle *fonction définie sur \mathbf{X} et à valeur dans \mathbf{Y}* toute opération consistant à faire correspondre, à chaque élément x de \mathbf{X} , un élément y de \mathbf{Y} (et un seul <quid des fonctions multivoques?>) dépendant de x suivant une loi donnée d'avance.

Si l'on appelle f la fonction, on désigne par $f(x)$ l'élément de \mathbf{Y} qui, par f , correspond à un élément x de \mathbf{X} :

$$y = f(x), \quad (1.17)$$

L'expression un peu lourde «soit f une fonction définie sur \mathbf{X} et à valeurs dans \mathbf{Y} » est fréquemment remplacée par des terminologies plus simples telles que :

«soit f une fonction de \mathbf{X} dans \mathbf{Y} »,

ou

«soit une fonction $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$ »,

ou

«soit une fonction $f : \mathbf{X} \xrightarrow{f} \mathbf{Y}$ ».

Il arrive fréquemment que l'on définisse une fonction en énonçant la formule permettant de calculer $f(x)$ à l'aide de x . Par exemple, lorsqu'on écrit «la fonction $y = (2\pi)^{-1/2} \exp(-x^2/2)$ », il s'agit de la fonction f , définie sur $\mathbf{X} = \mathbf{R}$ (ensemble des nombres réels) à valeur $\mathbf{Y} = \mathbf{R}$, de telle façon que $f(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-x^2/2)$ pour tout $x \in \mathbf{R}$. Insistons sur le fait que, pour

définir une fonction, il est nécessaire de définir son *domaine de définition* \mathbf{X} et son *ensemble de valeurs* \mathbf{Y} . Enfin, si l'on a une fonction $f: \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$, on appelle valeur de f en $x \in \mathbf{X}$ l'élément $y = f(x)$ de \mathbf{Y} . La donnée d'une fonction réelle d'une variable réelle $x \rightarrow y = f(x)$ de \mathbf{R} dans \mathbf{R} pose immédiatement le problème d'étudier les variations de y en fonction des variations de x . Le moyen le plus pratique d'y répondre est de recourir à une représentation graphique. Pour ce faire, on choisit deux axes rectangulaires Ox, Oy en fixant les unités de longueur le long de ces axes. A chaque valeur de x correspond une valeur *bien déterminée* de y puisque y est fonction de x ; à chaque couple (x, y) correspond un point M unique admettant x et y comme coordonnées (cf. fig. 1.3). En procédant de la sorte pour tous les couples (x, y) on obtient une courbe qui offre une vue d'ensemble des variations de la fonction. La figure 1.4a donne le graphe de la pression P d'une mole d'hélium (He) en fonction du volume V à une température de 298 K. Les valeurs numériques utilisées pour construire ce graphe dérivent

Figure 1.3 - Point M de coordonnées (x, y) dans un système d'axes rectangulaires Ox et Oy .

de l'équation de van der Waals,

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = RT, \quad (1.18)$$

où $a = 0.034 \text{ l}^2 \cdot \text{atm}$ et $b = 0.024 \text{ l}$. Remarquons que si l'on porte V en graphique en fonction de P on obtient une fonction multivoque (cf. fig. 1.4b). Dans la plupart des cas rencontrés dans ce cours nous ne rencontrerons que des fonctions univoques pour lesquelles une relation bijective ...

» Fonctions multivoques

1.5. EXERCICES

1.1 Représenter graphiquement les fonctions définies par les équations (1.4a) à (1.4c). Préciser celles qui sont de simples relations de proportionnalité.

1.2 Représentez graphiquement courbe de pH en fonction de....

1.3 Représentez graphiquement courbe du modèle de Schlögel...

1.4 Le nombre $x = \sqrt[3]{(2 - \sqrt{5})}$ est-il racine de l'équation $(x^3 - 2)^2 = 5$?
S'agit-il d'un nombre réel algébrique ou transcendant ?

1.5 Vérifier l'identité $z \cdot (z' + z'') = zz' + zz''$.

1.6 Vérifier que $i^n = 1$ si $n = 4p$, i si $n = 4p + 1$, -1 si $n = 4p + 2$, $-i$ si $n = 4p + 3$ et $-i$ si $n = -1$.

1.7 Vérifier que $zz^* = x^2 + y^2$. En partant de ce résultat montrez que pour $z \neq 0$ on a $z^{-1} = \frac{x}{x^2 + y^2} - i \frac{y}{x^2 + y^2}$.

1.7 En

2

Suites numériques. Notion de limite

La notion de suite numérique étant à la base même de l'analyse mathématique, on donne dans ce chapitre un exposé des propriétés des limites.

2.1. LIMITE

2.1.1. Suites, convergence

Définition

Etant donné un ensemble \mathbf{X} , on appelle *suite d'éléments de \mathbf{X}* l'objet obtenu en associant à chaque entier $n \geq 1$ un élément de \mathbf{X} , dépendant de n .

Une suite n'est donc pas autre chose qu'une fonction de l'ensemble des entiers naturels $\mathbf{N} = \{1, 2, \dots\}$ dans l'ensemble \mathbf{X} et par conséquent devrait être désignée par un symbole fonctionnel tel que f, g, \dots , l'élément de \mathbf{X} correspondant à un entier n se notant alors $f(n), g(n), \dots$. Toutefois, pour des raisons historiques, il est habituel de désigner une suite en écrivant ses termes dans l'ordre naturel où ils se présentent, u_1, u_2, u_3, \dots en sorte que la fonction f est ici donnée par : $f(n) = u_n$ pour tout n , ou encore sous la forme condensée $(u_n)_{n \geq 1}$ ou enfin en écrivant explicitement la formule qui permet de calculer u_n en fonction de n .

Exemple

Lorsque l'on parle de la suite de terme général $f(n) = n^2 + 1/n$, il s'agit de la suite dont les termes successifs sont les nombres :

$$1^2 + 1/1, 2^2 + 1/2, 3^2 + 1/3, \dots$$

c'est-à-dire de la fonction f de l'ensemble \mathbf{N} dans \mathbf{R} donné par $f(n) = n^2 + 1/n$ pour tout n .

Avant de poursuivre, précisons qu'il arrivera fréquemment d'écrire des relations telles que $1/3n^2 < 2$. Nous dirons qu'une telle relation est *vraie pour n suffisamment grand* ou *pour n grand* s'il existe un entier naturel N tel que la relation considérée soit vraie pour tout $n \geq N$ (ce qui ne veut pas nécessairement dire que la relation soit fausse pour $n < N$. Il reviendrait au même d'exiger que les entiers n «exceptionnels» pour lesquels la relation considérée n'est pas vraie soient en nombre finis.

Exemple

On a $1/n \leq 0.001$ pour n grand car cette relation s'écrit $1/n \leq 1/1000$ et équivaut donc à $n \geq 1000$, ce qui montre bien qu'elle est vérifiée dès que n dépasse un certain entier N (à savoir 1000).

Considérons maintenant une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels. Intuitivement, on dit que u_n *tend vers une limite u* ou *converge vers u* lorsque n augmente indéfiniment et si u_n est très voisin de u pour n grand. Autrement dit, si pour tout nombre réel $\varepsilon > 0$, si petit soit-il, l'inégalité $|u_n - u| \leq \varepsilon$ est vérifiée pour n grand (ce qui exprime que u est égal à u_n à ε près).

Définition

On dit que u_n tend ou converge vers u si, pour tout nombre réel $\varepsilon > 0$, il existe un entier naturel N (dépendant en général de ε) tel que l'on ait $|u_n - u| \leq \varepsilon$ pour tout $n \geq N$.

On peut représenter la suite $(u_n)_{n \geq 1}$ par un graphe, l'ensemble des points (n, u_n) dans le plan, et la convergence vers u signifie que, quel que soit $\varepsilon > 0$, tous les points du graphe, sauf peut-être un nombre fini d'entre eux, sont situés dans la bande limitée par les horizontales $u - \varepsilon$ et $u + \varepsilon$.

Figure 2.1 -xxxxxxxxxxxx

Remarques

- (i) Lorsque n augmente indéfiniment, la distance $|u_n - u|$ ne diminue pas nécessairement de façon régulière. Cette distance peut tendre vers 0 en oscillant de façon fort compliquée et/ou irrégulière. Ce n'est que pour n assez grand que l'amplitude des oscillations est aussi petite qu'on le désire.
- (ii) Pour qu'une suite $(v_n)_{n \geq 1}$ converge vers 0 il faut et il suffit que, pour tout $\varepsilon > 0$, la relation $|v_n| \leq \varepsilon$ soit vraie pour n assez grand. Posant $v_n = u_n - u$, on voit donc que *la convergence d'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ vers une limite u équivaut à la convergence de $u_n - u$ vers 0.*

Pour suite $(u_n)_{n \geq 1}$ tendant vers une limite u , on écrit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u,$$

expression dans laquelle le symbole « ∞ » n'a par lui-même aucun sens et son rôle dans l'écriture précédente est purement indicatif. En écrivant « $n \rightarrow \infty$ » ou « $n \rightarrow \infty$ » on veut évoquer dans l'esprit du lecteur des images concrètes (dépourvues de sens mathématiques) telles que celle d'une succession dans le temps, d'une série de mesures expérimentales de plus en plus précises, etc.

Exemples

- (i) Pour $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} = 0$ il faut vérifier que, pour tout $\varepsilon > 0$, la relation $|n|^{-1} \leq \varepsilon$, c'est-à-dire $n^{-1} \leq \varepsilon$, est vraie pour n grand; or elle s'écrit $n\varepsilon \geq 1$. Une propriété de la relation d'ordre $x \leq y$ dans \mathbf{R} peut être utilisée, elle stipule que, quels que soient x, y tels que $0 \leq x, 0 \leq y$ il existe un entier $n > 0$ tel que l'on ait $y \leq nx$ (axiome

d'Archimède). Cette propriété prouve l'existence d'un entier N tel que $N\varepsilon \geq 1$ pour tout $n \geq N$, d'où le résultat.

- (ii) Pour $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{n+1} = 1$ on note que $\left|1 - \frac{n}{n+1}\right| = \frac{1}{n+1}$, quantité qui tend vers 0 d'après l'exemple (i) ci-dessus et prouve le résultat
- (iii) La suite de terme général $u_n = (-1)^n + 1/n$ dont les termes successifs sont $0, 2/3, -2/3, 5/4, -4/5, \dots$ ne converge pas. Les termes d'indice n pair tendent vers $+1$ tandis que les termes d'indice impair tendent vers -1 .

2.1.2. Propriétés élémentaires des suites convergentes

Nous énumérons ci-dessous quelques propriétés élémentaires sur les suites convergentes en commençant par un premier résultat (i) à partir duquel l'utilisation des autres propriétés permettra d'effectuer des opérations algébriques simples sur les suites convergentes.

- (i) Si une suite converge, sa limite est unique.
- (ii) Si une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ converge vers une limite u et si a est un nombre réel donné, la suite de terme général $a \cdot u_n$ converge vers $a \cdot u$.
- (iii) Si des suites $(u_n)_{n \geq 1}$ et $(v_n)_{n \geq 1}$ convergent vers des limites u et v , la suite de terme général $u_n + v_n$ converge vers $u + v$.
- (iv) Si des suites $(u_n)_{n \geq 1}$ et $(v_n)_{n \geq 1}$ convergent vers des limites u et v , la suite de terme général $u_n \cdot v_n$ converge vers $u \cdot v$.
- (v) Si une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ converge vers une limite $u \neq 0$, la suite de terme général $1/u_n$ converge vers $1/u$.

En combinant les résultats (iv) et (v), on voit que si l'on a deux suites telles que,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} v_n = v \neq 0,$$

alors il vient :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{u_n}{v_n} = \frac{u}{v}$$

Une autre conséquence très simple et importante des résultats précédents est que si P et Q sont deux polynômes à une variable à coefficients réels et $(u_n)_{n \geq 1}$ une suite qui converge vers une limite u avec $Q(u) \neq 0$, alors on a :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P(u_n)}{Q(u_n)} = \frac{P(u)}{Q(u)}.$$

Exemple

La suite de terme général, $\frac{n^2 - 1}{n^2 + n + 1} = \frac{1 - \frac{1}{n^2}}{1 + \frac{1}{n} + \frac{1}{n^2}}$, tend vers $1/1 = 1$

puisque $1/n$ tend vers 0.

Suite partielle

Un procédé fréquemment utilisé pour décider de la convergence d'une suite repose sur la notion de *suite partielle*. On

Définition

Une suite $(v_n)_{n \geq 1}$ est une suite partielle extraite d'une suite donnée $(u_n)_{n \geq 1}$ s'il existe des entiers $p_1 < p_2 < p_3 < \dots$ tels que l'on ait $v_n = u_{p_n}$ pour tout n .

Exemple

La suite $1/n^2$ est extraite de la suite $1/n$ si l'on prend $p_n = n^2$.

Théorème

Si une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ converge vers une limite u , toute suite partielle extraite de la suite $(u_n)_{n \geq 1}$ converge vers u .

Exemple

Comme $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} = 0$, on déduit du théorème précédent que $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-k} = 0$ pour tout entier $k \geq 1$.

Suite bornée

Définition

Une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ est dite *bornée* si l'ensemble de ses termes est borné, c'est-à-dire s'il existe une constante M telle que l'on ait $|u_n| \leq M$ pour tout n ou pour tout n assez grand.

Une suite convergente est évidemment bornée mais une suite bornée, par exemple $u_n = (-1)^n$, n'est pas nécessairement convergente. On dit qu'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels est *monotone* si l'on a :

- ou bien $u_n \leq u_{n+1}$ quel que soit n (*suite croissante*),
- ou bien $u_n \geq u_{n+1}$ quel que soit n (*suite décroissante*).

Exemple

La suite $1/n$ est décroissante, la suite $n/(n+1)$ est croissante. La suite $(-1)^n/n$ n'est pas monotone.

Théorème

Pour qu'une suite croissante $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels soit convergente, il faut et il suffit qu'elle soit *bornée supérieurement*, c'est-à-dire qu'il existe un nombre M tel que $u_n \leq M$ pour tout n . La limite des u_n est alors égale à $\max(\mathbf{E})$, la borne supérieure de l'ensemble \mathbf{E} des u_n . De manière analogue, pour qu'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ décroissante converge, il faut et il suffit que l'ensemble \mathbf{E} de ses termes soit *borné inférieurement* et alors la limite des u_n est égale à $\inf(\mathbf{E})$.

Exemple

.....
.....

Limites infinies

Lorsqu'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels ne tend pas vers une limite, il peut arriver,

- soit que les nombres u_n varient de façon irrégulière lorsque n augmente,
- soit qu'ils augmentent ou diminuent indéfiniment.

Exemple

La suite de terme général $u_n = n$ n'est pas bornée et donc ne converge pas, cependant elle présente un comportement plus «raisonnable» que la suite $u_n = \sin n$. Dans la pratique il est très utile de pouvoir noter qu'une suite «augmente régulièrement».

Définition

On dit d'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels qu'elle *tend vers* $+\infty$ ou *augmente indéfiniment* lorsque n augmente indéfiniment si, pour tout A , on a $u_n \geq A$ pour n assez grand.

En d'autres termes, si pour tout nombre A il existe un entier N tel que l'on ait $u_n \geq A$ pour tout $n \geq N$. on écrit alors,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty,$$

où le symbole $+\infty$ n'a en soit aucune signification si ce n'est d'évoquer
De même on écrit,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = -\infty,$$

lorsque, pour tout nombre A , on a $u_n \geq A$ pour n grand. Dans le cas où u_n tend vers $+\infty$, il est raisonnable mais pas indispensable de supposer A «très grand positif» et dans le cas où u_n tend vers $-\infty$ de supposer A «très grand négatif».

Exemple

Il est clair que la suite du terme général n^2 tend vers $+\infty$. Il en est de même de la suite du terme général $n^2 - n$ bien que le terme général de celle-ci soit la différence de deux quantités qui augmentent indéfiniment en sorte que le comportement de cette différence n'est pas clair a priori.

Théorème

Soit $P(x) = a_r x^r + \dots + a_1 x + a_0$ un polynôme de degré $r \geq 1$ à coefficients réels ($a_r \neq 0$) ; lorsque n augmente indéfiniment, $P(n)$ tend vers $+\infty$ si $a_r > 0$ et vers $-\infty$ si $a_r < 0$.

Le règles de calcul établies pour les suites convergentes s'étendent dans une certaine mesure aux suites qui convergent vers $+\infty$ ($-\infty$) mais il faut faire preuve à ce sujet de la plus extrême prudence et se méfier d'énoncés «évidents» qui peuvent être faux. C'est pourquoi les trois règles fondamentales suivantes doivent être gardées à l'esprit.

- (i) Si $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et si $v_n \geq u_n$ pour n grand, alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} v_n = +\infty$.
- (ii) Si $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et si a est un nombre strictement positif, alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} (a \cdot u_n) = +\infty$.
- (iii) La relation $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ implique $\lim_{n \rightarrow \infty} (u_n)^{-1} = 0$; inversement, si $(u_n)^{-1}$ tend vers 0 et si $u_n > 0$ pour n grand, on a $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$.

Il est facile de déduire de (i) et (ii) d'autres règles de calcul utile. Par exemple :

- (iv) Si $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et si v_n converge vers une limite finie ou bien vers $+\infty$, alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} (u_n + v_n) = +\infty$.
- (v) Si $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et si v_n tend vers $+\infty$ ou bien vers une limite strictement positive, alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} (u_n \cdot v_n) = +\infty$.

Ces règles de calcul peuvent être complétées par l'analyse de situations où des raisonnements analogues pourraient conduire à des résultats faux.

Exemples

- (i) Si l'on a $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et $\lim_{n \rightarrow \infty} v_n = -\infty$, on ne peut rien déduire *a priori* en ce qui concerne la suite générale du terme $u_n + v_n$ qui peut :
 - soit converger vers une limite finie (par exemple si $u_n = n$ et $v_n = -n$);
 - soit converger vers $+\infty$ (par exemple si $u_n = (n+1)^2$ et $v_n = -n^2$);
 - soit converger vers $-\infty$ (par exemple si $u_n = n$ et $v_n = -n^2$);

- soit ne posséder aucune limite finie ou infinie (par exemple si $u_n = n + \sin n$ et $v_n = -n$).
- (ii) On ne peut non plus rien déduire *a priori* des relations $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = +\infty$ et $\lim_{n \rightarrow \infty} v_n = 0$ en ce qui concerne la suite du terme général $u_n \cdot v_n$, elle peut :
 - soit tendre vers une limite finie (par exemple si $u_n = n^2 - n$ et $v_n = 1/n^2$);
 - soit vers $+\infty$ (par exemple si $u_n = n^2$ et $v_n = 1/n$);
 - soit vers $-\infty$ (par exemple si $u_n = n^2$ et $v_n = -1/n$);
 - soit ne posséder aucune limite (par exemple si $u_n = n^2$ et $v_n = n^{-1} \sin n$).

Calcul de limites usuelles

Nous calculons ici quelques limites qui se rencontrent souvent en pratique.

- (i) $\lim_{n \rightarrow \infty} (\sqrt[n]{q}) = 1$ pour tout $q > 0, q \in \mathbf{R}$.
.....
- (ii) $\lim_{n \rightarrow \infty} (\sqrt[n]{n^p}) = 1$ pour tout $p \in \mathbf{N}$.
.....
- (iii) $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n^k}{q^n} \right) = 0$ pour tout $k \in \mathbf{N}$ et pour tout $q > 1, q \in \mathbf{R}$.
.....
- (iv) $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{x^n}{n!} \right) = 0$ pour tout $x \in \mathbf{R}$.
.....
- (v) La suite géométrique $(q^n)_{n \geq 0}$ converge pour $|q| < 1$ et diverge pour $|q| \geq 1, q \in \mathbf{R}$.
.....

Nous terminons ce paragraphe en donnant une *condition nécessaire et suffisante* de convergence d'une suite. Une telle condition présente l'intérêt

de pouvoir s'utiliser même si l'on ne connaît pas d'avance la valeur exacte de la limite cherchée.

Théorème (Critère de Cauchy)

Pour qu'une suite $(u_n)_{n \geq 1}$ de nombres réels soit convergente, il faut et il suffit que, pour tout nombre $\varepsilon > 0$, il existe un entier N tel que les relations $p \geq N$ et $q \geq N$ impliquent $|u_p - u_q| \leq \varepsilon$.

Exemple

.....

.....

2.2. FONCTIONS CONTINUES D'UNE VARIABLE

2.2.1. Valeurs limites d'une fonction

Valeurs limites d'une fonction définie sur un intervalle

Définition

Soit a un nombre réel ou bien le symbole $+\infty$ et considérons une fonction f à valeurs réelles définie sur un ensemble \mathbf{E} de nombres réels et supposons que \mathbf{E} contient un intervalle ouvert non vide $]b, a[$, autrement dit qu'il existe un nombre $b < a$ tel que f soit définie pour $b < x < a$. On dit que $f(x)$ tend vers une limite u lorsque x tend vers a par valeurs inférieures à a si, pour tout nombre $\varepsilon > 0$, il existe un nombre $c < a$ tel que l'on ait $|f(x) - u| \leq \varepsilon$ pour tout x tel que $c < x < a$.

Il est utile de distinguer le cas où $a = +\infty$ du cas où a est fini. Dans le premier cas, l'existence de la limite s'exprime pratiquement en écrivant que

$$u = \lim_{x \rightarrow \infty} (f(x)). \quad (2.1)$$

De la définition précédente, cette relation signifie que pour tout nombre $\varepsilon > 0$, il existe un nombre c tel que l'on ait $|f(x) - u| \leq \varepsilon$ pour tout $x \geq c$. La situation est entièrement analogue à celle du paragraphe 2.1, la seule différence étant qu'au lieu de considérer des fonctions définies lorsque la variable est un *entier* assez grand on étudie ici des fonctions définies pour tout *nombre réel* assez grand. Comme f est à valeurs réelles, l'interprétation géométrique de la relation (2.1) est que le graphe de f est asymptote à la droite $y = u$ (cf. fig. 2.2)

Figure 2.2 -xxxxxxxxxxxxx

Si a est fini, on exprime pratiquement l'existence d'une limite en écrivant que

$$u = \lim_{x \rightarrow a-0} f(x), \tag{2.2}$$

où le symbole « $a-0$ » ne peut naturellement pas être remplacé par a . Il suggère l'image d'un nombre réel x qui varie en se rapprochant de plus en plus de a tout en restant strictement inférieur à a . Comme a est fini, on peut dans la définition donnée poser $c = a - \delta$ où $\delta > 0$ et on voit alors que la relation (2.2) se traduit par la propriété suivante. Pour tout nombre $\varepsilon > 0$, il existe un nombre $\delta > 0$ tel que l'on ait :

$$|f(x) - u| \leq \varepsilon \text{ pour tout } x \text{ tel que } a - \delta \leq x < a. \tag{2.3}$$

On fera attention dans (2.3) à l'inégalité *stricte* $x < a$. La valeur de f en a (dans le cas où f serait définie en a) *n'intervient pas* dans la question. Si la fonction f est définie en a , il est traditionnel de désigner la limite u (si elle existe) par la notation : $f(a-0)$.

Exemple

Si la fonction f est définie pour tout x réel par

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 2 \\ 0 & \text{si } x = 2, \\ 4 & \text{si } x > 2 \end{cases}$$

la *limite à gauche* $f(x-0)$ existe pour tout x et est donnée par :

$$f(x-0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq 2 \\ 4 & \text{si } x > 2 \end{cases}.$$

Notons que $f(x-0) = f(x)$ pour tout $x \neq 2$ alors que $f(2-0) = 1$ et $f(2) = 0$.

On définit aussi des *limites à droite*. Soit a un nombre réel ou bien le symbole $-\infty$ et considérons une fonction f définie au minimum dans un intervalle ouvert non vide $]a, b[$. On dit que f tend vers une limite u lorsque x tend vers a par valeurs supérieures à a si, pour tout nombre $\varepsilon > 0$, il existe un nombre $c > a$ tel que l'on ait $|f(x) - u| \leq \varepsilon$ pour tout x tel que $a < x \leq c$. On écrit alors,

$$u = \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x)$$

dans le cas où $a = -\infty$ et

$$u = \lim_{x \rightarrow a+0} f(x)$$

lorsque a est fini. Dans ce dernier cas, si la fonction f est définie au point a , la limite se désigne encore par la notation

$$f(a+0).$$

Exemple

En reprenant l'exemple précédent on a évidemment

$$f(x+0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 2 \\ 4 & \text{si } x \geq 2 \end{cases}$$

$$\text{et } f(2-0) = 1, f(2) = 0 \text{ et } f(2+0) = 4.$$

Il est intéressant de noter qu'il existe des fonctions n'admettant pas de limite à droite ou à gauche en aucun point de l'intervalle où elles sont définies.

Si, dans la relation (2.x), on pose $x = a + h$ comme il était traditionnel de la faire autrefois, on peut encore énoncer comme suit la définition de la continuité : f est continue en a si, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un nombre $\delta > 0$ tel que les relations

$$|h| \leq \delta \text{ et } a+h \in \mathbf{I} \text{ impliquent } |f(a+h) - f(a)| \leq \varepsilon.$$

On aura soin de ne pas oublier, dans cette définition, la condition $a+h \in \mathbf{I}$ où \mathbf{I} est un intervalle dans \mathbf{R} .

2.2.2. Fonction continue

Définition

Une fonction f , à valeurs réelles, définie dans intervalle $\mathbf{I} \subset \mathbf{R}$, est dite *continue dans \mathbf{I}* si elle est continue en chaque point de \mathbf{I} .

Cela signifie donc que, pour tout nombre $\varepsilon > 0$ et tout $x \in \mathbf{R}$, il existe un nombre $\delta > 0$ tel que l'on ait $|f(y) - f(x)| \leq \varepsilon$ pour tout $y \in \mathbf{I}$ tel que $|y - x| \leq \delta$. En général, la valeur maximum que l'on puisse prendre pour δ dépend du choix de ε et du choix de x .

Exemple

La chaleur spécifique à pression constante C_p de SO_2 , en fonction de la température T , présente au point $T = 197.64 \text{ K}$ une discontinuité que l'on peut reconnaître dans le graphe de cette fonction (cf. fig. 2.3) esquissé à partir des données du tableau 2.1.

Tableau 2.1 -xxxxxxxxxxxxxxxxxx

Figure 2.3 -xxxxxxxxxxxxxxxxxx

Exemple

Fonction continue avec point anguleux

Exemple

Fonction continue "lisse"

2.2.2. Propriétés élémentaires des fonctions continues

blabla

- (i) Si deux fonctions f et g définies dans I sont continues en un point a de I , il en est de même des fonctions $f + g$ et $f \cdot g$.
- (ii) Si des fonctions f_1, \dots, f_n définies dans I sont continues en un point $a \in I$, tout polynôme en f_1, \dots, f_n est continue en a .
- (iii) Toute fonction polynomiale est continue.
- (iv) Soit une fonction f définie sur I , et continue en un point $a \in I$ et supposons $f(a) \neq 0$, alors il existe un nombre $r > a$ tel que l'on ait $f(x) \neq 0$ pour tout $x \in I$ tel que $|x - a| \leq r$ et la fonction $1/f$ (qui d'après ce qui précède est au minimum définie dans un intervalle contenant a) est continue au point a .

- (v) Si deux fonctions f et g définies dans I sont continues en $a \in I$ et si $g(a) \neq 0$, la fonction f/g est continue en a .
- (vi) Soient f et g deux fonctions polynomiales de x , alors la fonction rationnelle f/g est continue en tout point x tel que $g(x) \neq 0$.

Théorème

Soit f une fonction définie dans I et continue en un point $a \in I$ et si une suite $(x_n)_{n \geq 1}$ de points de I converge vers a , alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = f(a)$.

Preuve: Donnons-nous un nombre $\varepsilon > 0$ et montrons que l'on a $|f(x_n) - f(a)| \leq \varepsilon$ pour n assez grand. Or il existe un nombre $\delta > 0$ tel que l'on ait $|f(x) - f(a)| \leq \varepsilon$ pour tout $x \in I$ vérifiant $|x - a| \leq \delta$ (continuité de f en a). D'autre part, comme x_n tend vers a , il existe un entier p tel que l'on ait $|x_n - a| \leq \delta$ pour tout $n \geq p$. Il est alors clair que l'on aura $|f(x_n) - f(a)| \leq \varepsilon$ pour tout $n \geq p$.

La réciproque de ce résultat est vraie.

Théorème

Si l'on a $\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = f(a)$ dès que $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = a$, la fonction f est continue au point a .

Preuve: Si elle ne l'était pas, il existerait un nombre $\varepsilon > 0$ pour lequel on ne pourrait trouver aucun $\delta > 0$ vérifiant $|f(x_n) - f(a)| \leq \varepsilon$ pour tout $x \in I$ tel que $|x - a| \leq \delta$. Cela voudrait aussi dire que, quel que soit $\delta > 0$, il existerait un x vérifiant $|x - a| \leq \delta$ mais ne vérifiant pas $|f(x_n) - f(a)| \leq \varepsilon$, c'est-à-dire un x vérifiant $|x - a| \leq \delta$ et en même temps $|f(x_n) - f(a)| > \varepsilon$. Prenant $\delta = 1$, puis $\delta = 1/2$, puis $\delta = 1/3$, etc., on trouverait donc des $x_n \in I$ vérifiant $|x_n - a| \leq 1/n$ et $|f(x_n) - f(a)| > \varepsilon$. Mais alors la suite $(x_n)_{n \geq 1}$ tend vers a sans que $f(x_n)$ converge vers $f(a)$, ce qui contredit l'hypothèse sur f . La fonction est donc bien continue.

Enfin, si I et J sont deux intervalles avec f une fonction de I dans J et g une fonction de J dans \mathbf{R} , alors la fonction composée $g \circ f$ est continue au point a si f est continue en un point $a \in I$ et g continue au point $f(a) \in J$.

2.2.3. Fonctions continues sur un intervalle fermé et borné

Alors que les résultats «établis» jusqu'ici ne font appels qu'à la définition des fonctions continues et aux règles de calcul les plus simples sur les inégalités, ceux qui suivent reposent essentiellement sur les théorèmes «profonds» de l'analyse classique (théorèmes de Bolzano-Wierstrass, etc.). Bien que les énoncés des théorèmes qui vont suivre soient très simples, les démonstrations en sont comparativement subtiles. Ce paragraphe peut être omis par ceux qui ...

Considérons une fonction f à valeurs réelles, définie sur un ensemble I provisoirement quelconque, et considérons l'équation,

$$f(x) = b \tag{2.4}$$

où b est un nombre réel donné et où x désigne un élément «inconnu» de I . Etant donné un nombre $\varepsilon > 0$, nous dirons que l'équation (2.4) possède une solution à ε près s'il existe au moins un $x \in I$ tel que l'on ait

$$|f(x) - b| \leq \varepsilon$$

Il est clair que si (2.4) possède une solution («exacte») alors (2.4) possède quel que soit $\varepsilon > 0$ une solution à ε près. La réciproque n'est cependant pas vraie comme le montre l'exemple ci-dessous.

Exemple

Soient $I = [0, 1[$ et l'équation $x = 1$. Pour tout $\varepsilon > 0$ il existe des $x \in I$ tels que $|x - 1| \leq \varepsilon$ mais il n'existe aucun $x \in I$ tel que $x = 1$.

Théorème

Soit f une fonction à valeurs réelles, définie et continue dans un intervalle fermé et borné $I \subset \mathbf{R}$. Etant donné un nombre réel b , pour que l'équation $f(x) = b$ possède une solution dans I il faut et il suffit que, pour tout nombre $\varepsilon > 0$, elle possède dans I une solution à ε près.

Exemple

Pour illustrer ce résultat considérons l'équation $x^2 = 2$ dans l'intervalle $I = [0, 2]$. Si l'on sait extraire des racines carrées à 10^{-n} près on peut vérifier

que, pour tout entier n , il existe un nombre $x \in \mathbf{I}$ tels que $|x^2 - 2| \leq 10^{-n}$. Le théorème précédent prouve alors l'existence d'un $x \in \mathbf{I}$ tel que $x^2 = 2$ *exactement*. Cette existence qui peut paraître évidente n'a pu être démontrée rigoureusement qu'à partir du XIX^{ème} siècle.

Au lieu du résultat précédent, on trouve dans les manuels classiques un énoncé relatif au maximum et au minimum d'une fonction continue sur un intervalle fermé et borné.

Définition

Soit une fonction f à valeurs réelles définie sur un ensemble \mathbf{I} a priori quelconque. On dit que f est *bornée* sur \mathbf{I} si l'ensemble $f(\mathbf{I}) \subset \mathbf{R}$ est borné, autrement dit s'il existe un nombre $K \geq 0$ fini tel que l'on ait $|f(x)| \leq K$ pour tout $x \in \mathbf{I}$.

Exemple

La fonction $1/x$ est bornée sur l'intervalle $[10^{-9}, 1]$ mais n'est pas bornée sur l'intervalle $]0, 1]$.

On dira que f est *bornée supérieurement* (resp. *inférieurement*) si l'ensemble $f(\mathbf{I}) \subset \mathbf{R}$ est borné supérieurement (resp. inférieurement), c'est-à-dire s'il existe un nombre M (resp. m) tel que l'on ait $f(x) \leq M$ (resp. $f(x) \leq m$) pour tout $x \in \mathbf{I}$.

Si f est bornée supérieurement, on appelle le *maximum de f sur \mathbf{I}* la borne supérieure de l'ensemble $f(\mathbf{I})$. Le maximum de f sur \mathbf{I} se note généralement, $\sup_{x \in \mathbf{I}} f(x)$ et c'est un nombre M possédant les deux propriétés caractéristiques suivantes :

- (i) on a $f(x) \leq M$ pour tout $x \in \mathbf{I}$;
- (ii) pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un $x \in \mathbf{I}$ tel que $f(x) > M - \varepsilon$.

Si f est bornée inférieurement, on définit de même le *minimum de f sur \mathbf{I}* la borne inférieure de l'ensemble $f(\mathbf{I})$; on le note généralement, $\inf_{x \in \mathbf{I}} f(x)$ et

c'est donc le nombre m possédant les deux propriétés suivantes :

- (i) on a $f(x) \geq m$ pour tout $x \in \mathbf{I}$;
- (ii) pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un $x \in \mathbf{I}$ tel que $f(x) < m + \varepsilon$.

Lorsqu'une fonction f définie sur I est bornée supérieurement, donc possède un maximum M , il n'existe pas toujours un x tel que $f(x) = M$.

Exemple

Soient $I = [0, 1[$ et $f(x) = x$, le maximum de f est la borne supérieure de l'ensemble des x tels que $0 \leq x < 1$, autrement dit est égal à 1 et cependant l'équation $f(x) = 1$ n'a pas de solution $x \in I$

Théorème (Weierstrass)

Soit f une fonction à valeurs réelles définies et continue sur un intervalle fermé et borné $I \subset \mathbf{R}$. Alors f est bornée dans I et si l'on désigne par m et M le minimum et le maximum de f sur I , il existe des nombres $u \in I$ et $v \in I$ tels que l'on ait $f(u) = M$ et $f(v) = m$.

Exemple

.....

La figure 2.4 illustre graphiquement

Figure 2.4 -

Soit I un ensemble de nombres réels. Il est clair que si I est un intervalle (de nature quelconque), on a la propriété suivante qui caractérise les intervalles : *toutes les fois que I contient deux nombres x et y , il contient tout nombre compris entre x et y .*

Théorème (valeurs intermédiaires)

Soit f une fonction à valeurs réelles, définie et continue sur un intervalle $I \subset \mathbf{R}$. Alors l'image de I par f est encore un intervalle.

Preuve. En vertu de la caractérisation des intervalles rappelée ci-dessus, il suffit pour prouver le théorème des valeurs intermédiaires d'établir que si $f(I)$ contient deux nombres a et b , il contient tout nombre c compris entre a et b . Autrement dit, on doit établir que si chacune des deux équations $f(x) = a$ et $f(x) = b$ possède une solution dans I , alors il en est de même de l'équation $f(x) = c$ pour tout nombre c tel que $a < c < b$. En remplaçant la fonction f par la fonction $g = f - c$, on est ramené à résoudre l'équation $g(x) = 0$ sachant qu'il existe dans I des nombres u et v tels que l'on ait $g(u) = a - c < 0$ et $g(v) = b - c > 0$. Autrement dit, une fonction qui change de signe dans un intervalle s'annule au moins une fois dans cet intervalle (cf. fig. 2.5).

Figure 2.5 -.....

Fonctions strictement monotones

Définition

Soit f une fonction à valeurs réelles sur un intervalle I . On dit que f est *croissante* dans I si, étant donnés deux points quelconques x, y de I , la relation $x \leq y$ implique $f(x) \leq f(y)$. On dit que f est *strictement croissante* si la relation $x < y$ implique $f(x) < f(y)$.

Comme le montrent les figures 2.6a et 2.6b ci-dessous, les deux notions de fonction croissante et de fonction strictement croissante sont distinctes.

Figure 2.6 - ... (a) fonction croissante et (b) fonction strictement croissante.

Pour qu'une fonction croissante soit strictement croissante, il faut et il suffit que la relation $x \neq y$ implique $f(x) \neq f(y)$, autrement dit que f soit une fonction injective de l'intervalle I dans l'ensemble \mathbf{R} . On définirait de même les notions de fonction *décroissante* ou *strictement décroissante* dans I .

Si la fonction f est croissante dans I ou bien si elle est décroissante, on dit qu'elle est *monotone* dans I . Si elle est strictement croissante ou bien strictement décroissante dans I , on dit qu'elle est *strictement monotone* dans I . Une application strictement monotone de I dans \mathbf{R} est injective mais la réciproque n'est pas vraie sans autre hypothèse.

Théorème (d'Inversion)

Soit f une fonction à valeurs réelles définie et continue sur un intervalle $I \subset \mathbf{R}$. Pour que la fonction f de I dans l'intervalle $f(I) = J$ soit injective [et donc bijective (*)], il faut et il suffit que f soit strictement monotone. La fonction réciproque $f^{-1}: J \rightarrow I$ est alors continue et strictement monotone dans l'intervalle J .

(*) Le fait que J soit un intervalle n'est autre que le théorème des valeurs intermédiaires. Il est clair que, comme fonction de I dans J , f est

toujours surjective. Dire qu'elle est injective revient donc à dire qu'elle est bijective et donc possède une réciproque.

Les figures 2.7a et 2.7b illustrent la bijection et la nécessité du caractère monotone ...

Figure 2.7 - (a) bijection et (b) condition de monotonie pour

Définition et étude des exposants fractionnaires

Ce paragraphe est une application du Théorème d'Inversion à la définition et à l'étude des exposants fractionnaires.

- (i) Fonction x^n ($n \in \mathbf{Z}$, c'est-à-dire $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$)

Rappelons que si n est un entier strictement positif, on pose $x^n = x \cdot x \cdot \dots \cdot x$ (n facteurs) pour tout nombre réel x . Pour $x \neq 0$, on étend la définition de x^n au cas où n est un entier de signe quelconque en posant $x^0 = 1$ et, si $n \leq -1$, $x^n = 1/(x^{-n})$. Ces définitions sont justifiées par le fait qu'elles permettent d'établir les règles de calcul suivantes :

$$\begin{aligned}(xy)^n &= x^n y^n \\ x^{p+q} &= x^p x^q \\ (x^p)^q &= x^{pq}\end{aligned}\tag{2.5}$$

Ces règles sont valables quels que soient n, p, q et pourvu que x et y soient non nuls. On se propose maintenant de définir, de manière que les formules (2.5) soient encore valables, les puissances

rationnelles (non entières) d'un nombre x . On ne peut y parvenir que pour x réel strictement positif.

(ii) Fonction $x^{1/n}$ ($x > 0$, n entier non nul):

On montre que, pour tout entier $n \neq 0$, la fonction x^n est une fonction continue, strictement monotone de l'intervalle $]0, +\infty[$ sur lui-même (c'est-à-dire l'image de l'intervalle $]0, +\infty[$ par la fonction $x \rightarrow x^n$ est l'intervalle $]0, +\infty[$ lui-même). On peut donc considérer la fonction réciproque qui est également une bijection de l'intervalle $]0, +\infty[$ sur lui-même et est continue et strictement monotone en vertu du Théorème d'Inversion. La valeur en un point $x > 0$ de cette fonction réciproque est le nombre y tel que l'on ait $y > 0$ et $x = y^n$ (ce nombre existe et est unique). Dans tous les cas, on écrit $y = x^{1/n}$. Si n est positif, y est la racine nième de x (dont l'existence est ainsi «démontrée» rigoureusement) et $x^{1/n} = \sqrt[n]{x}$, si $n > 0$. Si l'on a $n \geq 1$, la fonction y^n est strictement croissante. Il en est de même de la fonction réciproque $x^{1/n}$. Par contre, la fonction $x^{1/n}$ est strictement décroissante pour $n < 0$.

(iii) Fonction x^α ($x > 0$, $\alpha = p/q$, $\alpha \in \mathbf{Q}$ et $p, q \in \mathbf{Z}$ avec $q \neq 0$)

Définissons x^α en posant $x^\alpha = (x^p)^{1/q}$. Cependant, il existe une infinité de façons d'écrire α sous la forme p/q et l'on doit d'abord s'assurer du fait que l'expression $(x^p)^{1/q}$, pour α donné, est indépendante du choix de p et q . Il faut donc d'abord «établir» le résultat suivant. Soient a, b, c, d des entiers tels que $b \neq 0$, $d \neq 0$ et $a/b = c/d$, alors on a $(x^a)^{1/b} = (x^{1/b})^a = (x^c)^{1/d} = (x^{1/d})^c$. Ce résultat permet de poser : $x^\alpha = (x^p)^{1/q} = (x^{1/q})^p$ si $\alpha = p/q$, $q \neq 0$ et $x > 0$. La fonction x^α est continue et strictement croissante pour $\alpha > 0$. La fonction x^α est continue et strictement décroissante pour $\alpha < 0$. Dans les deux cas, c'est-à-dire pour tout $\alpha > 0$, la fonction x^α est une fonction bijective de l'intervalle $]0, +\infty[$ dans l'intervalle $]0, +\infty[$.

Montrons que les formules (2.5) s'étendent aux exposants fractionnaires de signe quelconque : $(xy)^\alpha = x^\alpha y^\alpha$ pour $x > 0$, $y > 0$, $\alpha \in \mathbf{Q}$. De plus, $x^\alpha x^\beta = x^{\alpha+\beta}$, pour $x > 0$, $\alpha \in \mathbf{Q}$, $\beta \in \mathbf{Q}$. Cette relation montre en

particulier que l'on a toujours : $x^{-\alpha} = 1/(x^\alpha)$. Enfin $(x^\alpha)^\beta = x^{\alpha\beta}$ pour $x > 0$, $\alpha \in \mathbf{Q}$, $\beta \in \mathbf{Q}$. Il résulte évidemment de cette formule que $(x^\alpha)^{1/\alpha} = 1$ pour $x > 0$, $\alpha \in \mathbf{Q}$, $\alpha \neq 0$. En d'autres termes, les fonctions $x \rightarrow x^\alpha$ et $x \rightarrow x^{1/\alpha}$ de l'intervalle $]0, +\infty[$ sur lui-même sont réciproques l'une de l'autre, résultat qui généralise le fait que la fonction réciproque de x^n est $x^{1/n}$.

Finalement, nous étudions les valeurs limites de x^α . Lorsque x tend vers l'une ou l'autre des extrémités de l'intervalle $]0, +\infty[$, le comportement de la fonction x^α est donné par les formules suivantes :

$$\lim_{x \rightarrow 0, x > 0} x^\alpha = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha > 0 \\ +\infty & \text{si } \alpha < 0 \end{cases} \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} x^\alpha = \begin{cases} +\infty & \text{si } \alpha > 0 \\ 0 & \text{si } \alpha < 0 \end{cases}$$

2.3. EXERCICES

2.1 V

Fonctions utiles (I)

Dans ce chapitre les fonctions algébriques.

3.1. FONCTION LINEAIRE AFFINE

La relation fonctionnelle la plus simple entre deux variables est la proportionnalité directe, elle se rencontre dans de nombreuses lois des sciences, en général, et de la chimie, en particulier.

3.1.1. Définition et propriétés

On dit que la variable y est proportionnelle à x si le quotient $y/x = a$ est une constante indépendante de x et y .

Parmi les nombreux exemples en chimie de lois de proportionnalité directe, on trouve :

- La troisième loi de Raoult (chimiste français, 1830-1901) exprime le fait que l'abaissement du point de congélation, ΔT_f d'une solution idéale est directement proportionnel à la molalité m (concentration du soluté par kg de solvant), la constante cryoscopique K_f étant la constante de proportionnalité : $\Delta T_f = K_f \cdot m$
- La vitesse v de nombreuses réactions chimiques est caractérisée par une diminution de la concentration en réactifs proportionnelle à leur concentration instantanée. Ainsi ...
- A 298.15 K, la conductibilité

La relation de proportionnalité directe est un cas particulier de l'équation $y = ax + b$ du premier degré en x et y . Rappelons quelques propriétés souvent très utiles.

Si φ est l'angle que fait la droite $y = ax$ avec l'axe des x (angle compté positivement de Ox vers Oy comme illustré dans la figure 3.1), alors $\operatorname{tg}\varphi = AM/OA = y/x = a$. La constante $a = \operatorname{tg}\varphi$ est appelé le *coefficient angulaire* (ou le coefficient directeur) de la droite. On dit aussi que le coefficient a est la *pente* ou le *gradient* de la droite $y = ax$.

Figure 3.1 -xxxxxxxxxxxx

Le coefficient angulaire est le rapport de la différence des ordonnées de deux points du graphique à la différence de leurs abscisses :

$$a = \frac{\text{ord. } M_2 - \text{ord. } M_1}{\text{absc. } M_2 - \text{absc. } M_1} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad (3.1)$$

Ce rapport est constant, c'est une propriété caractéristique de la fonction linéaire $y = ax$ ou, géométriquement parlant, de la droite.

Deux droites parallèles ont la même pente. La droite $y = ax + b$ est parallèle à la droite $y = ax$. Le terme b qui intervient dans l'équation $y = ax + b$ est l'ordonnée du point B où l'équation coupe l'axe des y (valeur prise par y lorsque x s'annule). On l'appelle l'*ordonnée à l'origine*, OB sur la figure 3.2.

Figure 3.2 -xxxxxxxxxxxx

Définition

La fonction $y = ax + b$ est appelée *fonction linéaire-affine* (un mot d'explication sur le terme affine).

Remarquons qu'en général y et x ne sont pas proportionnels, ils ne le sont que si $b = 0$. Comme on le remarque sur le graphique de la figure 2.3, lorsque la pente $a = \Delta y / \Delta x$ d'une droite est positive ($a > 0$), la fonction linéaire - comme la fonction linéaire-affine $y = ax + b$ - est *monotone croissante* : $x_1 < x_2 \Rightarrow f(x_1) < f(x_2)$. Si $a < 0$, la fonction est monotone décroissante : $x_1 < x_2 \Rightarrow f(x_1) > f(x_2)$. Dans l'un et l'autre cas, la croissance ou la décroissance se fait à un *taux d'accroissement* constant indiqué par le gradient a .

Toute droite est représentée par une équation du premier degré en x et y . Réciproquement, toute équation du premier degré $Ax + By + C = 0$ en x et y représente une droite (Ex. 3.1).

3.1.2. Anamorphose linéaire

L'intérêt majeur de la fonction linéaire-affine réside dans la possibilité de ramener, grâce à une transformation appropriée, la plupart des autres fonctions non linéaires sous la forme d'une fonction linéaire affine. Comme il suffit de connaître deux points d'une droite pour pouvoir la tracer (Ex. 3.3), on conçoit combien cette transformation dite *anamorphose linéaire* peut faciliter l'étude des fonctions plus complexes, comme nous allons le voir sur quelques exemples.

Loi des gaz parfaits

Supposons que nous devons déterminer si la pression P d'un gaz dépend ou non du volume V à température constante d'après la loi $P = K / V$. Pour quelques valeurs du volume V on détermine les valeurs correspondantes de la pression P et on représente graphiquement les résultats dans un système cartésien de coordonnées V, P . Si la loi est valable, les points figuratifs se trouveront sur une hyperbole. Il est cependant souvent difficile de discerner si les points se distribuent effectivement sur un arc d'hyperbole plutôt que sur une autre courbe (cf. ex. 1.x). En revanche, si nous écrivons la relation

sous la forme $P = K \cdot (1/V)$, nous constatons que P dépend linéairement de $1/V$. Si, sur l'axe horizontal de coordonnées nous portons la grandeur $(1/V)$ au lieu de V , les points de mesure doivent, à cause de la linéarité, se répartir sur une droite. Il est facile de déterminer si certains points appartiennent ou non à une droite.

Ce procédé permet de trouver facilement la valeur inconnue de la constante K qui est ici le coefficient directeur de la droite.

Ordre d'une réaction chimique

Supposons que nous devons déterminer si la pression P d'un gaz dépend

Energie d'activation

Supposons que nous devons déterminer si la pression P d'un gaz dépend

3.2. LOI DE PROPORTIONNALITE INVERSE

La .

3.2.1. Définition et propriétés

Définition.

La relation fonctionnelle $P = K/V$ ($a \neq 0$) exprime la *loi de proportionnalité inverse* entre les variables x et y .

A 298.15 K, le produit ionique de l'eau K_e est égal à 10^{-14} .

$$K_e = a_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot a_{\text{OH}^-} \equiv [\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{OH}^-] \quad (3.2)$$

Dans cette expression le produit des activités $a_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot a_{\text{OH}^-}$ et celui des concentrations $[\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{OH}^-]$ sont implicitement rapportées aux activités de H_3O^+ et OH^- dans l'état standard qui par définition sont égales à l'unité, $a_{\text{H}_3\text{O}^+}^0 = a_{\text{OH}^-}^0 \equiv 1$. Il suit que $[\text{H}_3\text{O}^+]$ et $[\text{OH}^-]$ soient des nombres sans dimension de même valeur numérique que les concentrations exprimées en mol.l^{-1} . On remarque que ce produit ionique de l'eau correspond à une loi de proportionnalité inverse :

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{10^{-14}}{[\text{OH}^-]}. \quad (3.3)$$

Pour un certain accroissement de x , $y = a/x$ diminue dans un rapport correspondant. Pour $a > 0$, x et y sont de mêmes signes et la courbe représentative se situe dans le premier et le troisième quadrants (cf. fig. 3.3a). Pour $a < 0$ cette courbe représentative se trouve dans le deuxième et le quatrième quadrants (cf. fig. 3.3b)

Figure 3.3 -xxxxxxxxxxxx

Pour les petites (grandes) valeurs de x , la fonction a/x est grande (petite) en valeur absolue. La fonction n'est pas définie en $x = 0$. La fonction $y = a/x$, appelée *hyperbole équilatère*, possède des branches se poursuivant à l'infini : elles se rapprochent des axes de coordonnées Ox et Oy pour un accroissement infini de l'abscisse x ou de l'ordonnée y d'un point suivant la branche considérée. Ces droites s'appellent *asymptotes de l'hyperbole*.

Si on change le signe de x , sans modifier sa valeur absolue, seul le signe de la variable dépendante change, la fonction est donc *impaire* : $y(-x) = -y(x)$. Ceci explique que la courbe représentative soit *symétrique par rapport à l'origine*. La fonction $y = a/x$ n'est pas continue, elle possède au point $x = 0$ un point de discontinuité, en dehors de ce point $x = 0$ elle est continue partout. Notons que si l'on a $y = a/x$, on aura $x = a/y$: la fonction se confond avec sa «réciproque». Il en résulte que la courbe admet la première bissectrice $y = x$ comme axe de symétrie.

A partir de $y = a/x$, on obtient l'équation

$$\ln y = \ln a - \ln x; \quad a, x > 0 \quad (3.4)$$

pour a et x positifs. De plus amples précisions sur les propriétés de la fonction logarithme sont données dans le chapitre XYZ.

Si, sans changer les unités sur les axes de coordonnées, on déplace parallèlement les axes du système de manière que l'origine O coïncide avec le point Ω admettant a et -1 comme coordonnées ($a > 0$), alors l'équation $y = -a/x$ devient $y' - 1 = -a/(a - x')$ ou encore :

$$y' = \frac{x'}{x' + a}. \quad (3.5)$$

La forme de l'hyperbole n'est pas modifiée par une translation parallèle aux axes du système de coordonnées (cf. fig. 3.4), nous pouvons donc affirmer

Figure 3.4 -xxxxxxxxxxxx

que la courbe représentative de (1.x) est aussi une hyperbole équilatère. Autrement dit, si x' et y' sont les coordonnées par rapport aux nouveaux axes $\Omega x'$ et $\Omega y'$, alors l'équation de l'hyperbole équilatère par rapport aux nouveaux axes de coordonnées est (1.x). Dans ce système d'axes $\Omega x'$, $\Omega y'$, l'hyperbole équilatère passe par l'origine Ω des coordonnées et elle admet pour asymptotes l'horizontale d'ordonnée $+1$ (c'est-à-dire la valeur vers laquelle tend $x'/(x' + a)$ lorsque x' croît indéfiniment et la verticale d'abscisse $-a$ (obtenue par annulation du dénominateur).

C'est souvent sous cette forme que l'on rencontre l'hyperbole dans ses applications chimiques et biologiques (isotherme d'adsorption de Langmuir, équation de Michaelis et Menten, etc.).

Isotherme d'adsorption de Langmuir

Au contraire de ce qui se passe dans les couches profondes d'un solide où les particules du réseau sont soumises à des forces qui s'équilibrent, au voisinage de la surface les particules sont soumises à des forces dissymétriques qui se traduisent par un champ de force attractif. Ce champ dont la portée est limitée à des distances de l'ordre de grandeur des dimensions des atomes sont cependant suffisantes pour attirer les molécules d'un gaz en contact avec l'interface et donner lieu au phénomène d'*adsorption*, l'élimination de ces molécules adsorbées s'appelle la *désorption*.

Langmuir (....., 19xx-19xx) a postulé que les molécules s'adsorbent à la surface d'un solide jusqu'à la formation d'une monocouche. Le taux de recouvrement θ d'une surface S sous une pression P est défini par,

$$\theta = \frac{\text{surface couverte}}{\text{surface totale}} = \frac{m}{m_0} = \frac{V}{V_0}, \quad (3.6)$$

où m (V) est la masse (le volume) du gaz adsorbé à la pression P et m_0 (V_0) la masse (le volume) correspondant à une monocouche du gaz sur la surface. Chaque état stationnaire est en équilibre dynamique entre la vitesse d'adsorption et celle de désorption. La vitesse d'adsorption v_a est proportionnelle au nombre de molécules frappant la surface donc à P et à la surface disponible S . On a donc $v_a = k_a \cdot (1 - \theta) \cdot P$ où k_a est la constante de vitesse d'adsorption. La vitesse de désorption v_d est proportionnelle au nombre de molécule adsorbées donc à l'étendue de la surface recouverte, $v_d = k_d \cdot \theta$ où k_d est la constante de vitesse de désorption. A l'équilibre, on a $v_a = v_d$ et $k_a \cdot (1 - \theta) \cdot P = k_d \cdot \theta$ ce qui entraîne, après avoir posé $\lambda = k_a/k_d$,

$$\theta = \frac{\lambda P}{1 + \lambda P}, \quad (3.7)$$

ou, en utilisant la définition de θ (3.7),

$$m = m_0 \frac{\lambda P}{1 + \lambda P}, \quad (3.8)$$

cette dernière expression est connue sous le nom d'*isotherme d'adsorption de Langmuir* et est représentée sur la figure 3.5. Notez qu'aux faibles pressions $\lambda P \ll 1$ et $m \approx m_0 \cdot \lambda P$.

3.3. QUELQUES LIEUX GEOMETRIQUES

Blabla.

Définition.

On appelle *lieu géométrique* la figure formée par l'ensemble des points qui jouissent d'une propriété commune.

3.3.1. Le Cercle

Le lieu géométrique des points situés à la même distance d'un point fixe est un cercle ayant ce point fixe comme centre (cf. fig. 3.5). L'équation,

$$(x - a)^2 + (y - b)^2 = R^2, \quad (3.9)$$

représente le *cercle* de centre (a, b) et de rayon R . L'équation du cercle est du second degré en x et y : $x^2 + y^2 - 2ax - 2by + a^2 + b^2 - R^2 = 0$. Il est utile de remarquer que les coefficients de x^2 et y^2 sont égaux et qu'il n'y a pas de terme en xy . Réciproquement, toute équation du second degré dans laquelle les coefficients de x^2 et de y^2 sont égaux et dans laquelle le terme en xy est absent représente un cercle.

Figure 3.5 -xxxxxxxxxxxx

3.3.2. L'Ellipse

L'ellipse est une courbe telle que la somme des distances de chacun de ses points à deux points fixes est constante (cf. fig. 3.6).

Figure 3.6 -xxxxxxxxxxxx

Appelons $2a$ la somme constante des distances d'un point variable M de l'ellipse aux deux points fixes F et F' (les foyers de l'ellipse). L'axe des x coïncide avec la ligne des foyers, l'origine avec le milieu de FF' et $2c$ est la distance FF' des foyers ($a > 0$, $c > 0$ et $a > c$). Soit $M(x, y)$ un point sur l'ellipse, il suit de la définition que $MF + MF' = 2a$ ou $\sqrt{(x-c)^2 + y^2} + \sqrt{(x+c)^2 + y^2} = 2a$ qui représente l'équation de l'ellipse. On fait disparaître les radicaux pour obtenir une expression plus habituelle

$$(a^2 - c^2)x^2 + a^2y^2 = a^2(a^2 - c^2), \quad (3.10a)$$

qui est l'équation de l'ellipse, elle est du second degré. La forme sous laquelle l'ellipse est la plus connue est obtenue en se rappelant que $2a > 2c$ et dès lors on pose $a^2 - c^2 = b^2$, ce qui donne :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (3.10b)$$

Dans cette représentation a est appelé le *demi-grand axe* de l'ellipse et b le *demi-petit axe*. L'axe de symétrie $x'Ox$ est l'*axe focal*, l'axe de symétrie $y'Oy$ est l'*axe non focal* et le point O le *centre de symétrie* de l'ellipse.

L'ellipse représentée par l'équation (3.10b) l'est aussi par les équations,

$$\begin{cases} x = a \cos \varphi \\ y = b \sin \varphi \end{cases} \quad (3.11)$$

dans lesquelles on fait varier φ de 0 à 2π . Les équations (3.11) font correspondre à chaque valeur de φ une valeur de x et une valeur de y et par suite une position du point M . Dans ces équations, y n'est pas donné en fonction de x mais x et y sont donnés en fonction d'une même variable φ . De telles équations sont appelées les *équations paramétriques* de la courbe; la variable φ est appelée la *paramètre variable*.

3.3.3. L'Hyperbole

L'hyperbole est une courbe telle que la différence des distances de chacun de ses points à deux points fixes est constante (cf. fig. 3.7).

Figure 3.7 -xxxxxxxxxxxx

Appelons $2a$ la différence constante des distances d'un point variable M de l'hyperbole aux deux points fixes F et F' (les foyers de l'hyperbole). L'axe des x coïncide avec la ligne des foyers, l'origine avec le milieu de FF' et $2c$ est la distance FF' des foyers ($a > 0$, $c > 0$ et $a > c$). Soit $M(x, y)$ un point sur l'hyperbole, il suit de la définition que $MF - MF' = 2a$ ou $\sqrt{(x-c)^2 + y^2} - \sqrt{(x+c)^2 + y^2} = 2a$ qui représente l'équation de

l'hyperbole. Comme ci-dessus, on fait disparaître les radicaux pour obtenir une expression plus habituelle

$$(a^2 - c^2)x^2 + a^2y^2 = a^2(a^2 - c^2), \quad (3.12a)$$

qui est l'équation de l'hyperbole, elle est du second degré. La forme sous laquelle l'ellipse est la plus connue est obtenue en se rappelant que $2a < 2c$ et dès lors on pose $c^2 - a^2 = b^2$, ce qui donne :

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (3.12b)$$

L'axe de symétrie $x'Ox$ est l'axe focal ou axe transverse, l'axe de symétrie $y'Oy$ est l'axe non focal ou axe non transverse et le point O le centre de symétrie de l'hyperbole. L'hyperbole possède deux asymptotes d'équations $y = (b/a) \cdot x$ et $y = -(b/a) \cdot x$.

3.3.4. La Parabole

Tout point M de la parabole est, par définition, équidistant d'un point fixe F appelé foyer et d'une droite Δ appelée directrice de la parabole ($F \notin \Delta$) (cf. fig. 3.8).

Figure 3.8 -xxxxxxxxxxxx

Choisissons l'axe des y comme directrice Δ , l'axe des x est la perpendiculaire FO abaissée du foyer F sur la directrice Δ , c ($c \neq 0$) est la distance OF du foyer à la directrice Δ et P est projection du point M sur la directrice. L'équation cherchée sera $(PM)^2 = (FM)^2$ ou $x^2 = (x - c)^2 + y^2$, ce qui donne l'équation de la parabole ($c \neq 0$) :

$$y^2 = 2cx - c^2, \quad (3.13)$$

Toute parabole admet comme axe de symétrie la perpendiculaire à la directrice passant par le foyer.

Si l'on prend comme axe des ordonnées la parallèle à Δ passant par le milieu de OF (cf. fig. 3.9) , on obtient une équation de la parabole plus simple : $y' = 2cx'$.

Figure 3.9 -xxxxxxxxxxxxx

$2a$ la différence constante des distances d'un point variable M de l'hyperbole aux deux points fixes F et F' (les foyers de l'hyperbole). L'axe des x coïncide avec la ligne des foyers, l'origine avec le milieu de FF' et $2c$ est la distance FF' des foyers ($a > 0$, $c > 0$ et $a > c$). Soit $M(x,y)$ un point sur l'hyperbole, il suit de la définition que $MF - MF' = 2a$ ou $\sqrt{(x+c)^2 + y^2} - \sqrt{(x-c)^2 + y^2} = 2a$ qui représente l'équation de l'hyperbole. Comme ci-dessus, on fait disparaître les radicaux pour obtenir une expression plus habituelle

$$(a^2 - c^2)x^2 + a^2y^2 = a^2(a^2 - c^2), \quad (3.14a)$$

qui est l'équation de l'hyperbole, elle est du second degré. La forme sous laquelle l'ellipse est la plus connue est obtenue en se rappelant que $2a < 2c$ et dès lors on pose $c^2 - a^2 = b^2$, ce qui donne :

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (3.14b)$$

L'axe de symétrie $x'Ox$ est l'axe *focal* ou *axe transverse*, l'axe de symétrie $y'Oy$ est l'axe *non focal* ou *axe non transverse* et le point O le *centre de symétrie* de l'hyperbole. L'hyperbole possède deux asymptotes d'équations $y = (b/a) \cdot x$ et $y = -(b/a) \cdot x$.

3.5. EXERCICES

- 3.1** Vérifier que : (a) $y = cte$ est une droite parallèle à l'axe des x ,
 (b) $x = cte$ est une droite parallèle à l'axe des y ,
 (c) $y = ax$ est une droite l'origine du système d'axes.
- 3.2** En partant de l'équation générale du premier degré $Ax + By + C = 0$, et en posant successivement (a) $A = 0$, (b) $B = 0$, (c) $A \neq 0$ et $B \neq 0$, montrer que l'équation résultante sera celle d'une droite
 (a) parallèle à l'axe des x ,
 (b) parallèle à l'axe des y
 et (c) d'une fonction linéaire-affine de coefficient directeur $a = -A/B$ et d'ordonnée à l'origine égale à $-C/B$.
- 3.3** Trouver les coordonnées du point d'intersection de deux droites données.
- 3.4** Trouver les coordonnées des points d'intersection d'une droite avec les axes.
- 3.5** Ecrire l'équation d'une droite lorsqu'on connaît les segments qu'elle intercepte sur les axes.
- 3.6** Trouver l'équation générale des droites qui passent par un point donné (x_0, y_0) .
- 3.7** Trouver l'équation de la droite qui passe par deux points donnés (x_0, y_0) et (x_1, y_1) .

- 3.8** Calculer l'angle que font entre elles deux droites données. Exprimer en termes des coefficients directeurs des deux droites la condition pour quelles soient (a) parallèles,
(b) perpendiculaires.
- 3.9** Trouver l'équation générale des droites parallèles à une droite donnée $y = ax + b$.
- 3.10** Trouver l'équation d'une droite qui passe par un point donné (x_0, y_0) et qui est parallèle à une droite donnée $y = ax + b$.
- 3.11** Trouver l'équation de la perpendiculaire abaissée du point (x_0, y_0) sur la droite $y = ax + b$.
- 3.12** Obtenez une expression logarithmique semblable à celle de l'équation (3.4) pour $y = -\frac{a}{x} + b$ avec $a > 0$.
- 3.13** En utilisant $\theta = \frac{V}{V_0}$, transformer $\theta = \frac{\lambda P}{1 + \lambda P}$, (Eq. 3.7), en une relation linéaire-affine $y = ax + b$ où $y = P/V$, $x = P$.
- 3.14** En biochimie on rencontre l'équation de Michaelis-Menten qui régit, en présence d'une enzyme E, la vitesse v de formation d'un produit P en fonction de $[P]$, la concentration de substrat S ,

$$v = v_0 \cdot \frac{[S]}{[S] + K_M}$$

où K_M est la constante de Michaelis et v_0 une quantité qui dépend des constantes de vitesse et de la concentration $[E]_0$ de l'enzyme dans le milieu réactionnel.

- (a) Représenter graphiquement l'évolution de v en fonction de $[S]$.
- (b) Pour quelle valeur d'abscisse v vaut-il v_0 ?
- (c) Transformer l'équation de Michaelis-Menten en une relation linéaire-affine $y = ax + b$ où $y = 1/v$ et $x = 1/[S]$ (droite de Lineweaver et Burk).

4

Dérivée

Dans ce chapitre les fonctions algébriques.

4.1. INTRODUCTION

En prenant des exemples simples de fonctions telles que $y = x^2$, $y = x^3$ on voit que leurs courbes s'écartent de plus en plus rapidement de l'axe Ox à mesure que x s'éloigne de la valeur zéro. Une question importante est savoir traduire numériquement, pour chaque valeur de x , cette rapidité de variation de la fonction.

Soit f une fonction définie dans un intervalle $I \subset \mathbf{R}$. Dans de nombreuses situations, il est nécessaire de calculer le rapport

$$q(x) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}, \quad x \in I \quad x \neq x_0$$

et d'envisager la limite en x_0 de la fonction q . Supposons que cette limite existe et, pour $x \in I$, désignons-la par $f'(x_0)$:

$$f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0, x \neq x_0} q(x),$$

alors

$$\lim_{x \rightarrow x_0} q(x) - f'(x_0) = 0$$

ou encore

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0) - f'(x_0) \cdot (x - x_0)}{x - x_0} = 0.$$

En posant

$$\varepsilon(x) = \frac{f(x) - f(x_0) - f'(x_0) \cdot (x - x_0)}{x - x_0}$$

et $\varepsilon(x_0) = 0$, on a $\lim_{x \rightarrow x_0} \varepsilon(x) = 0$, la fonction ε étant continue en x_0 et

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \varepsilon(x) \cdot (x - x_0)$$

pour tout x de l'intervalle I (Condition 1).

Réciproquement, supposons qu'il existe un nombre réel $f'(x_0)$ et une fonction ε vérifiant la condition 1 ci-dessus, alors pour tout $x \in I$,

$$\varepsilon(x) = \frac{f(x) - f(x_0) - f'(x_0) \cdot (x - x_0)}{x - x_0}$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \varepsilon(x) = 0$$

donc la fonction

$$x \mapsto \frac{f(x) - f(x_0) - f'(x_0) \cdot (x - x_0)}{x - x_0}$$

a pour limite $f'(x_0)$ lorsque x tend x_0 en restant dans l'intervalle I avec $x \neq x_0$ et dès lors on arrive au résultat suivant :

Théorème 4.1

Soit une fonction f définie sur un intervalle I et x_0 un point de I . Les deux propositions suivantes sont équivalentes :

(i) La fonction

$$q : x \mapsto \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

a une limite en x_0 ;

(ii) Il existe un nombre réel $f'(x_0)$ et une fonction ε tels que :

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \varepsilon(x) = 0$$

et

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \varepsilon(x) \cdot (x - x_0)$$

De plus,

$$\lim_{x \rightarrow x_0} q(x) = f'(x_0).$$

Si f vérifie l'une des conditions (i) et (ii) du théorème 4.1, f est dite *dérivable* en x_0 et $f'(x_0)$ est la *dérivée* de f en x_0 . La fonction linéaire-affine $x \mapsto f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$ de f en x_0 . Notons qu'il résulte de la définition qu'une fonction dérivable en x_0 est définie sur un intervalle $]a, x_0]$, ou $[x_0, b[$, ou $]a, b[$, avec $x_0 \in]a, b[\dots$

Remarques

- (i) Si la dérivée de f en x_0 existe, elle est unique en vertu de l'unicité de la limite et de ??????????
- (ii) Si l'on pose $x = x_0 + h$, on est donc amené à considérer la limite du rapport

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

quand $h \rightarrow 0$. Si $f'(x_0)$ est la dérivée de f en x_0 , pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un nombre $\delta > 0$ tel que les conditions $0 < |h| < \delta$ et $x_0 + h$ dans I impliquent

$$\left| \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| \leq \varepsilon$$

ce qui est la définition d'une limite.

- (iii) La dérivée de $y = f(x)$ pour $x = x_0$ est la limite vers laquelle tend le rapport de l'accroissement de la fonction, Δy , à l'accroissement de la variable Δx lorsque ce dernier tend vers zéro :

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = f'(x_0).$$

- (iv) Une dérivée se présente soit par la notation de Jacobi-Lagrange : y' , $f'(x_0)$, ..., soit par la notation de Leibniz : dy/dx . A ce stade dy/dx doit être considéré comme un symbole formant un bloc. Nous verrons ultérieurement que c'est un véritable quotient.

Exemple

La fonction $f: x \mapsto x^2$ est-elle dérivable en $x_0 \in \mathbf{R}$? La réponse comporte deux phases :

- (a) calculer les rapports

$$q(x) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad \text{ou} \quad p(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

- (b) chercher si la fonction q a une limite en x_0 (ou la fonction p en 0).

Dans le cas présent, on a

$$p(h) = \frac{(x_0 + h)^2 - x_0^2}{h} = \frac{2x_0h + h^2}{h} = 2x_0 + h$$

et

$$\lim_{h \rightarrow 0} p(h) = 2x_0$$

f est donc dérivable en x_0 , la dérivée de f en x_0 est $2x_0$. Le développement limité d'ordre 1 de f en x_0 est la fonction $x \mapsto x_0^2 + 2x_0(x - x_0)$. La représentation graphique de f et de la fonction $x \mapsto x_0^2 + 2x_0(x - x_0)$ pour $x_0 = 1$ et $x_0 = 2$ est donnée à la figure 4.1

Figure 4.1 -.....

Exemple

L'égalité $f(x) = 1 + x + x \cdot \sqrt{|x|}$ peut s'écrire

$$f(x) = f(0) + 1 \cdot (x - 0) + \varepsilon(x) \cdot (x - 0)$$

avec $\varepsilon(x) = \sqrt{|x|}$. Comme $\lim_{x \rightarrow 0} \varepsilon(x) = 0$ et $f'(0) = 1$, f est dérivable en 0 et $x \mapsto 1 + x$ est son développement limité d'ordre 1 en 0.

4.1.1. Interprétation géométrique : tangente

Considérons une fonction $f: I \rightarrow \mathbf{R}$ dérivable en $x_0 \in I$, C sa courbe représentative et M_0 le point de C d'abscisse x_0 . La droite M_0M passant par $M(x_0 + h, f(x_0 + h))$ a pour coefficient directeur :

$$p(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Ce coefficient directeur a pour limite, quand h tend vers 0, la dérivée $f'(x_0)$ de f en x_0 . La droite de coefficient directeur $f'(x_0)$, passant par M_0 qui représente le position limite de la sécante M_0M , est appelée tangente à C en M_0 (cf. fig. 4.2).

Figure 4.2 -xxxxxxxxxxxxx

La tangente en M_0 à C a pour coefficient directeur $f'(x_0)$, son équation est donc :

$$y = f'(x_0) \cdot x + b$$

Elle passe par $M_0 = (x_0, f(x_0))$ et $f(x_0) = f'(x_0) \cdot x_0 + b$ avec $b = f(x_0) - f'(x_0) \cdot x_0$. L'équation est :

$$y = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

La tangente à C en $M_0 = (x_0, f(x_0))$ est la représentation graphique du développement limité d'ordre 1 de f en x_0 . L'existence de la dérivée est *équivalente* à l'existence de la tangente.

4.1.2. Valeurs approchées d'une fonction

Si une fonction admet en x_0 un développement limité d'ordre 1,

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \varepsilon(x) \cdot (x - x_0)$$

avec $\lim_{x \rightarrow x_0} \varepsilon(x) = 0$, alors

$$f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

est une valeur approchée de $f(x)$ avec une erreur égale à $|\varepsilon(x) \cdot (x - x_0)|$ (cf.

fig. 4.3)

Figure 4.3 -xxxxxxxxxxxx

Exemple

Soit

$$\begin{aligned} f(x) &= (1+x)^3 \\ &= 1+3x+(3x+x^2)\cdot x \\ &= f(0)+3\cdot(x-0)+\varepsilon(x)\cdot(x-0) \end{aligned}$$

La dérivée de f en 0 est $f'(0)=3$ avec $\varepsilon(x)=3x+x^2$ et $\lim_{x \rightarrow x_0} \varepsilon(x)=0$.

Pour $x=0.02$, $f(0.02)=(1+0.02)^3$ a pour valeur approchée $1+3\cdot 0.02=1.06$, l'erreur valant $0.02\cdot(3\cdot 0.02+(0.02)^2)=0.001208$.

4.2. VITESSE DE REACTION

Considérons une réaction du type $A \rightarrow B+C$ effectuée à volume constant. Pour suivre l'évolution de cette réaction on peut

- soit mesurer la quantité de produit B ou C qui apparaît en fonction du temps;
- soit mesurer la quantité de réactif A qui subsiste en fonction du temps.

A la figure 4.4 sont représentées les variations des concentrations molaires $[B]$ et $[A]$ en fonction du temps (à volume constant).

Figure 4.4 -xxxxxxxxxxxx

Définissons la vitesse de la réaction soit par la vitesse de formation de B , soit par la vitesse de disparition de A . Elle est exprimée à partir de la variation de la concentration molaire de B ou de A par unité de temps. On peut alors la déterminer graphiquement suivant deux méthodes auxquelles correspondent deux définitions quantitatives de la vitesse : la vitesse moyenne et la vitesse instantanée.

4.2.1. Vitesse moyenne

Soient $[B_1]$ et $[B_2]$ les concentrations molaires de B aux instants t_1 et t_2 .

Définition

La vitesse moyenne \bar{v}_B de formation de B entre les deux instants t_1 et t_2 est :

$$\bar{v}_B = \frac{[B_2] - [B_1]}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t}.$$

L'interprétation graphique est immédiate : \bar{v}_B est égal à la valeur de la pente de la droite joignant les points M_1 et M_2 représentés à la figure 4.5.

Figure 4.5 - xxxxxxxxxxxxxxxxxxxx

4.2.2. Vitesse instantanée

Pour $[B_1]$ et $[B_2]$ les concentrations molaires de B aux instants t_1 et t_2 , on a

Définition

La vitesse instantanée v_B de formation de B à l'instant (de date) t_1 est la limite lorsque t_2 tend vers t_1 du quotient définissant la vitesse moyenne entre t_1 et t_2 :

$$v_B(t_1) = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{[B_2] - [B_1]}{t_2 - t_1} = \left. \frac{d[B]}{dt} \right|_{t = t_1}$$

Comme on le constate dans l'encadré ci-dessus, cette limite n'est autre que la valeur, au temps t_1 , de la dérivée de la fonction $x \mapsto [B]$. L'interprétation graphique découle de la définition : la vitesse instantanée de formation de B à un instant t_1 est égale au coefficient directeur de la tangente à la courbe expérimentale $[B] = f(t)$ au point d'abscisse t_1 comme indiqué sur la figure 4.6.

Figure 4.6 - xxxxxxxxxxxxxxxxxxxx

4.3. PROPRIETES DES DERIVEES

Blabla

4.3.1. Propriétés élémentaires

- (i) Toute fonction f dérivable en un point est continue en ce point. En effet, si le rapport

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

tend vers une limite quand h tend vers 0, ce rapport reste borné et il existe donc une constante $K(0 < K < +\infty)$ telle que l'on ait,

$$|f(x_0 + h) - f(x_0)| < K \cdot |h|$$

pour h assez petit, d'où la continuité de f . Notons que la réciproque est fautive (Ex. 3.2).

- (ii) La somme et le produit de deux fonctions dérivables en x_0 sont dérivables en x_0 . De plus, si f et g sont les fonctions données et si l'on note d'une manière générale $f'(x_0)$ (resp. $g'(x_0)$) la dérivée de f (resp. g) en x_0 , on a :

$$(f + g)'(x_0) = f'(x_0) + g'(x_0)$$

$$(f \cdot g)'(x_0) = f(x_0) \cdot g'(x_0) + f'(x_0) \cdot g(x_0)$$

De même, si $g(x_0) \neq 0$, f/g est dérivable en x_0 et l'on a :

$$\left(\frac{f}{g}\right)'(x_0) = \frac{f'(x_0) \cdot g(x_0) - f(x_0) \cdot g'(x_0)}{g(x_0)^2}$$

Il est laissé au lecteur le soin de démontrer ces trois propriétés.

4.3.1. Dérivation des fonctions composées

En guise de préambule, nous attirons l'attention sur une erreur assez fréquente concernant la dérivée de $f(ax + b)$. Connaissant la dérivée $f'(x)$ de la fonction $f(x)$, il faut éviter d'attribuer comme dérivée à la fonction $f(ax + b)$, l'expression $f'(ax + b)$ déduite de $f'(x)$ par le changement de x en $ax + b$.

La dérivée de $f'(ax + b)$ est la limite de

$$\begin{aligned}
 \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(ax + b + a \cdot \Delta x) - f(ax + b)}{\Delta x} \\
 &= a \lim_{\Delta u \rightarrow 0} \frac{f(ax + b + \Delta u) - f(ax + b)}{\Delta u} \\
 &= a \cdot f'(ax + b)
 \end{aligned}$$

avec $\Delta u = a \cdot \Delta x$.

Donc on constate que la dérivée de $f(ax + b)$ est égale à $a \cdot f'(ax + b)$. Avec cette remarque nous venons de traiter un cas particulier de la dérivation des fonctions de fonction ou fonctions composées.

Soient f et g des fonctions réelles d'une variable réelle, on suppose que f est définie dans un certain intervalle \mathbf{I} et prend ses valeurs dans l'intervalle \mathbf{J} sur lequel g est définie. On peut alors former la fonction composée

$$h = g \circ f$$

donnée par $h(x) = g(f(x))$ pour tout $x \in \mathbf{I}$.

Théorème

Si f est dérivable en un point x_0 et si g est dérivable au point $y_0 = f(x_0)$, alors h est dérivable en x_0 et on a :

$$h'(x_0) = g'(y_0) f'(x_0)$$

c'est-à-dire :

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

La pseudo-démonstration fondée sur la relation

$$\frac{g \circ f(x) - g \circ f(x_0)}{x - x_0} = \frac{g \circ f(x) - g \circ f(x_0)}{f(x) - f(x_0)} = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

n'est pas correcte puisque l'on prend le risque de diviser par zéro. La démonstration fondée sur les développements limités d'ordre 1 de g et de f est difficile à comprendre car le résultats est masqué par les calculs. Nous

proposons ici une démonstration rigoureuse basée sur l'idée $a/c = (a/b) \cdot (b/c)$.

Preuve: Posons

$$u(x) = \frac{h(x) - h(x_0)}{f(x) - f(x_0)} \quad \text{si } f(x) \neq f(x_0)$$

et

$$v(x) = g'(y_0) \quad \text{si } f(x) = f(x_0)$$

On a alors dans tous les cas,

$$\frac{h(x) - h(x_0)}{x - x_0} = u(x) \cdot \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0},$$

Quand x tend vers x_0 , le rapport $\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$ tend par hypothèse vers une limite $f'(x_0)$. Il ne reste donc à montrer que $u(x)$ tend vers $g'(y_0)$, c'est-à-dire que l'on a : $|u(x) - g'(y_0)| < \varepsilon$ dès que $|x - x_0|$ est suffisamment petit. Or l'inégalité $|u(x) - g'(y_0)| < \varepsilon$ est trivialement vérifiée si $f(x) = f(x_0)$. Dans les autres cas elle s'écrit

$$\left| \frac{g(f(x)) - g(f(x_0))}{f(x) - f(x_0)} - g'(y_0) \right| < \varepsilon$$

et il existe donc un nombre $\delta > 0$ tel que l'on ait $|u(x) - g'(y_0)| < \varepsilon$ dès que $|f(x) - f(x_0)| < \delta$. Mais f étant dérivable en x_0 est aussi continue en x_0 de sorte que la dernière inégalité est vérifiée dès que $|x - x_0|$ est assez petit.

- (i) Toute fonction f dérivable en un point est continue en ce point. En effet, si le rapport

L'intérêt

Loi des gaz parfaits

Supposons que

Ordre d'une réaction chimique

Supposons que nous devons déterminer si la pression P d'un gaz dépend

Energie d'activation

Supposons que nous devons déterminer si la pression P d'un gaz dépend

5

Fonctions de plusieurs variables (I) Dérivées partielles, Gradient, Rotationnel, Divergence, Laplacien

Dans ce chapitre on aborde les fonctions réelles de plusieurs variables réelles.

5.1. NOTION DE FONCTION DE PLUSIEURS VARIABLES

Nous n'avons considéré jusqu'à présent que des fonctions d'une seule variable indépendante. Mais certains phénomènes physiques, chimiques,... nécessitent pour leur analyse l'étude de plusieurs variables. Ainsi, par exemple, la pression d'un gaz dépend à la fois de son volume et de sa température, ce qui signifie que cette pression P est fonction de deux variables indépendantes, V et T ; on l'écrira : $P = f(V, T)$.

Une relation fonctionnelle entre une variable dépendante y et les variables indépendantes x_1, \dots, x_n s'exprime de la même façon que celle des fonctions d'une variable : $y = f(x_1, \dots, x_n)$. C'est une fonction de n variables. Nous allons considérer maintenant les fonctions de deux variables, et nous écrirons dans ce cas : $z = f(x, y)$.

Les fonctions de deux variables $z = f(x, y)$ se représentent graphiquement en principe de la même façon que les fonctions d'une variable. Si nous faisons varier arbitrairement les valeurs permises x et y , il correspond toujours un point P ayant pour coordonnées cartésiennes les trois nombres x , y et $z = f(x, y)$. L'ensemble de ces points P engendre une surface dans l'espace physique de dimension trois.

Un exemple simple d'une fonction de deux variables est donné par l'expression : $z = \ln(x^2 - y)$, dont le domaine de définition est l'ensemble des couples (x, y) du plan \mathbf{R}^2 vérifiant l'inégalité : $y < x^2$.

5.2. FONCTIONS CONTINUES

La continuité d'une fonction de deux variables est définie de la même façon que celle de la fonction d'une variable.

Définition

Soit f une fonction réelle définie sur une partie ouverte \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . On dit que la fonction f est continue en un point (x_0, y_0) de \mathbf{D} si $f(x, y)$ converge vers $f(x_0, y_0)$ lorsque le point (x, y) tend de façon quelconque vers le point (x_0, y_0) tout en restant dans le domaine \mathbf{D} .

On dit que f est continue si f est continue en (x_0, y_0) pour tout point (x_0, y_0) de \mathbf{D} .

La définition de la continuité indique que pour tout $\varepsilon > 0$, il existe un $\delta > 0$ tel que $|f(x, y) - f(x_0, y_0)| < \varepsilon$ dès que $0 < \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} < \delta$.

Le théorème suivant est utile pour identifier les fonctions continues.

Théorème

- (i) Si g et h sont deux fonctions continues d'une variable, alors la fonction f , qui est le produit ordinaire de g et h : $f(x, y) = g(x)h(y)$, est une fonction continue de x et y .
- (ii) Si g est une fonction continue d'une variable et si h est une fonction continue de deux variables, alors la fonction composée : $f(x, y) = g(h(x, y))$ est une fonction continue de x et y .

Un exemple d'application de (i) est la gaussienne:

$$z = e^{-x^2 - y^2} = e^{-x^2} \cdot e^{-y^2}$$

Un exemple d'application de (ii) est la fonction :

$$z = \sin(xy^2)$$

Tout comme dans le cas d'une variable, la somme, la différence et le produit de deux fonctions continues sont aussi continues. En outre, le quotient de deux fonctions continues est continue sauf aux points (x, y) où le dénominateur s'annule.

Comme exemple d'application de la dernière assertion, considérons la fonction : $f(x, y) = \frac{x^3 y^2}{1 - xy}$. Elle est continue partout dans le plan \mathbf{R}^2 sauf sur l'hyperbole équilatère d'équation $xy = 1$.

5.3. LES DERIVEES PARTIELLES

Définition

Soit f une fonction de x et y , à valeurs réelles et définie sur un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . Si nous maintenons la variable y constante, disons $y = y_0$, et si nous considérons x comme variable, alors $z = f(x, y_0)$ est uniquement fonction de x . Si cette fonction $x \rightarrow f(x, y_0)$ est différentiable au point $x = x_0$, alors la valeur de cette dérivée est désignée par $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$ et est appelée la dérivée partielle par rapport à x de la fonction $z = f(x, y)$ au point (x_0, y_0) .

De même, on définit la dérivée partielle par rapport à y de la fonction $z = f(x, y)$ au point (x_0, y_0) : $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)$.

Remarque

Dans les applications (notamment en Chimie Physique et en Thermodynamique), on ajoute souvent un indice à une dérivée partielle pour indiquer l'autre variable, comme par exemple $\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)\right)_y$. Cette notation est quelquefois nécessaire. Illustrons ceci par un exemple. Soit l'équation de van der Waals :

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

avec a et $b > 0$. L'énergie interne U d'un gaz obéissant à cette loi est donnée par l'expression :

$$U = U(T, V) = \frac{3}{2}RT - \frac{a}{V}$$

de sorte qu'on ait par exemple la dérivée partielle de U par rapport à V à T constant :

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = \frac{a}{V^2}.$$

Si on utilise l'équation d'état, on obtiendra

$$U = U(T, V) = U(T(P, V), V) = \frac{3}{2}\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) - \frac{a}{V}$$

de sorte que la même dérivée partielle de U par rapport à V mais à P constant cette fois-ci soit donnée par :

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_P = \frac{3}{2}P - \frac{1}{2}\frac{a}{V^2} + 3\frac{ab}{V^3}$$

qui est évidemment distincte de la précédente !

L'existence des dérivées partielles en un point (x_0, y_0) n'assure pas la continuité de la fonction en ce point (x_0, y_0) . La notion de dérivée partielle jouera un rôle important pour des fonctions $z = f(x, y)$ différentiables dont nous parlerons au prochain paragraphe.

Interprétation géométrique de dérivées partielles

On a vu que le graphe de la fonction $z = f(x, y)$ est une surface S qui est le lieu géométrique des points $P = (x, y, z) = f(x, y)$ de l'espace physique \mathbf{R}^3 . Si la variable y est maintenue constante, disons $y = y_0$, et si x varie dans son domaine permis, alors le point P se déplace le long de la courbe C_1 qui est l'intersection de la surface S avec le plan vertical d'équation $y = y_0$ (la courbe

C_1 est le graphe de la fonction $x \rightarrow f(x, y_0)$. Ainsi, la dérivée partielle $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$ est la tangente à la courbe C_1 au point (x_0, y_0) . Voir la figure 1.1.

FIG 1

Figure 1.1 - xxxxxxxxxxxxxxxx

Dérivées partielles d'ordre supérieure

Si (x_0, y_0) est un point d'un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 , si $f: \mathbf{D} \rightarrow \mathbf{R}$, et si les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x}$ et $\frac{\partial f}{\partial y}$ existent au voisinage du point (x_0, y_0) et sont continues au point (x_0, y_0) , alors on dit que la fonction f est une fois *continue différentiable* en (x_0, y_0) .

Il arrive très souvent dans la pratique que ces dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x}$ et $\frac{\partial f}{\partial y}$ possèdent elles-mêmes des dérivées partielles; ces dernières dérivées partielles sont dites du second ordre, et on les note par les notations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (x_0, y_0) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} (x_0, y_0) , \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) (x_0, y_0) &= \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} (x_0, y_0) , \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (x_0, y_0) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} (x_0, y_0) , \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (x_0, y_0) &= \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} (x_0, y_0) . \end{aligned}$$

Si ces dérivées partielles secondes existent au voisinage de (x_0, y_0) et sont continues en (x_0, y_0) , on dit que la fonction f est deux fois continue différentiable.

On peut souvent épargner l'un des quatre calculs par le théorème d'interversion suivant dû à H.A. Schwarz.

Théorème

Si la fonction f est deux fois continûment différentiable en (x_0, y_0) , alors

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x_0, y_0).$$

5.4. FONCTIONS DIFFÉRENTIABLES

Dans le cas d'une fonction d'une seule variable $y = f(x)$, nous avons vu qu'en un point x_0 d'un intervalle ouvert I de \mathbf{R} , s'il existe une dérivée $f'(x_0)$, elle est unique et est égale à

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}. \quad (5.1)$$

Une fonction f , qui est dérivable en un point x_0 , jouit de deux propriétés importantes :

- (a) f est continue en x_0 ;
- (b) La courbe $y = f(x)$ admet une tangente non verticale en x_0 .

On veut donc étendre ces deux propriétés aux fonctions $z = f(x, y)$ de deux variables x et y :

- (a) $z = f(x, y)$ est continue en (x_0, y_0) ;
- (b) La surface $z = f(x, y)$ admet un plan tangent non vertical en (x_0, y_0) .

Pour cela, nous allons réécrire (1) sous la forme suivante :

$$\Delta f = f'(x_0)\Delta x + \varepsilon(\Delta x)\Delta x \quad (5.2)$$

avec

$$\Delta f = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0),$$

$$\varepsilon(\Delta x) = \frac{\Delta f}{\Delta x} - f'(x_0),$$

$$\varepsilon(\Delta x) \rightarrow 0 \text{ lorsque } \Delta x \rightarrow 0.$$

D'où, dans le contexte de deux variables x et y , nous introduisons la définition suivante :

Définition

Soit f une fonction réelle de deux variables réelles x et y , définie sur un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . On pose

$$\Delta f = f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) - f(x_0, y_0).$$

On dit que f est différentiable en un point (x_0, y_0) de \mathbf{D} si $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$ et $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)$ existent et si Δf peut s'exprimer sous la forme :

$$\Delta f = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)\Delta x + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)\Delta y + \varepsilon_1(\Delta x, \Delta y)\Delta x + \varepsilon_2(\Delta x, \Delta y)\Delta y \quad (5.3)$$

où ε_1 et ε_2 sont des fonctions de Δx et Δy qui tendent vers 0 lorsque $(\Delta x, \Delta y) \rightarrow (0, 0)$.

On a l'implication suivante :

Théorème

Si f est différentiable en (x_0, y_0) , alors f est continue en ce point.

Il existe des fonctions continues en (x_0, y_0) et non différentiables en ce point. La seule existence des dérivées partielles ne suffit pas à assurer la différentiabilité. Cependant, la condition suffisante de différentiabilité contenue dans le théorème suivant est très utile en pratique.

Théorème

Soit f une fonction réelle de deux variables réelles x et y , définie sur un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . Soit (x_0, y_0) un point de \mathbf{D} . Si les dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x}$ et $\frac{\partial f}{\partial y}$ existent dans un voisinage de (x_0, y_0) et sont continues en (x_0, y_0) , alors la fonction f est différentiable en (x_0, y_0) .

5.5. REGLE DE DIFFERENTIATION DES FONCTIONS COMPOSEES

Si $y = f(x)$ est une fonction dérivable de x et si $x = x(t)$ est une fonction dérivable de t , alors le théorème de dérivation des fonctions composées à une variable dit que

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

On va généraliser cette formule au cas des fonctions de deux variables. Nous ne considérerons que les fonctions régulières, c'est-à-dire que les fonctions $z = f(x, y)$ pourvues de dérivées partielles continues au voisinage de tout point d'un domaine ouvert de \mathbf{R}^2 .

Théorème

Soit $z = f(x, y)$ une fonction réelle régulière dans un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . Supposons que l'on ait deux fonctions dérivables $x = x(t)$ et $y = y(t)$ définies sur un intervalle ouvert \mathbf{I} de \mathbf{R} et à valeurs dans \mathbf{D} . Alors, la fonction $t \rightarrow f(x(t), y(t)) = g(t)$ est dérivable en tout point t de \mathbf{I} , et on a

$$\frac{dg}{dt}(t) = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t), y(t)) \frac{dx}{dt}(t) + \frac{\partial f}{\partial y}(x(t), y(t)) \frac{dy}{dt}(t).$$

La formule du théorème donne ce qu'on appelle la dérivée totale de $z = f(x, y)$ par rapport au paramètre t .

Exemple

Soit $z = f(x, y)$, et supposons que $y = y(x)$ soit une fonction dérivable de x . Alors, le théorème ci-dessus nous donne :

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx}.$$

On suppose maintenant que l'on ait l'équation

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

qui définit implicitement la fonction $y = y(x)$, et qu'on s'intéresse au problème de trouver la dérivée $\frac{dy}{dx}$. La solution en est simple d'après le calcul précédent :

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = 0$$

d'où, pourvu que $\frac{\partial f}{\partial y} \neq 0$,

$$\frac{dy}{dx} = - \frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{\frac{\partial f}{\partial y}}.$$

On pourra vérifier ceci sur l'exemple concret suivant : prenons $f(x, y) = x^2y - y^3 - 3 = 0$. Alors, d'une part, en appliquant le résultat précédent avec

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xy$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = x^2 - 3y^2$$

on a

$$\frac{dy}{dx} = - \frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{\frac{\partial f}{\partial y}} = - \frac{2xy}{x^2 - 3y^2}.$$

D'autre part, en différenciant implicitement l'équation donnée on obtient

$$2xy + x^2 \frac{dy}{dx} - 3y^2 \frac{dy}{dx} + 0 = 0$$

ce qui donne le même résultat que ci-dessus !

Exemple

Considérons la loi générale des gaz en Physique : $f(P, V, T) = 0$. On a d'après l'exemple précédent :

$$\frac{\partial f}{\partial V} + \frac{\partial f}{\partial P} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0$$

d'où

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = - \frac{\frac{\partial f}{\partial V}}{\frac{\partial f}{\partial P}} .$$

Et de même, on a

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = - \frac{\frac{\partial f}{\partial T}}{\frac{\partial f}{\partial V}} .$$

et

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_V = - \frac{\frac{\partial f}{\partial P}}{\frac{\partial f}{\partial T}} .$$

En multipliant les trois relations membre à membre, on obtient la «règle cyclique» :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_V = -1 .$$

Exemple

Le théorème nous conduit à une propriété importante des fonctions homogènes. Une fonction $f(x, y)$ est dite homogène de degré k si, quel que soit $t > 0$,

$$f(tx, ty) = t^k f(x, y) \quad (5.4)$$

Ainsi, $f(x, y) = \ln x - \ln y$ est une fonction homogène de degré 0, $f(x, y) = (x^2 y^2) / (x^2 + y^2)$ est une fonction homogène de degré 2, et $f(x, y) = 1 / \sqrt{x^2 + y^2}$ est une fonction homogène de degré -1. Les fonctions homogènes de degré 0 et 1 sont importantes lors des études physico-chimiques de systèmes multiphasés ou de mélanges homogènes.

Si on dérive les deux membres de (5.4), on a

$$x \frac{\partial f}{\partial x}(tx, ty) + y \frac{\partial f}{\partial y}(tx, ty) = kt^{k-1} f(x, y)$$

En posant $t = 1$, on obtient la relation d'Euler pour les fonctions homogènes de degré k :

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

Théorème

Supposons que $z = f(x, y)$ soit une fonction réelle régulière de deux variables x et y et définie sur un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 , et que chacune de ces variables $x = x(t, u)$ et $y = y(t, u)$ dépende de deux autres variables t et u ; t et u parcourent les intervalles ouverts \mathbf{I} et \mathbf{J} de \mathbf{R} respectivement. On suppose que les deux fonctions $x = x(t, u)$ et $y = y(t, u)$ sont régulières. Alors, la fonction composée $(t, u) \rightarrow f(x(t, u), y(t, u)) = g(t, u)$ est régulière, et on a

$$\frac{\partial g}{\partial t}(t, u) = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t, u), y(t, u)) \frac{\partial x}{\partial t}(t, u) + \frac{\partial f}{\partial y}(x(t, u), y(t, u)) \frac{\partial y}{\partial t}(t, u),$$

$$\frac{\partial g}{\partial u}(t, u) = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t, u), y(t, u)) \frac{\partial x}{\partial u}(t, u) + \frac{\partial f}{\partial y}(x(t, u), y(t, u)) \frac{\partial y}{\partial u}(t, u).$$

Exemple

Nous allons partir de $f(x, y) = f(r \cos \varphi, r \sin \varphi)$ pour calculer le laplacien de la fonction f : $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ en coordonnées polaires (r, φ) . Le théorème nous donne successivement :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \left(-\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right), \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial r} \left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right). \quad (5.6)$$

La dérivée partielle seconde par rapport à x est un peu plus «compliquée» car nous avons quatre termes de (5.5) qui dépendent de x :

$$\begin{aligned} \int_{\gamma} \mathrm{d}f &= \int_a^b \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x(t), y(t)) \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}(t) + \frac{\partial f}{\partial y}(x(t), y(t)) \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) \right] \mathrm{d}t \\ &= \int_a^b \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}(x(t), y(t)) \mathrm{d}t \\ &= f(x(b), y(b)) - f(x(a), y(a)) \end{aligned}$$

$$\int_{\gamma} \{M(x, y) \mathrm{d}x + N(x, y) \mathrm{d}y\} = \int \int_a^b \left[M(x(t), y(t)) \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + N(x(t), y(t)) \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} \right]$$

$$\gamma: t \rightarrow \gamma(t) = (x(t), y(t)) \in \mathbf{D}$$

$$[a, b]$$

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = M(x, y) \\ \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = N(x, y) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{y}{x^2 + y^2} \right) \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{y}{x^2 + y^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) . \end{aligned}$$

Or, on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ &= \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} - \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial r} \frac{y}{x^2 + y^2} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ &= \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial \varphi} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} - \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial r} \frac{y}{x^2 + y^2} . \end{aligned}$$

Par suite, en tenant compte de l'égalité (théorème de Schwarz)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial r} = \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial \varphi} ,$$

on obtient facilement

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{x^2}{x^2 + y^2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \frac{2xy}{\sqrt{(x^2 + y^2)^3}} \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial \varphi} + \frac{y^2}{(x^2 + y^2)^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &\quad + \frac{y^2}{\sqrt{(x^2 + y^2)^3}} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{2xy}{x^2 + y^2} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

De façon analogue, on obtiendrait

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} &= \frac{y^2}{x^2 + y^2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2xy}{\sqrt{(x^2 + y^2)^3}} \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial \varphi} + \frac{x^2}{(x^2 + y^2)^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &+ \frac{x^2}{\sqrt{(x^2 + y^2)^3}} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{2xy}{x^2 + y^2} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

En ajoutant membre à membre ces deux égalités, on obtient l'expression suivante du laplacien en coordonnées polaires :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}.$$

5.5. LA DIFFERENTIELLE TOTALE

Nous allons chercher la différentielle de la fonction :

$$z = z(t) = f(x(t), y(t))$$

Nous savons que nous pouvons former la différentielle d'une variable dépendante en multipliant la dérivée par la différentielle de la variable indépendante :

$$dz = \frac{dz}{dt} dt$$

Nous pouvons donc écrire, en utilisant l'expression de la dérivée totale :

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

La notion de différentielle nous permet d'affirmer que

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

D'où la définition suivante de la différentielle totale de la fonction $z = f(x, y)$ en (x_0, y_0) :

$$dz = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) dx + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) dy$$

Exemple

Pour un gaz parfait qui vérifie l'équation

$$V = nR \frac{T}{P}$$

on a

$$dV = \frac{nR}{P} dT - \frac{nRT}{P^2} dP$$

Par conséquent, on voit sur cette expression de la différentielle de $V = V(P, T)$ qu'une augmentation de température T tend à augmenter le volume V , alors qu'une augmentation de pression P a l'effet inverse.

Un problème théorique concernant la différentielle totale est la suivant : Soient deux fonctions réelles $M(x, y)$ et $N(x, y)$ de deux variables réelles x et y définies sur un domaine ouvert \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . On souhaite savoir s'il existe une fonction réelle $z = f(x, y)$ définie sur \mathbf{D} telle que l'on ait les relations suivantes sur \mathbf{D} :

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = M(x, y) \\ \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = N(x, y) \end{cases} \quad (5.7)$$

On peut encore formuler cette question de la façon suivante : Existe-t-il une fonction $z = f(x, y)$ telle que pour tous x, y de \mathbf{D} on ait :

$$df = M(x, y) dx + N(x, y) dy \quad (5.8)$$

La forme linéaire en dx et dy : $M(x, y) dx + N(x, y) dy$ s'appelle une forme différentielle, et on veut savoir si cette forme différentielle est exacte,

c'est-à-dire s'il existe une fonction $z = f(x, y)$ telle que cette forme différentielle $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ soit précisément la différentielle totale df . La réponse à cette question dépend de la régularité des fonctions $M(x, y)$ et $N(x, y)$ et de la «topologie» du domaine \mathbf{D} .

Supposons le problème résolu. Supposons en outre les fonctions $M(x, y)$ et $N(x, y)$ régulières. Puisque

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

on a

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x, y) = \frac{\partial M}{\partial y}(x, y)$$

De même, il est clair que

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y) = \frac{\partial N}{\partial x}(x, y)$$

Il découle donc du théorème de Schwarz qu'on doit avoir sur le domaine \mathbf{D} l'égalité :

$$\frac{\partial M}{\partial y}(x, y) = \frac{\partial N}{\partial x}(x, y) \quad (5.9)$$

pour que la forme différentielle $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ soit une forme différentielle totale exacte. Il s'agit là d'une condition nécessaire. Nous admettrons sans démonstration que, si le domaine \mathbf{D} «n'a pas de trous», la relation (5.9) est aussi suffisante pour assurer que $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ soit une forme différentielle totale exacte.

Exemple et Remarque

Considérons la forme différentielle $xy dx + x^2y dy$ sur le domaine $\mathbf{D} = \mathbf{R}^2$. Elle n'est pas exacte car

$$\frac{\partial M}{\partial y}(x, y) = x \neq 2xy = \frac{\partial N}{\partial x}(x, y)$$

Il n'existe aucune fonction $z = f(x, y)$ telle que $df = xy dx + x^2y dy$. Afin de pouvoir distinguer les formes différentielles totales exactes et non exactes, on utilisera le symbole :

$$\delta f = M(x, y)dx + N(x, y)dy$$

pour signifier explicitement que $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ n'est pas une forme différentielle totale exacte.

Considérons maintenant une courbe $\gamma: t \rightarrow \gamma(t)$ définie sur un intervalle $[a, b]$ de \mathbf{R} et à valeurs dans le domaine \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . Supposons que la courbe $\gamma(t) = (x(t), y(t)) \in \mathbf{D}$ soit représentée par des coordonnées dérivables. On peut alors calculer l'intégrale curviligne

$$\int_{\gamma} M(x, y)dx + N(x, y)dy \quad (5.10)$$

de la forme différentielle $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ le long de la courbe γ de la façon suivante :

$$\int_{\gamma} M(x, y)dx + N(x, y)dy = \int_a^b \left[M(x(t), y(t)) \frac{dx}{dt}(t) + N(x(t), y(t)) \frac{dy}{dt}(t) \right] dt$$

Au lieu de (5.10), on pourra également utiliser le symbole plus simple suivant :

$$\int_{\gamma} df$$

avec $df = M(x, y)dx + N(x, y)dy$. Le calcul de cette intégrale curviligne est particulièrement simple dans le cas où $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ est une forme différentielle totale exacte. En effet, on a dans cette situation :

$$\begin{aligned} \int_{\gamma} df &= \int_a^b \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x(t), y(t)) \frac{dx}{dt}(t) + \frac{\partial f}{\partial y}(x(t), y(t)) \frac{dy}{dt}(t) \right] dt \\ &= \int_a^b \frac{df}{dt}(x(t), y(t)) dt \\ &= f(x(b), y(b)) - f(x(a), y(a)) \end{aligned}$$

On voit donc que $\int_{\gamma} df$ ne dépend pas du chemin γ suivi, mais ne dépend uniquement que des extrémités $(x(a), y(a))$ et $(x(b), y(b))$ de la courbe γ . Cette propriété caractérise les formes différentielles totales exactes, et elle présente une grande importance en liaison avec la notion de fonction d'état en Thermodynamique. On peut en fait démontrer (mais nous l'admettrons) le résultat suivant :

Théorème

Soient deux fonctions réelles $M(x, y)$ et $N(x, y)$ définies sur un domaine ouvert \mathbf{D} sans trou de \mathbf{R}^2 . Supposons que $M(x, y)$ et $N(x, y)$ sont régulières sur \mathbf{D} . Soit $\gamma: [a, b] \rightarrow \mathbf{D}$ une courbe régulière. Alors les trois assertions suivantes sont équivalentes :

- (a) La forme différentielle $M dx + N dy$ est exacte.
- (b) L'intégrale curviligne $\int_{\gamma} M dx + N dy$ ne dépend que de l'origine $(x(a), y(a))$ et de l'extrémité $(x(b), y(b))$ de la courbe γ et non pas du chemin effectivement suivi pour les joindre.
- (c) L'intégrale curviligne $\oint_{\gamma} M dx + N dy$ est nulle chaque fois que la courbe γ est un chemin fermé (c'est-à-dire la courbe γ est telle que $x(a) = x(b)$ et $y(a) = y(b)$).

Exemple

Il y a deux différentielles non exactes qui sont importantes en Thermodynamique : la quantité δQ de la chaleur fournie au système et la quantité δW du travail effectué par le système. On va montrer que pour un gaz idéal obéissant à la loi $PV = nRT$ dans une transformation réversible infinitésimale avec n fixé, la forme différentielle δW du travail n'est pas exacte.

On choisira T et V comme nos variables indépendantes (x et y). Alors on a

$$\delta W = 0 dT - P dV$$

D'où

$$\delta W = M(T, V)dt + N(T, V)dV = 0dT - PdV = 0dT - \frac{nRT}{V}dV$$

Par conséquent

$$\left(\frac{\partial M}{\partial V}\right)_{T,n} = 0 \neq -\frac{nR}{V} = \left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{V,n}$$

On pourra vérifier ce résultat grâce au théorème également, en choisissant deux chemins différents pour aller d'un même état initial (T_1, V_1) à un même état final (T_2, V_2) ; par exemple, le premier chemin γ_1 est le segment de droite d'équation $\frac{V - V_1}{V_2 - V_1} = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}$ et le second chemin γ_2 est composé du segment de droite horizontal d'équation $V = V_1$ (avec T varié de T_1 à T_2) et du segment de droite vertical d'équation $T = T_2$ (avec V varié de V_1 à V_2). Il n'est pas difficile dans ces conditions de voir que

$$\int_{\gamma_1} \delta W \neq \int_{\gamma_2} \delta W$$

Ceci signifie que le travail dépend du chemin suivi, et ce résultat confirme, par le théorème, que la différentielle n'est pas exacte (et donc que le travail ne peut pas être une fonction d'état dans le langage de la Thermodynamique).

Nous voulons maintenant résoudre le problème suivant : Soient $M(x, y)$ et $N(x, y)$ deux fonctions réelles définies sur un domaine D sans trou de \mathbf{R}^2 . Supposons que $M(x, y)dx + N(x, y)dy$ est la différentielle totale exacte d'une fonction réelle $z = f(x, y)$. Comment pouvons-nous déterminer cette fonction $z = f(x, y)$?

La détermination de cette fonction $z = f(x, y)$ peut se faire grâce au raisonnement élémentaire suivant. Puisque

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

on aura, en intégrant les deux membres :

$$f(x, y) = \int M(x, y) dx + g(y) \quad (5.11)$$

où $g(y)$ ne dépend que de y (c'est la constante d'intégration lorsqu'on intègre par rapport à la variable x). La fonction $g(y)$ peut alors s'obtenir en utilisant l'autre condition :

$$N(x, y) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y). \quad (5.12)$$

Dans (5.12), on remplace le second membre par la dérivée partielle de $f(x, y)$ par rapport à y où $f(x, y)$ est donnée par (5.11) :

$$N(x, y) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\int M(x, y) dx \right) + g'(y)$$

Cette dernière équation nous donne la dérivée $g'(y)$; de là on peut trouver la fonction $g(y)$ en effectuant une intégration, et puis la fonction $f(x, y)$ elle-même.

Exemple

Considérons la forme différentielle

$$\partial f = e^{-x} y^2 dx - 2e^{-x} y dy,$$

qui est exacte, comme on peut le voir aisément. Pour déterminer la fonction $f(x, y)$ satisfaisant à la relation

$$\partial f = e^{-x} y^2 dx - 2e^{-x} y dy,$$

intégrons par rapport à x l'équation :

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = e^{-x} y^2$$

On obtient facilement

$$f(x, y) = \int e^{-x} y^2 dx + g(y) = -e^{-x} y^2 + g(y)$$

où $g(y)$ est une fonction à déterminer. Pour cela, dérivons la relation qu'on vient d'obtenir par rapport à y :

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = -2e^{-x}y + g'(y)$$

et utilisons le fait que

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = -2e^{-x}y$$

pour conclure que l'on a

$$g'(y) = 0$$

D'où

$$g(y) = \text{const}$$

Finalement, la fonction $f(x, y)$ cherchée est

$$f(x, y) = -e^{-x}y^2 + \text{const}$$

LES FACTEURS INTEGRANTS

Considérons deux fonctions régulières $M(x, y)$ et $N(x, y)$ dans un domaine ouvert sans trous de \mathbf{R}^2 . Si la forme différentielle

$$M(x, y)dx + N(x, y)dy \tag{5.13}$$

n'est pas une différentielle totale exacte, on peut, sous certaines conditions assez générales, trouver une fonction $\mu = \mu(x, y)$ non identiquement nulle telle que la forme différentielle

$$\mu(x, y)M(x, y)dx + \mu(x, y)N(x, y)dy$$

soit une différentielle totale exacte. Cette fonction $\mu = \mu(x, y)$ s'appelle un facteur intégrant. Si un tel facteur existe, il y en a alors une infinité.

On peut penser à l'exemple suivant emprunté à la Thermodynamique : la chaleur δQ n'est pas une différentielle totale exacte, mais $\frac{1}{T}\delta Q$ l'est (l'entropie est une fonction d'état...) :

Exemple

Pour un gaz parfait, on a l'expression suivante pour l'énergie interne en fonction de P et V :

$$U = \frac{3}{2}PV.$$

D'où l'expression de la chaleur :

$$\delta Q = dU - \delta W = dU + PdV = \frac{3}{2}VdP + \frac{5}{2}PdV.$$

On voit donc aisément que δQ n'est pas une différentielle totale exacte car

$$\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{3}{2}V\right) = \frac{3}{2} \neq \frac{5}{2} = \frac{\partial}{\partial P}\left(\frac{5}{2}P\right).$$

En revanche, en utilisant l'équation des gaz parfaits $PV = RT$ (pour une mole), on a

$$\frac{1}{T}\delta Q = \frac{3}{2}\frac{V}{T}dP + \frac{5}{2}\frac{P}{T}dV = \frac{3}{2}\frac{R}{P}dP + \frac{5}{2}\frac{R}{V}dV$$

qui est une différentielle totale exacte car

$$\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{3}{2}\frac{R}{P}\right) = 0 = \frac{\partial}{\partial P}\left(\frac{5}{2}\frac{R}{V}\right).$$

Revenons au cas général de $\mu(x, y)M(x, y)dx + \mu(x, y)N(x, y)dy$. Nous pouvons déterminer un facteur intégrant $\mu = \mu(x, y)$ de la manière suivante :

Considérons l'équation différentielle

$$M(x, y)dx + N(x, y)dy = 0$$

ou

$$M(x, y) + N(x, y) \frac{dy}{dx} = 0 \quad (5.14)$$

ou encore

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

La solution générale $y = y(x)$ de cete équation différentielle du premier ordre peut être écrite sous la forme implicite :

$$f(x, y) = \text{const.}$$

Dérivons cette relation par rapport à x , on obtient par le théorème sur la dérivée totale :

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = 0$$

d'où

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \quad (5.15)$$

Ecrivons (5.14) sous la forme

$$M(x, y) = -N(x, y) \frac{dy}{dx} \quad (5.16)$$

et divisons membre à membre (5.15) par (5.16), on obtient

$$\frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{M(x, y)} = \frac{\frac{\partial f}{\partial y}}{N(x, y)}$$

Définissons alors $\mu = \mu(x, y)$ par ce quotient commun, c'est-à-dire qu'on pose par définition :

$$\mu(x, y) = \frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{M(x, y)} = \frac{\frac{\partial f}{\partial y}}{N(x, y)} \quad (5.17)$$

Nous allons montrer que la fonction $\mu = \mu(x, y)$ définie par (5.17) est un facteur intégrant de (5.14). En effet, de la définition (5.17) même, on a

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = \mu(x, y)M(x, y) \\ \frac{\partial f}{\partial y} = \mu(x, y)N(x, y) \end{cases}$$

Par conséquent, en multipliant la première équation par dx et la seconde par dy et en les additionnant membre à membre, on obtient

$$\begin{aligned} \mu(x, y)M(x, y)dx + \mu(x, y)N(x, y)dy &= \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy \\ &= df \end{aligned}$$

ce qui prouve que $\mu(x, y)M(x, y)dx + \mu(x, y)N(x, y)dy$ est une différentielle totale exacte.

Exemple

Considérons la forme différentielle

$$y^2 dx + x^2 dy \tag{5.18}$$

qui n'est pas exacte car

$$\frac{\partial}{\partial y}(y^2) = 2y \neq 2x = \frac{\partial}{\partial x}(x^2)$$

Cherchons un facteur intégrant de (5.18) en utilisant la méthode que nous venons de donner. Pour cela, on va résoudre l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{y^2}{x^2}$$

qui est à variables séparables :

$$\frac{dy}{y^2} = -\frac{dx}{x^2}$$

On intègre les deux membres :

$$-\frac{1}{y} = \frac{1}{x} + c'$$

où c' est la constante d'intégration. Il en résulte que

$$f(x, y) = \frac{1}{x} + \frac{1}{y} = c$$

où c est une constante. Un facteur intégrant de (5.18) est maintenant donné par

$$\frac{\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y} \right)}{y^2} = \frac{\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y} \right)}{x^2} = \frac{1}{x^2 y^2} = \mu(x, y)$$

Et on peut facilement montrer que

$$\mu(x, y) y^2 dx + \mu(x, y) x^2 dy = \frac{1}{x^2} dx + \frac{1}{y^2} dy$$

est une différentielle exacte car

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{x^2} \right) = 0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{y^2} \right).$$

6

Fonctions de plusieurs variables (II)

Intégrales doubles et triples, Intégrales de surface

Dans ce chapitre on montre comment intégrer les fonctions à deux ou trois variables réelles.

6.1. INTEGRALES DOUBLES

Considérons une fonction réelle $z = f(x, y)$ de deux variables réelles x et y . Supposons que les valeurs de $f(x, y)$ restent bornées lorsque x et y varient dans un domaine fermé et borné \mathbf{D} de \mathbf{R}^2 . Le graphe de $z = f(x, y)$ est une surface au-dessus du plan xOy . Au point (x, y) du plan, la hauteur de la surface est $z = f(x, y)$. Supposons pour commencer que la fonction $f(x, y)$ est positive.

On s'intéresse alors à la question suivante :

Quelle est le volume du solide délimité au-dessous par le domaine \mathbf{D} et au-dessus par le graphe de $z = f(x, y)$?

Pour répondre à cette question, on découpe le domaine \mathbf{D} du plan à l'aide des petits rectangles élémentaires de côtés $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ ($i = 0, 1, \dots, m$) et $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$ ($j = 0, 1, \dots, n$). On ne considérera que les petits rectangles qui se trouvent à l'intérieur de \mathbf{D} . Dans chaque petit rectangle intérieur on choisit un point (\bar{x}_i, \bar{y}_j) , et on calcule le volume de la «colonne» au-dessus de ce point : $f(\bar{x}_i, \bar{y}_j)\Delta x_i \Delta y_j$. On forme alors la somme double

$V_{m,n} = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n f(\bar{x}_i, \bar{y}_j)\Delta x_i \Delta y_j$ qui représente le volume total de toutes les

colonnes de cette sorte. Maintenant nous prenons les limites $m \rightarrow \infty$ et $n \rightarrow \infty$ ($\Delta x_i \rightarrow 0$ et $\Delta y_j \rightarrow 0$). Nous supposons que $f(x, y)$ est

une fonction continue. La somme $V_{m,n}$ tend vers une limite, qui dépend seulement de la base D et de la surface $z = f(x, y)$ au-dessus d'elle. La limite est le volume du solide, et elle est par définition l'intégrale double de $f(x, y)$ sur D :

$$\iint_D f(x, y) dx dy = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ n \rightarrow \infty}} \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n f(\bar{x}_i, \bar{y}_j) \Delta x_i \Delta y_j \right\}.$$

Les intégrales doubles jouissent les propriétés suivantes :

(a) Linéarité :

$$\begin{aligned} \iint_D (f + g) dx dy &= \iint_D f dx dy + \iint_D g dx dy \\ \iint_D c \cdot f dx dy & \quad (c = \text{const}) \end{aligned}$$

(b) Si D se décompose en deux domaines D_1 et D_2 qui ne se chevauchent pas, alors

$$\iint_D f dx dy = \iint_{D_1} f dx dy + \iint_{D_2} f dx dy.$$

6.2. CALCUL PRATIQUE D'UNE INTEGRALE DOUBLE

En pratique, le calcul d'une intégrale double $\iint_D f(x, y) dx dy$ se ramène aux calculs successifs de deux intégrales simples en y et puis en x (ou vice versa) de la façon suivante :

Supposons que

$$(x, y) \in D \Leftrightarrow \varphi_1(x) \leq y \leq \varphi_2(x) \text{ et } a \leq x \leq b \quad (6.1)$$

(cf. fig. XYZ). Alors, si la fonction $f(x, y)$ est continue sur D , on a

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \int_a^b \left[\int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} f(x, y) dy \right] dx \quad (6.2)$$

Cette formule signifie que l'on doit d'abord effectuer le calcul de l'intégrale interne $\int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} f(x, y) dy$ dont le résultat $F(x)$ est une fonction de x , puis ensuite on calcule l'intégrale externe de $F(x)$ entre les deux limites $x = a$ et $x = b$. Le résultat final est un nombre réel.

Si, au lieu de (6.1), le domaine \mathbf{D} est décrit par (cf. fig. XYZ2)

$$(x, y) \in \mathbf{D} \Leftrightarrow \psi_1(y) \leq x \leq \psi_2(y) \text{ et } c \leq y \leq d, \quad (6.3)$$

alors, au lieu de (6.2), on a

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \int_c^d \left[\int_{\psi_1(y)}^{\psi_2(y)} f(x, y) dx \right] dy \quad (6.4)$$

Les mêmes commentaires s'appliquent à (6.4). Dans un ordre de calcul ou dans l'autre, le résultat final est le même; cependant, le niveau de difficulté technique de calcul peut être sensiblement différent.

Remarque

Si le domaine \mathbf{D} est un rectangle $\mathbf{D} = [a, b] \times [c, d]$, alors les formules (6.2) et (6.4) deviennent tout simplement :

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \int_a^b \left[\int_c^d f(x, y) dy \right] dx = \int_c^d \left[\int_a^b f(x, y) dx \right] dy \quad (6.5)$$

Si, en outre, la fonction à intégrer $f(x, y)$ est le produit ordinaire de deux fonctions $g(x)$ et $h(y)$, alors la formule (6.5) est encore plus simple :

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \left(\int_a^b g(x) dx \right) \left(\int_c^d h(y) dy \right).$$

Exemple

Calculons le moment d'inertie d'une plaque rectangulaire \mathbf{D} homogène de côtés $2a$ et $2b$, par rapport à l'axe perpendiculaire Δ passant par son centre O (cf. fig. XYZ3).

Soit ρ la densité constante de la plaque \mathbf{D} . Le carré de la distance d'un point courant (x, y) , de la plaque \mathbf{D} à l'axe Δ est $x^2 + y^2$. Alors le moment d'inertie cherché est

$$\begin{aligned}
 I_{\mathbf{D}/\Delta} &= \iint_{\mathbf{D}} \rho(x^2 + y^2) dx dy = \rho \int_{-a}^a \left(\int_{-b}^b (x^2 + y^2) dy \right) dx \\
 &= \rho \int_{-a}^a \left[x^2 y + \frac{1}{3} y^3 \right]_{y=-b}^{y=b} dx = 2\rho \int_{-a}^a \left(bx^2 + \frac{1}{3} b^3 \right) dx \\
 &= 2\rho \left[\frac{1}{3} bx^3 + \frac{1}{3} b^3 x \right]_{x=-a}^{x=a} = 4\rho \left[\frac{1}{3} ba^3 + \frac{1}{3} b^3 a \right] \\
 &= \frac{4}{3} \rho ab(a^2 + b^2)
 \end{aligned}$$

Or la masse M de la plaque rectangulaire est égale à $4\rho ab$, d'où le résultat final est

$$I_{\mathbf{D}/\Delta} = \frac{M(a^2 + b^2)}{3}$$

Exemple

Calculons l'intégrale double

$$I = \iint_{\mathbf{D}} x^3 dx dy$$

où \mathbf{D} est le domaine défini par

$$x^2 \leq y \leq 2x \text{ et } 0 \leq x \leq 2$$

Intégrons d'abord par rapport à y , puis par rapport à x :

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^2 \left(\int_{x^2}^{2x} x^3 \, dy \right) dx \\
 &= \int_0^2 \left[x^3 y \right]_{y=x^2}^{y=2x} dx \\
 &= \int_0^2 (2x^4 - x^5) dx \\
 &= \frac{32}{15}
 \end{aligned}$$

On pourra vérifier, à titre d'exercice, ce résultat en intégrant d'abord par rapport à x , puis par rapport à y :

$$\begin{aligned}
 I &= \iint_{\mathbf{D}} x^3 \, dx \, dy \\
 &= \int_0^4 \left(\int_{y/2}^{\sqrt{y}} x^3 \, dx \right) dy
 \end{aligned}$$

6.3. CHANGEMENTS DE VARIABLES DANS LES INTEGRALES DOUBLES

Souvent, à cause de la géométrie du domaine \mathbf{D} , un changement de variables d'intégration s'avère utile pour le calcul pratique d'une intégrale double. En particulier, l'emploi des coordonnées polaires (r, φ) est assez fréquent dans les exemples concrets. Lorsqu'on fait un changement de variables de (x, y) à (r, φ) , il y a trois choses qui changent dans une intégrale double $\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) \, dx \, dy$:

- (a) Les limites d'intégration sur r et sur φ ;
- (b) L'élément d'aire $dA = dx \, dy$ qui devient $dA = r \, dr \, d\varphi$ (cf. fig. XYZ);
- (c) La fonction à intégrer $f(x, y)$ qui devient $f(r \cos \varphi, r \sin \varphi) = F(r, \varphi)$.

Avec ces notations, nous avons la formule de changement de variables suivante :

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \iint_{\mathbf{D}(r, \varphi)} f(r \cos \varphi, r \sin \varphi) r dr d\varphi$$

où le symbole $\mathbf{D}(r, \varphi)$ signifie simplement que le domaine \mathbf{D} doit être décrit à l'aide des nouvelles coordonnées polaires (r, φ) .

Exemple

Calculons le volume de la sphère centrée en O et de rayon $R > 0$. En coordonnées cartésiennes, cette sphère a pour équation :

$$x^2 + y^2 + z^2 = R^2.$$

Par conséquent, vue l'interprétation géométrique d'une intégrale double, le volume cherché est donné par

$$2 \iint_{\mathbf{D}} \sqrt{R^2 - x^2 - y^2} dx dy$$

où \mathbf{D} désigne le disque de centre O et de rayon R du plan xOy et où l'on a utilisé la symétrie de la sphère par rapport au plan xOy .

Passons aux coordonnées polaires pour effectuer nos calculs. On a

$$[(x, y) \in \mathbf{D} \Leftrightarrow x^2 + y^2 \leq R^2]$$

\Updownarrow

$$[(r, \varphi) \in \mathbf{D}(r, \varphi) \Leftrightarrow 0 \leq r \leq R \text{ et } 0 \leq \varphi \leq 2\pi]$$

Par conséquent, le volume V cherché en coordonnées polaires est

$$V = 2 \iint_{\mathbf{D}(r, \varphi)} \sqrt{R^2 - r^2} r dr d\varphi.$$

En intégrant d'abord par rapport à φ , puis par rapport à r , on a

$$V = 2 \int_0^R \left(\int_0^{2\pi} \sqrt{R^2 - r^2} r d\varphi \right) dr = 4\pi \int_0^R \sqrt{R^2 - r^2} r dr.$$

En posant $t = R^2 - r^2$, on obtient finalement

$$V = -2 \int_{R^2}^0 \sqrt{t} \, dt = \frac{4}{3} \pi R^3.$$

Exemple

En coordonnées cartésiennes, la fonction d'onde d'un oscillateur harmonique bidimensionnel est donnée par

$$\Psi(x, y) = A e^{-a(x^2 + y^2)},$$

expression valable pour tous les x, y . A et a sont deux constantes > 0 .
Calculons la valeur de A pour que l'on ait la condition de normalisation :

$$\iint_{\mathbb{R}^2} [\Psi(x, y)]^2 \, dx \, dy = 1.$$

Passons en coordonnées polaires :

$$A^2 \iint_{\mathbb{R}^2(r, \varphi)} e^{-2ar^2} r \, dr \, d\varphi = 1.$$

D'où :

$$1 = A^2 \left(\int_0^{+\infty} e^{-2ar^2} r \, dr \right) \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \right).$$

Pour achever le calcul, il suffit de poser $u = 2ar^2$ dans l'intégrale par rapport à r :

$$1 = 2\pi A^2 \left(\frac{1}{4a} \int_0^{+\infty} e^{-u} \, du \right) = \frac{\pi A^2}{2a}$$

de telle sorte que la valeur cherchée de A est

$$A = \sqrt{\frac{2a}{\pi}},$$

et la fonction d'onde dont question ci-dessus est

$$\Psi(x, y) = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} e^{-a(x^2 + y^2)}.$$

Changement de variables : cas général

De façon générale, si les anciennes variables (x, y) et les nouvelles variables (u, v) sont reliées par les fonctions : $x = x(u, v)$ et $y = y(u, v)$ et si nous supposons que les fonctions $x = x(u, v)$ et $y = y(u, v)$ sont régulières et vérifient la condition suivante sur le déterminant jacobien $J(u, v)$ du changement de variables de (x, y) à (u, v) :

$$J(u, v) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial x}{\partial v} \\ \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{vmatrix} = \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial v} \frac{\partial y}{\partial u} \neq 0,$$

alors on a la formule suivante :

$$\iint_{\mathbf{D}} f(x, y) dx dy = \iint_{\mathbf{D}(u, v)} f(x(u, v), y(u, v)) |J(u, v)| du dv$$

où $\mathbf{D}(u, v)$ est le domaine \mathbf{D} décrit par les nouvelles variables (u, v) .

On pourra vérifier que le passage en coordonnées polaires est un cas particulier de cette formule générale.

6.4. INTEGRALES TRIPLES

L'intégrale triple $\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz$ d'une fonction réelle bornée $z = f(x, y, z)$ de trois variables réelles x, y, z définie sur un domaine borné \mathbf{S} de l'espace \mathbf{R}^3 est définie et calculée de façon similaire à une intégrale double. Explicitement, les étapes de construction de cette intégrale triple sont les suivantes :

- (a) Le domaine \mathbf{S} est partagé au moyen des petits parallélépipèdes intérieurs de côtés $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ ($i = 0, 1, \dots, m$), $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$ ($j = 0, 1, \dots, n$) et $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$ ($k = 0, 1, \dots, p$).
- (b) Dans chaque petit parallélépipède intérieur, on choisit un point $(\bar{x}_i, \bar{y}_j, \bar{z}_k)$ et on forme la somme :

$$S_{m,n,p} = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^p f(\bar{x}_i, \bar{y}_j, \bar{z}_k) \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k;$$

Par définition, on a à la limite $\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \rightarrow 0$:

$$\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz = \lim_{\substack{m \rightarrow +\infty \\ n \rightarrow +\infty \\ p \rightarrow +\infty}} S_{m,n,p}$$

où l'on a supposé que la limite existe .

Les propriétés de l'intégrale triple sont les mêmes que celles d'une intégrale double.

6.5. CALCUL PRATIQUE D'UNE TRIPLE

En pratique, l'évaluation d'une intégrale triple se ramène aux calculs successifs de trois intégrales simples; il y a maintenant six ordres d'intégration possibles, mais, bien entendu, ils conduisent tous au même résultat pour une intégrale triple donnée. Une de ces six possibilités est la suivante :

Si on suppose que

$$(x, y, z) \in \mathbf{S} \Leftrightarrow \psi_1(x, y) \leq z \leq \psi_2(x, y), \varphi_1(x) \leq y \leq \varphi_2(x) \text{ et } a \leq x \leq b$$

(cf. fig. XYZ4), alors on a la formule

$$\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz = \int_a^b \left(\int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} \left(\int_{\psi_1(x,y)}^{\psi_2(x,y)} f(x, y, z) dz \right) dy \right) dx$$

qui signifie qu'ici on intègre $z = f(x, y, z)$ d'abord par rapport à z , puis par rapport à y et enfin par rapport à x . Remarquons que les limites d'intégration pour z peuvent dépendre de x et de y , celles pour y ne peuvent dépendre que de x et celles pour la dernière variable x doivent être des constantes.

A titre d'exercice, on pourra écrire les cinq autres intégrales successives en changeant l'ordre des intégrations simples.

Exemple

Calculons le centre de gravité (x_G, y_G, z_G) du tétraèdre \mathbf{S} délimité par les inégalités suivantes :

$$x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0 \text{ et } x + y + z \leq 1.$$

Par définition, on a

$$(x_G, y_G, z_G) = \frac{1}{V(\mathbf{S})} \left(\iiint_{\mathbf{S}} x \, dx \, dy \, dz, \iiint_{\mathbf{S}} y \, dx \, dy \, dz, \iiint_{\mathbf{S}} z \, dx \, dy \, dz \right)$$

où $V(\mathbf{S})$ désigne le volume du tétraèdre \mathbf{S} . Commençons par calculer $V(\mathbf{S})$.

On a (cf. fig. XYZ5) :

$$\begin{aligned} V(\mathbf{S}) &= \iiint_{\mathbf{S}} dx \, dy \, dz = \int_0^1 \left(\int_0^{1-x} \left(\int_0^{1-x-y} dz \right) dy \right) dx \\ &= \int_0^1 \left(\int_0^{1-x} (1-x-y) dy \right) dx \\ &= \int_0^1 \frac{1}{2} (1-x)^2 dx = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} x_G &= 6 \iiint_{\mathbf{S}} x \, dx \, dy \, dz \\ &= \int_0^1 \left(\int_0^{1-x} \left(\int_0^{1-x-y} x \, dz \right) dy \right) dx \\ &= 6 \int_0^1 \left(\int_0^{1-x} x(1-x-y) dy \right) dx \\ &= 3 \int_0^1 x(1-x)^2 dx \\ &= \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Par symétrie, on a évidemment pour les deux autres coordonnées :

$$y_G = \frac{1}{4} \text{ et } z_G = \frac{1}{4}. \text{ Le centre de gravité est donc le point } \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right).$$

Exemple

Calculons le volume $V(\mathbf{S})$ de la boule sphérique de centre O et de rayon $R > 0$. L'équation de cette boule est

$$x^2 + y^2 + z^2 \leq 1,$$

On va dans cet exemple faire les calculs du volume $V(\mathbf{S})$ à partir du découpage de \mathbf{S} en tubes. Pour cela on écrira le domaine sphérique \mathbf{S} comme suit (cf. fig. XYZ6) :

$$(x, y, z) \in \mathbf{S} \Leftrightarrow (x, y) \in \mathbf{D} \text{ et } -\sqrt{1-x^2-y^2} \leq z \leq \sqrt{1-x^2-y^2}$$

avec

$$\mathbf{D} = \{(x, y) | x^2 + y^2 \leq 1\}.$$

On a alors l'égalité

$$\begin{aligned} V(\mathbf{S}) &= \iiint_{\mathbf{S}} dx dy dz \\ &= \iint_{\mathbf{D}} \left(\int_{-\sqrt{1-x^2-y^2}}^{+\sqrt{1-x^2-y^2}} dz \right) dx dy, \\ &= \iint_{\mathbf{D}} 2\sqrt{1-x^2-y^2} dx dy \end{aligned}$$

La dernière intégrale pourra se calculer selon la formule

$$\iint_{\mathbf{D}} 2\sqrt{1-x^2-y^2} dx dy = \int_{-1}^{+1} \left(\int_{-\sqrt{1-x^2}}^{+\sqrt{1-x^2}} 2\sqrt{1-x^2-y^2} dy \right) dx ;$$

On remarquera alors que l'intégrale interne se calcule simplement :

$$\begin{aligned} \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{+\sqrt{1-x^2}} 2\sqrt{1-x^2-y^2} dy &= \text{aire d'une rondelle circulaire de rayon } \sqrt{1-x^2} \\ &= \pi(1-x^2) \end{aligned}$$

Et le volume de la boule sphérique est

$$V(\mathbf{S}) = \int_{-1}^{+1} \pi(1-x^2) dx = \left[\pi \left(x - \frac{x^3}{3} \right) \right]_{-1}^{+1} = \frac{4}{3} \pi.$$

6.6. CALCUL D'UNE TRIPLE EN COORDONNEES CYLINDRIQUES ET SPHERIQUES

6.6.1. Coordonnées cylindriques

Les coordonnées cylindriques sont bien adaptées pour la description des solides qui sont symétriques autour d'un axe. Cet axe sera pris comme l'axe des z ; le reste des coordonnées cylindriques sera les coordonnées polaires (r, φ) dans un plan xOy perpendiculaire à l'axe de symétrie des z . (cf. fig. 6.x).

L'élément de volume élémentaire $dV = dx dy dz$ devient

$$dV = r dr d\varphi dz$$

et on a la formule de changement de variables suivante :

$$\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz = \iiint_{\mathbf{S}(r, \varphi, z)} f(r \cos \varphi, r \sin \varphi, z) r dr d\varphi dz$$

où la notation $\mathbf{S}(r, \varphi, z)$ a été utilisée pour signifier que le solide \mathbf{S} sur lequel on intègre l'intégrale triple doit être décrit à l'aide des nouvelles coordonnées.

Exemple

Calculons l'intégrale triple $\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz$

où $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ et $\mathbf{S} = \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \mid x^2 + y^2 \leq p^2 z^2 \text{ et } 0 \leq z \leq a\}$ avec $p > 0$ et $a > 0$ fixés. Pour cela, nous passons en coordonnées cylindriques :

$$\mathbf{S} = \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \mid x^2 + y^2 \leq p^2 z^2 \text{ et } 0 \leq z \leq a\}$$

⇕

$$\mathbf{S}(r, \varphi, z) = \{(r, \varphi, z) \mid 0 \leq r \leq pz, 0 \leq \varphi \leq 2\pi \text{ et } 0 \leq z \leq a\}$$

On a donc

$$\begin{aligned} \iiint_{\mathbf{S}} (x^2 + y^2 + z^2) dx dy dz &= \iiint_{\mathbf{S}(r, \varphi, z)} (r^2 + z^2) r dr d\varphi dz \\ &= \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \right) \left(\int_0^a \left(\int_0^{pz} (r^2 + z^2) r dr \right) dz \right) \\ &= 2\pi \int_0^a \left[\frac{r^4}{4} + \frac{z^2 r^2}{2} \right]_{r=0}^{r=pz} dz \\ &= \frac{\pi a^5 (p^4 + 2p^2)}{10} \end{aligned}$$

6.6.2. Coordonnées sphériques

En coordonnées sphériques (ρ, φ, θ) , l'élément du volume élémentaire $dV = dx dy dz$ devient :

$$dV = \rho^2 \sin \theta d\rho d\varphi d\theta$$

et on a la formule de changement de variables (cf. fig. 6.y) :

$$\begin{aligned} &\iiint_{\mathbf{S}} f(x, y, z) dx dy dz \\ &= \iiint_{\mathbf{S}(\rho, \varphi, \theta)} f(\rho \cos \varphi \sin \theta, \rho \sin \varphi \sin \theta, \rho \cos \theta) \rho^2 \sin \theta d\rho d\varphi d\theta \end{aligned}$$

où la notation $\mathbf{S}(\rho, \varphi, \theta)$ a été utilisée pour signifier que le solide \mathbf{S} sur lequel on intègre l'intégrale triple doit être décrit à l'aide des nouvelles coordonnées.

Exemple

Calculons l'intégrale triple $\iiint_{\mathbf{S}} z dx dy dz$ où le solide est donné par

$$\mathbf{S} = \left\{ (x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \mid x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0 \text{ et } \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} \leq 1 \right\}$$

avec $a > 0$, $b > 0$ et $c > 0$ fixés. Posons d'abord

$$u = \frac{x}{a}, \quad v = \frac{y}{b} \quad \text{et} \quad w = \frac{z}{c}$$

et puis passons en coordonnées sphériques pour effectuer nos calculs. On a

$$\mathbf{S} = \left\{ (u, v, w) \in \mathbf{R}^3 \mid u \geq 0, v \geq 0, w \geq 0 \text{ et } u^2 + v^2 + w^2 \leq 1 \right\}$$

↕

$$\mathbf{S}(\rho, \varphi, \theta) = \left\{ (\rho, \varphi, \theta) \mid 0 \leq \rho \leq 1, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \text{ et } 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \right\}$$

D'où finalement :

$$\begin{aligned} \iiint_{\mathbf{S}} z \, dx \, dy \, dz &= \iiint_{\mathbf{S}(u,v,w)} abc^2 w \, du \, dv \, dw \\ &= abc^2 \iiint_{\mathbf{S}(\rho,\varphi,\theta)} \rho \cos \theta \rho^2 \sin \theta \, d\rho \, d\varphi \, d\theta \\ &= abc^2 \left(\int_0^{\pi/2} d\varphi \right) \left(\int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta \, d\theta \right) \left(\int_0^1 \rho^3 \, d\rho \right) \\ &= \frac{\pi abc^2}{16} \end{aligned}$$

6.7. THEOREME DE GREEN (LIEN ENTRE INTEGRALE CURVILIGNE ET INTEGRALE DOUBLE)

On sait que l'intégrale de $\frac{df}{dx}$ de a à b est $f(b) - f(a)$:

$$\int_a^b \frac{df}{dx}(x) \, dx = f(b) - f(a).$$

Ce résultat fondamental du Calcul Intégral dit au fond que l'on peut intégrer une dérivée à partir des informations de la fonction *sur la frontière* (l'intervalle $[a, b]$ admet les deux points a et b comme deux points frontières !). C'est cette idée que le théorème de Green va étendre au cas de dimension deux.

Soit \mathbf{D} un domaine borné et fermé de \mathbf{R}^2 . On suppose que \mathbf{D} est délimité par une ou plusieurs courbes fermées, régulières (par morceaux) et simples (c'est-à-dire ne se recoupant pas). Le bord orienté positivement d'un tel domaine \mathbf{D} , noté $\partial\mathbf{D}$, est la frontière de \mathbf{D} considérée comme étant la ou les courbes frontières parcourues dans le sens positif (c'est-à-dire que le domaine \mathbf{D} est toujours à notre gauche).

On s'intéresse à l'intégrale curviligne :

$$\int_{\partial\mathbf{D}} M dx + N dy$$

où les deux fonctions réelles $M(x, y)$ et $N(x, y)$ admettent des dérivées partielles continues sur un domaine ouvert contenant \mathbf{D} . Si $\partial\mathbf{D}$ est composé des courbes fermées régulières simples orientées positivement $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$, alors on écrit :

$$\partial\mathbf{D} = \gamma_1 \cup \gamma_2 \cup \dots \cup \gamma_n$$

(cf. fig. 6.z) et on définit :

$$\int_{\partial\mathbf{D}} M dx + N dy = \left(\int_{\gamma_1} M dx + N dy \right) + \dots + \left(\int_{\gamma_n} M dx + N dy \right)$$

Dans ces conditions, on a le théorème suivant que nous allons démontrer dans un cas particulier :

Théorème de Green

Sous les hypothèses ci-dessus, on a

$$\int_{\partial\mathbf{D}} M dx + N dy = \iint_{\mathbf{D}} \left(\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{\partial M}{\partial y} \right) dx dy.$$

Preuve

(a) Nous allons d'abord établir le théorème de Green dans le cas particulier où D est donné par

$$D = \{(x, y) \in \mathbf{R}^2 \mid a \leq x \leq b \text{ et } \varphi_1(x) \leq y \leq \varphi_2(x)\}$$

(cf. fig. 6.xy) où φ_1 et φ_2 sont régulières. Pour ce type de domaine, on a

$$\oint_{\partial D} M(x, y) dx = - \iint_D \frac{\partial M}{\partial y}(x, y) dx dy$$

En effet, puisque la variable x est constante sur les deux segments verticaux de la frontière d'équation $x = a$ et d'équation $x = b$, on a $dx = 0$. D'où

$$\begin{aligned} \oint_{\partial D} M(x, y) dx &= \int_a^b M(x, \varphi_1(x)) dx + \int_b^a M(x, \varphi_2(x)) dx \\ &= \int_a^b [M(x, \varphi_1(x)) - M(x, \varphi_2(x))] dx \\ &= - \int_a^b \left[\int_{\varphi_1(x)}^{\varphi_2(x)} \frac{\partial M}{\partial y}(x, y) dy \right] dx \\ &= - \iint_D \frac{\partial M}{\partial y}(x, y) dx dy \end{aligned}$$

(b) Nous allons ensuite établir le théorème de Green dans le cas particulier où D est donné par

$$D = \{(x, y) \in \mathbf{R}^2 \mid c \leq y \leq d \text{ et } \psi_1(y) \leq x \leq \psi_2(y)\}$$

(cf. fig. 6.xyz) où ψ_1 et ψ_2 sont régulières. Pour ce type de domaine, on a

$$\oint_{\partial D} N(x, y) dy = \iint_D \frac{\partial N}{\partial x}(x, y) dx dy$$

La démonstration de ce résultat est tout à fait similaire au cas précédent.

(c) Finalement, le théorème de Green est évident pour le cas particulier où le domaine D est simultanément décomposable en un nombre fini de domaines du type (a) d'intérieurs disjoints et en un nombre fini de domaines du type (b) d'intérieurs disjoints (cf. fig. 6.xx).

Exemple

Prenons le cas où $M(x, y) = -y$ et $N(x, y) = x$ et où \mathbf{D} est un domaine plan avec une frontière régulière. Alors il est facile de voir que la surface de \mathbf{D} est

$$\text{Surface}(\mathbf{D}) = \frac{1}{2} \oint_{\partial \mathbf{D}} -y dx + x dy$$

En effet, il suffit d'appliquer le théorème de Green en remarquant que $\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{\partial M}{\partial y} = 2$:

$$\oint_{\partial \mathbf{D}} -y dx + x dy = \iint_{\mathbf{D}} 2 dx dy = 2 \text{ Surface}(\mathbf{D}).$$

A titre d'illustration, cherchons la surface de l'ellipse d'équation :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (\text{avec } a > 0 \text{ et } b > 0).$$

Désignons par \mathbf{D} le domaine délimité par l'ellipse. Paramétrisons l'ellipse comme d'habitude par

$$x = a \cos \varphi, \quad y = b \sin \varphi \quad \text{où } 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

Alors on a

$$\begin{aligned} \text{Surface}(\mathbf{D}) &= \frac{1}{2} \oint_{\partial \mathbf{D}} -y dx + x dy \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} -b \sin \varphi (-a \sin \varphi d\varphi) + a \cos \varphi (b \cos \varphi d\varphi) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} (ab \sin^2 \varphi + ab \cos^2 \varphi) d\varphi \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} ab d\varphi \\ &= \pi ab \end{aligned}$$

6.8. THEOREME DE LA DIVERGENCE DE GAUSS ET THEOREME DE LA CIRCULATION DE STOKES - INTEGRALE SUR UNE SURFACE

Nous allons commencer par l'étude des intégrales de la forme :

$$\iint_{\Sigma} M(x, y, z)dx + N(x, y, z)dy + P(x, y, z)dz \quad (6.6)$$

où Σ est une surface orientée dans l'espace physique \mathbf{R}^3 . Par une surface orientée, on entend une surface ayant deux côtés avec un côté baptisé comme «le dessus». Dans ce texte, on définit une surface régulière comme un ensemble Σ de points dont les coordonnées cartésiennes x , y et z dépendent de deux paramètres réels u et v :

$$S(u, v) = (x(u, v), y(u, v), z(u, v)) \quad \text{avec } (u, v) \in \Omega \subset \mathbf{R}^2 \quad (6.7)$$

où les fonctions $x(u, v)$, $y(u, v)$ et $z(u, v)$ ont des dérivées partielles continues sur Ω , la fonction $S(u, v)$ est injective sur Ω (c'est-à-dire $(u, v) \neq (u', v') \Rightarrow S(u, v) \neq S(u', v')$) et

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{pmatrix} \neq 0 \quad \text{pour tout } (u, v) \in \Omega.$$

Cette dernière hypothèse assure que nous avons un plan tangent bien défini à la surface Σ en tout point (x, y, z) . En posant

$$\vec{r}'_u = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{r}'_v = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{pmatrix}$$

on définit alors le vecteur unité de la normale à la surface Σ par

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}'_u \times \vec{r}'_v}{|\vec{r}'_u \times \vec{r}'_v|}$$

et l'élément d'aire élémentaire de la surface Σ par

$$d\sigma = |\vec{r}'_u \times \vec{r}'_v| du dv.$$

Il en résulte que

$$\vec{n} d\sigma = \vec{r}'_u \times \vec{r}'_v du dv$$

C'est l'élément d'aire vectorielle élémentaire. Si

$$\vec{F}(x, y, z) = (M(x, y, z), N(x, y, z), P(x, y, z))$$

est un champ continu de vecteurs dans un domaine de \mathbf{R}^3 , alors le flux du champ $\vec{F}(x, y, z)$ au travers de l'élément d'aire élémentaire $d\sigma$ dans le sens de la normale \vec{n} est

$$\begin{aligned} d\Phi = \vec{F} \cdot \vec{n} d\sigma &= \vec{F} \cdot \vec{r}'_u \times \vec{r}'_v du dv = \begin{vmatrix} M & N & P \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{vmatrix} du dv \\ &= \left\{ \left[M(x(u, v), y(u, v), z(u, v)) \begin{vmatrix} \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \\ \frac{\partial y}{\partial v} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{vmatrix} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \begin{vmatrix} N(x(u, v), y(u, v), z(u, v)) \begin{vmatrix} \frac{\partial z}{\partial u} & \frac{\partial x}{\partial u} \\ \frac{\partial z}{\partial v} & \frac{\partial x}{\partial v} \end{vmatrix} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \begin{vmatrix} P(x(u, v), y(u, v), z(u, v)) \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{vmatrix} \right] \right\} du dv \end{aligned}$$

Dans ces conditions, on définit l'intégrale de surface (6.6) par

$$\begin{aligned}
\Phi &= \iint_{\Sigma} M dy dz + N dz dx + P dx dy = \iint_{\Sigma} \vec{F} \cdot \vec{n} d\sigma \\
&= \iint_{\Omega} \left\{ M(x(u,v), y(u,v), z(u,v)) \left[\frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} - \frac{\partial y}{\partial v} \frac{\partial z}{\partial u} \right] \right. \\
&\quad + N(x(u,v), y(u,v), z(u,v)) \left[\frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial z}{\partial v} \frac{\partial x}{\partial u} \right] \\
&\quad \left. + P(x(u,v), y(u,v), z(u,v)) \left[\frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial v} \frac{\partial y}{\partial u} \right] \right\} du dv
\end{aligned}$$

Exemple

Calculons l'intégrale de surface :

$$\Phi = \iint_{\Sigma} x dy dz + y dz dx + z dx dy$$

où Σ est la surface du cylindre défini par :

$$(x, y, z) \in \Sigma \Leftrightarrow \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \mid x^2 + y^2 = R^2, 0 \leq z \leq h\}.$$

avec la normale orientée vers l'extérieur. Les équations de la surface du cylindre sont :

$$\begin{cases} x = R \cos u \\ y = R \sin u \\ z = v \end{cases} \quad \text{avec } (u, v) \in \Omega = [0, 2\pi] \times [0, h].$$

On a donc

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} - \frac{\partial y}{\partial v} \frac{\partial z}{\partial u} = \cos u \\ \frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial z}{\partial v} \frac{\partial x}{\partial u} = \sin u \\ \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial v} \frac{\partial y}{\partial u} = 0 \end{cases}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}\Phi &= \iint_{\Sigma} x \, dy \, dz + y \, dz \, dx + z \, dx \, dy = \iint_{\Sigma} \vec{F} \cdot \vec{n} \, d\sigma \\ &= \int_{v=0}^{v=h} \int_{u=0}^{u=2\pi} (R \cos u \cos u + R \sin u \sin u + v \cdot 0) \, du \, dv \\ &= \int_{v=0}^{v=h} \int_{u=0}^{u=2\pi} R \, du \, dv = 2\pi R h = \text{surface du cylindre}\end{aligned}$$

Remarquons que les bases inférieure et supérieure du cylindre n'ont pas été incluses dans le calcul du flux. On peut calculer ces flux aussi. La normale extérieure de la base inférieure est $\vec{n}_{\text{inf}} = (0 \ 0 \ -1)$ et celle de la base supérieure est $\vec{n}_{\text{sup}} = (0 \ 0 \ 1)$. D'où

$$\vec{F} \cdot \vec{n} \, d\sigma = \begin{cases} -z \, d\sigma = 0 & \text{pour la base inférieure} \\ +z \, d\sigma = h \, d\sigma & \text{pour la base supérieure} \end{cases}$$

Par conséquent, le flux pour la base inférieure est égal à zéro, et le flux pour la base supérieure est égal à $\pi R^2 h$. Finalement, le flux total cherché est $2\pi R h + \pi R^2 h = \pi R h(2 + R)$.

Nous allons maintenant relier les intégrales sur une surface fermée à certaines intégrales triples. Ce sera une généralisation du théorème de Green pour les intégrales curvilignes. Rappelons que, pour un champ différentiable de vecteurs

$$\vec{F}(x, y, z) = (M(x, y, z), N(x, y, z), P(x, y, z)),$$

la divergence de $\vec{F}(x, y, z)$ est la fonction réelle définie par

$$\text{div } \vec{F}(x, y, z) = \frac{\partial M}{\partial x}(x, y, z) + \frac{\partial N}{\partial y}(x, y, z) + \frac{\partial P}{\partial z}(x, y, z).$$

On peut alors énoncer l'un des plus importants résultats de l'Analyse Vectorielle :

Théorème (de la divergence de Gauss)

Soit $\vec{F}(x, y, z)$ un champ de vecteurs ayant des dérivées partielles

continues sur un domaine \mathbf{S} de \mathbf{R}^3 . Alors

$$\iint_{\partial\mathbf{S}} \vec{F} \cdot \vec{n} d\sigma = \iiint_{\mathbf{S}} \operatorname{div} \vec{F} \, dx dy dz$$

où \vec{n} désigne le vecteur unité normal extérieur à $\partial\mathbf{S}$.

11

ANALYSE DE FOURIER

11.1. SERIES DE FOURIER

La théorie des séries de Fourier joue un rôle prépondérant en Mathématiques. Le développement en série de Fourier correspond, en physique, à la décomposition d'un phénomène périodique compliqué en une somme d'oscillations «pures». Dans la théorie de la lumière, par exemple, la superposition de différentes fréquences peut être résolue en ses couleurs fondamentales lors du passage à travers un prisme. En acoustique, l'oreille humaine ou animale résout les ondes acoustiques en leurs fréquences individuelles (hauteur du son ou tonalité). Plus récemment, la théorie des séries et des transformées de Fourier a été appliquée à de nouvelles techniques comme la spectroscopie et l'imagerie.

An niveau mathématique, on peut grâce aux développements de Fourier obtenir, par des méthodes élémentaires, des résultats difficiles à vérifier par d'autres approches. D'un point de vue fondamental, les travaux de Fourier ont ainsi amené un élargissement du concept de fonction. En effet, pour les prédécesseurs de Fourier, une fonction devait être représentable par une *seule* expression analytique. Une autre conséquence a été de montrer qu'on peut représenter certaines fonctions par une série *sur tout un intervalle* alors que le développement obtenu auparavant par le mathématicien anglais Brook Taylor (1685-1731) ne représentait une fonction qu'au voisinage d'un point.

11.1.1. Définitions

Dans ce chapitre, nous conviendrons d'appeler *fonction périodique* toute fonction $f(x)$ telle que:

$$f(x + 2\pi) = f(x)$$

C'est dans un ouvrage important sur la «Théorie Analytique de la Chaleur», publié en 1822, que Joseph FOURIER (1768-1830), Bénédictin, puis Mathématicien Physicien, et Préfet Français à Grenoble présente ses idées fondamentales sur les séries qui portent son nom. Dans cet ouvrage, Fourier démontre que si une fonction est périodique avec une période égale à 2π , si son intégrale sur la période est finie et si elle possède un nombre fini de discontinuités, elle peut être décomposée en une série (la série de Fourier) définie par la relation :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + a_1 \cos(x) + a_2 \cos(2x) + a_3 \cos(3x) + a_4 \cos(4x) + \dots \\ &\quad + b_1 \sin(x) + b_2 \sin(2x) + b_3 \sin(3x) + b_4 \sin(4x) + \dots \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} \end{aligned}$$

Dans son ouvrage, Fourier donne aussi les expressions intégrales des coefficients que nous déduirons plus tard sans en fournir une preuve mathématique complète.

L'idée d'un tel développement en fonctions trigonométriques avait été ébauchée par Daniel Bernouilli (1700-1782, membre d'une famille suisse originaire d'Anvers qui a fourni à cette époque une dizaine de mathématiciens; «Sur les cordes Vibrantes», 1753). De même, Clairaut et Euler avaient obtenu antérieurement de tels développements pour des fonctions particulières.

Remarques

- (i) La série de Fourier $f(x)$ définie précédemment est périodique avec la période 2π ; en effet :

$$\begin{aligned} f(x + m2\pi) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n[x + m2\pi]) + b_n \sin(n[x + m2\pi])\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} \\ &= f(x) \end{aligned}$$

- (ii) Une autre forme de série de Fourier est parfois utilisée dans la littérature scientifique; elle introduit la notion de phase :

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(nx + \theta_n)$$

Elle peut être obtenue à partir de la forme précédente en posant :

$$a_n = \lambda_n \sin(\theta_n)$$

$$b_n = \lambda_n \cos(\theta_n)$$

ou, enfin :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{\lambda_n \sin(\theta_n) \cos(nx) + \lambda_n \cos(\theta_n) \sin(nx)\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sin(nx + \theta_n) \end{aligned}$$

11.1.2. Détermination des coefficients de Fourier

La détermination des coefficients de Fourier, a_n et b_n , nécessite le rappel des relations trigonométriques et des intégrales définies résumées dans le tableau suivant :

$\sin(a)\sin(b) = \frac{1}{2} \{\cos(a-b) - \cos(a+b)\}$ $\cos(a)\cos(b) = \frac{1}{2} \{\cos(a-b) + \cos(a+b)\}$ $\sin(a)\cos(b) = \frac{1}{2} \{\sin(a-b) + \sin(a+b)\}$
<p>si p est entier :</p>

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos(px) dx = 0$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos^2(px) dx = \pi$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin(px) dx = 0$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin^2(px) dx = \pi$$

si p et q sont entiers et différents :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos(px)\cos(qx) dx = 0$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin(px)\sin(qx) dx = 0$$

si p et q sont entiers :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \sin(px)\cos(qx) dx = 0$$

Les coefficients a_0 , $\{a_n\}$ et $\{b_n\}$ se déterminent aisément par quelques intégrales définies.

Par exemple, soit le développement en série de Fourier :

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

en intégrant entre $-\pi$ et $+\pi$, on obtient :

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

Dans ce développement, seul le premier terme subsiste avec le résultat :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx = \frac{a_0}{2} 2\pi$$

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx$$

Le développement en série de Fourier :

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

multiplié par $\cos(mx)$ et intégré entre $-\pi$ et $+\pi$ fournit la relation :

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos(mx) dx &= \frac{a_0}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(mx) dx \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(nx) \cos(mx) dx \right. \\ &\quad \left. + b_n \int_{-\pi}^{+\pi} \sin(nx) \cos(mx) dx \right\} \end{aligned}$$

Dans le membre de droite, tous les termes sont nuls, excepté celui où $\cos(nx) = \cos(mx)$, c'est-à-dire où $n = m$; dans ces conditions :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos(mx) dx = a_m \pi$$

$$\boxed{a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos(mx) dx}$$

En multipliant la série de Fourier par $\sin(mx)$ et en intégrant entre $-\pi$ et $+\pi$, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin(mx) dx &= \frac{a_0}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \sin(mx) dx \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(nx) \sin(mx) dx \right. \\ &\quad \left. + b_n \int_{-\pi}^{+\pi} \sin(nx) \sin(mx) dx \right\} \end{aligned}$$

Dans le membre de droite, seul le terme où $\sin(nx)$ est égal à $\sin(mx)$ (soit $n = m$) sera différent de zéro. On en tire :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin(mx) dx = b_m \pi$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin(mx) dx$$

Exemple 1

L'exemple choisi ici nous servira par la suite dans l'étude des relations entre séries et transformées de Fourier et leur utilisation contemporaine dans les méthodes spectroscopiques. Il s'agit du premier exemple que nous rencontrons d'une impulsion rectangulaire choisie ici de période 2π et de largeur π . C'est la fonction $f(x)$ représentée dans la figure 11.1 et définie mathématiquement par les conditions:

$$\begin{aligned} f(x) &= 0 & -\pi \leq x \leq -\frac{\pi}{2} \\ f(x) &= 0 & +\frac{\pi}{2} \leq x \leq +\pi \\ f(x) &= 1 & -\frac{\pi}{2} \leq x \leq +\frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

INSERER FIGURE 11.1

Figure 11.1 - Train d'impulsion rectangulaire de largeur π et de période 2π .

On en tire les coefficients :

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{-\pi/2} 0 dx + \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 1 dx + \frac{1}{\pi} \int_{+\pi/2}^{+\pi} 0 dx \\ &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos(mx) dx \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 1 \cos(mx) dx \\
 &= \frac{2}{m\pi} \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin(mx) dx \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 1 \sin(mx) dx \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Le développement en série de Fourier est ainsi explicitement :

$$f(x) = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \left\{ \cos(x) - \frac{1}{3} \cos(3x) + \frac{1}{5} \cos(5x) - \frac{1}{7} \cos(7x) + \frac{1}{9} \cos(9x) + \dots \right\}$$

La figure 11.2 reprend le tracé de sept fonctions différentes : les quatre premières composantes et trois développements en série de Fourier limités à quelques termes.

INSERER FIGURE 11.2

Figure 11.2 : Premières composantes et premières résultantes du développement en série de Fourier d'une impulsion rectangulaire.

$$(a) = \frac{1}{2}$$

$$(b) = \cos(x) \quad (b') = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \{ \cos(x) \}$$

$$(c) = \cos(3x) \quad (c') = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \left\{ \cos(x) - \frac{1}{3} \cos(3x) \right\}$$

$$(d) = \cos(5x) \quad (d') = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \left\{ \cos(x) - \frac{1}{3} \cos(3x) + \frac{1}{5} \cos(5x) \right\}$$

Exemple 2

Le second exemple choisi est celui de la fonction créneau régulière de largeur 2π . Elle représentée dans la figure 11.3. Mathématiquement, elle est définie par :

$$\begin{aligned} f(x) &= -1 & -\pi \leq x \leq 0 \\ f(x) &= +1 & 0 \leq x \leq \pi \end{aligned}$$

INSERER FIGURE 11.3

Figure 11.3 : Fonction créneau régulière de largeur 2π

On en tire les coefficients :

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 (-1) dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\pi} (+1) dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos(mx) dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 (-1) \cos(mx) dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\pi} (+1) \cos(mx) dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_m &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \sin(mx) dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 (-1) \sin(mx) dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\pi} (+1) \sin(mx) dx \\ &= \frac{2}{m\pi} \{1 - \cos(m\pi)\} \\ &= \frac{2}{m\pi} \{1 - (-1)^m\} \end{aligned}$$

Le développement en série de Fourier est ainsi explicitement :

$$f(x) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - \cos(n\pi)}{n} \sin(nx)$$

$$= \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) + \frac{1}{7} \sin(7x) + \dots \right\}$$

La figure 11.4 reprend le tracé de sept fonctions différentes : les cinq premières composantes et quatre développements en série de Fourier limités à quelques termes.

INSERER FIGURE 11.4

Figure 11.4 : Premières composantes et premières résultantes du développement en série de Fourier de la fonction créneau régulière de largeur π .

$$(a) = \frac{4}{\pi} \sin(x)$$

$$(b) = \frac{4}{3\pi} \sin(3x)$$

$$(c) = \frac{4}{5\pi} \sin(5x)$$

$$(d) = \frac{4}{7\pi} \sin(7x)$$

$$(e) = \frac{4}{9\pi} \sin(9x)$$

$$(b') = \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) \right\}$$

$$(c') = \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) \right\}$$

$$(d') = \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) + \frac{1}{7} \sin(7x) \right\}$$

$$(e') = \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) + \frac{1}{7} \sin(7x) + \frac{1}{9} \sin(9x) \right\}$$

11.1.3. Calcul d'erreur dans les séries de Fourier finies

Toute fonction périodique satisfaisant les conditions citées au paragraphe 11.1.1 peut être décomposée en une série infinie de Fourier :

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

Il est donc raisonnable d'espérer approcher correctement la fonction $f(x)$ par un développement fini limité à N termes :

$$f(x) \approx S_N = \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{n=1}^N \{\alpha_n \cos(nx) + \beta_n \sin(nx)\}$$

Il est aisé de démontrer que les coefficients α_0 , α_n et β_n , qui minimisent l'erreur quadratique moyenne sont, en fait, les coefficients a_0 , a_n et b_n du développement infini. Ce théorème se démontre en calculant l'erreur quadratique moyenne :

$$R_N = \int_{-\pi}^{+\pi} |f(x) - S_N(x)|^2 dx$$

En utilisant les développements de $f(x)$ et $S_N(x)$, on obtient les expressions :

$$R_N = \int_{-\pi}^{+\pi} f^2(x) dx - 2 \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) S_N(x) dx + \int_{-\pi}^{+\pi} S_N^2(x) dx$$

avec

$$\int_{-\pi}^{+\pi} f^2(x) dx = N^2$$

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{+\pi} S_N^2(x) dx &= \frac{\alpha_0^2}{4} \int_{-\pi}^{+\pi} dx \\ &+ \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \int_{-\pi}^{+\pi} \{\alpha_n \cos(nx) + \beta_n \sin(nx)\} \{\alpha_m \cos(mx) + \beta_m \sin(mx)\} dx \\ &+ \alpha_0 \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{+\pi} \{\alpha_n \cos(nx) + \beta_n \sin(nx)\} dx \\ &= \frac{\alpha_0^2}{4} 2\pi + \sum_{m=1}^N (\alpha_n^2 + \beta_n^2) \pi \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 \int_{-\pi}^{+\pi} f(x)S_N(x)dx &= \frac{a_0\alpha_0}{4} \int_{-\pi}^{+\pi} dx \\
 &+ \frac{\alpha_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} dx \\
 &+ \frac{a_0}{2} \sum_{n=1}^N \{\alpha_n \cos(nx) + \beta_n \sin(nx)\} dx \\
 &+ \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{\infty} \int_{-\pi}^{+\pi} \{\alpha_n \cos(nx) + \beta_n \sin(nx)\} \{a_m \cos(mx) + b_m \sin(mx)\} dx \\
 &= \frac{\alpha_0 a_0}{4} 2\pi + \sum_{m=1}^N (\alpha_n a_n + \beta_n b_n) \pi
 \end{aligned}$$

L'expression de l'erreur est, à ce moment :

$$R_N = N^2 + \frac{\pi}{2} (\alpha_0^2 - 2a_0\alpha_0) + \pi \sum_{n=1}^N (\alpha_n^2 + \beta_n^2 - 2a_n\alpha_n - 2b_n\beta_n)$$

L'expression de l'erreur quadratique moyenne est minimisée par rapport aux coefficients du développement limité si :

$$\frac{\delta R_N}{\delta \alpha_0} = 0 = 2\alpha_0 - 2a_0$$

$$\frac{\delta R_N}{\delta \alpha_p} = 0 = 2\alpha_p - 2a_p$$

$$\frac{\delta R_N}{\delta \beta_p} = 0 = 2\beta_p - 2b_p$$

ou, en d'autres termes, si les coefficients α_0 , α_p et β_p du développement limité sont égaux aux coefficients a_0 , a_p et b_p de la série infinie. Dans ces conditions ($\alpha_0 = a_0$, $\alpha_p = a_p$ et $\beta_p = b_p$), l'erreur quadratique moyenne est donnée par la relation :

$$R_N = \int_{-\pi}^{+\pi} f^2(x) dx - \frac{\pi}{2} a_0^2 - \pi \sum_{n=1}^N (a_n^2 + b_n^2)$$

C'est le mathématicien allemand Gustave Lejeune-Dirichlet (1805-1859; élève de Gauss) qui énonça le premier un ensemble de conditions suffisantes pour qu'en chaque point x , la série de Fourier de $f(x)$ converge et que sa limite soit égale à $f(x)$. Ses travaux furent continués par Bernhard Riemann (1826-1866). Afin d'étendre l'utilisation des séries de Fourier à des fonctions de plus en plus irrégulières, voire pathologiques, Riemann a été amené à reconsidérer la notion d'intégrale définie, formulée par Cauchy pour des fonctions continues, et à la généraliser à des fonctions bornées sur un intervalle fermé et borné de \mathbf{R} . Cette généralisation est ce qu'on appelle aujourd'hui l'intégrale de Riemann.

Notons que les propriétés mathématiques des séries de Fourier sont relativement subtiles et que le lecteur intéressé par les traitements exceptionnels devra être prudent vis-à-vis de certaines licences prises dans cet exposé. Ajoutons que l'étude détaillée des problèmes posés par la théorie des séries de Fourier a été l'une des principales raisons pour lesquelles les Mathématiciens du XIXème siècle et du début du XXème siècle ont développé la théorie moderne des fonctions et de l'intégration, aussi bien que celle des espaces fonctionnels. C'est le cas, notamment, de la théorie des espaces de Hilbert qui joue maintenant un rôle fondamental en mathématique et dans ses applications. C'est dire que les considérations de cet exposé ne sont évidemment que des trivialisés en regard de la vraie théorie des série de Fourier. Néanmoins, dans 99.9 % des cas rencontrés en chimie, elles sont suffisantes.

Exemple 1

Dans la série de Fourier, résolue dans l'exemple 1 du paragraphe 11.1.2, si on calcule l'erreur quadratique, on obtient explicitement :

$$R_0 = \int_{-\pi}^{+\pi} f^2(x) dx - \frac{\pi}{2} a_0^2 = \pi - \frac{\pi}{2} = \frac{\pi}{2} = 1.57079$$

$$R_1 = R_2 = \frac{\pi}{2} - \pi a_1^2 = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} = 0.29756$$

$$R_3 = R_4 = \frac{\pi}{2} - \pi(a_1^2 + a_3^2) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} - \frac{4}{9\pi} = 0.15608$$

$$R_5 = R_6 = \frac{\pi}{2} - \pi(a_1^2 + a_3^2 + a_5^2) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} - \frac{4}{9\pi} - \frac{4}{25\pi} = 0.105515$$

$$R_7 = R_8 = \frac{\pi}{2} - \pi(a_1^2 + a_3^2 + a_5^2 + a_7^2) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} - \frac{4}{9\pi} - \frac{4}{25\pi} - \frac{4}{49\pi} = 0.07917$$

$$R_9 = R_{10} = \frac{\pi}{2} - \pi(a_1^2 + a_3^2 + a_5^2 + a_7^2 + a_9^2) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} - \frac{4}{9\pi} - \frac{4}{25\pi} - \frac{4}{49\pi} - \frac{4}{81\pi} = 0.06345$$

On constate, comme on s'y attendait, que l'erreur quadratique diminue avec l'augmentation du nombre de termes dans la série de Fourier.

Dans le même sens, pour l'exemple 2 du même paragraphe, l'erreur quadratique est :

$$\begin{aligned} R_N &= 2\pi - \pi \sum_{n=1}^N b_n^2 \\ &= 2\pi - \frac{16}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{1 - (-1)^n}{2} \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

Dans certains cas, un nombre limité de termes (N) suffit à représenter *exactement* la fonction à développer; à ce moment, l'erreur quadratique sera donc nulle pour ce nombre N de termes du développement.

Exemple 2

La fonction $f(x) = \sin^5(x)$ possède un développement en série de Fourier exact limité à 3 termes :

$$f(x) = \sin^5(x) = \frac{5}{8} \sin(x) - \frac{5}{16} \sin(3x) + \frac{1}{16} \sin(5x)$$

l'erreur quadratique est donnée par :

$$R_N = \int_{-\pi}^{+\pi} \sin^{10}(x) dx - \pi \sum_{n=1}^N b_n^2 = \frac{126}{256} \pi - \pi \sum_{n=1}^N b_n^2$$

Erreur pour le développement, $S_1(x) = \frac{5}{8} \sin(x)$:

$$R_1 = \pi \left\{ \frac{126}{256} - \left[\frac{5}{8} \right]^2 \right\} = 0.032$$

Erreur pour le développement, $S_3(x) = \frac{5}{8} \sin(x) - \frac{5}{16} \sin(3x)$:

$$R_3 = \pi \left\{ \frac{126}{256} - \left[\frac{5}{8} \right]^2 - \left[\frac{5}{16} \right]^2 \right\} = 0.012$$

Erreur pour le développement, $S_5(x) = \frac{5}{8} \sin(x) - \frac{5}{16} \sin(3x) + \frac{1}{16} \sin(5x)$:

$$R_5 = \pi \left\{ \frac{126}{256} - \left[\frac{5}{8} \right]^2 - \left[\frac{5}{16} \right]^2 - \left[\frac{1}{16} \right]^2 \right\} = 0$$

11.1.4. Développement de fonctions paires et impaires

Dans le cas de comportements particuliers, il n'est pas indispensable de déterminer l'ensemble des coefficients a_0 , a_n et b_n , ainsi, pour des fonctions paires $\{f(x) = f(-x)\}$, le développement en série à considérer sera :

$$f(x) = f(-x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx)$$

En effet, si la fonction est paire, les deux relations :

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

et

$$\begin{aligned} f(-x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(-nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(-nx) \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx) \end{aligned}$$

impliquent que les coefficients $\{b_n\}$ soient nuls.

Dans des fonctions *impaires* $\{f(x) = -f(-x)\}$, le développement sera :

$$f(x) = -f(-x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx)$$

En effet, si la fonction est impaire, on a la relation :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx) \\ &= -f(-x) = -\frac{a_0}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(-nx) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(-nx) \\ &= -\frac{a_0}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx) \end{aligned}$$

a_0 et $\{a_n\}$ sont nuls.

11.1.5. Série de Fourier de période T quelconque

En toute généralité, une fonction périodique est caractérisée par une période quelconque T qui n'est pas nécessairement égale à la période 2π étudiée dans les paragraphes précédents :

$$f(t) = f(t + nT)$$

Par le changement de variable, qui permet de définir la pulsation ω :

$$x = \omega t = \frac{2\pi}{T} t = 2\pi \nu t$$

on transforme la fonction $f(t)$ de période T en une fonction $F(x)$ de période 2π :

$$f(t) = f\left(\frac{xT}{2\pi}\right) = F(x)$$

La fonction $F(x)$ de période 2π se développe en série de Fourier :

$$F(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\}$$

avec

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) dx$$

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) \cos(mx) dx$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) \sin(mx) dx$$

Par le changement de variable, $x = 2\pi t / T$, $dx = 2\pi dt / T$, on obtient :

$$f(t) = F(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \cos\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) + b_n \sin\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) \right\}$$

ou en posant

$$\begin{cases} \omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu \\ f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)\} \end{cases}$$

On en tire également :

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) dx = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt$$

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) \cos(mx) dx = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(m\omega t) dt$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} F(x) \sin(mx) dx = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(mx) dt$$

Exemple

Prenons l'exemple de l'étude d'un train d'impulsion de largeur $\tau_0 / 2$ et de période T . Pour déclencher un circuit de balayage, on utilise souvent une impulsion de courte durée $\tau_0 / 2$ et de forte pente, représentée dans la figure 11.5.

INSERER FIGURE 11.5

Figure 11.5 : Représentation de deux trains d'impulsion différents de période T et de largeur d'impulsion $\tau_0 / 2$

$$(a) T = 2(\tau_0 / 2)$$

$$(b) T = 3(\tau_0 / 2)$$

Ces deux trains d'impulsion sont représentés par les définitions :

$$f(t) = 0 \quad \text{si} \quad -\frac{T}{2} \leq x \leq -\frac{\tau_0}{4} \quad \text{et} \quad +\frac{\tau_0}{4} \leq x \leq +\frac{T}{2}$$

$$f(t) = 1 \quad \text{si} \quad -\frac{\tau_0}{4} \leq x \leq +\frac{\tau_0}{4}$$

L'analyse de Fourier de cette fonction *paire* nous donne

$$a_0 = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt = \frac{2}{T} \int_{-\tau_0/4}^{+\tau_0/4} dt = \frac{\tau_0}{T}$$

$$a_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(n\omega t) dt = \frac{2}{T} \int_{-\tau_0/4}^{+\tau_0/4} \cos(n\omega t) dt$$

$$= \frac{4}{n\omega T} \sin \frac{n\omega \tau_0}{4} = \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi \tau_0}{2T}$$

$$b_n = 0$$

La courbe de l'amplitude des coefficients a_n est représentée dans la figure 11.6 pour une valeur de $T = \tau_0$.

INSERER FIGURE 11.6

Figure 11.6 : Evolution de l'amplitude des coefficients a_n d'une impulsion rectangulaire de période T et de largeur $\tau_0 / 2$ pour une valeur de $T = \tau_0$.

Nous utiliserons, de façon détaillée, les résultats de ce paragraphe lorsque nous discuterons l'utilisation des séries de Fourier en spectroscopie. Dès maintenant, on notera cependant comme analyse préliminaire de cette application :

1. Les coefficients a_n varient en fonction de n comme la fonction $\sin(x/x)$. Les coefficients sont positifs jusqu'à la valeur $n = 2T / \tau_0$, puis négatifs jusque $n = 4T / \tau_0$. Ensuite, ils alternent pour des valeurs de l'ordonnée égales à $2T / \tau_0$.
2. Lorsque l'impulsion est très étroite, le spectre des coefficients a_n est très large. En effet, le développement en série de la fonction sinus :

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

donne, lorsque $\tau_0 \rightarrow 0$:

$$a_n \cong \frac{2}{n\pi} \cdot \frac{n\pi\tau_0}{2T} = \frac{\tau_0}{T}$$

Les coefficients sont pratiquement constants. En conséquence, pour reproduire une impulsion de très courte durée, il faut donc mettre en jeu des fréquences s'étalant sur un large spectre.

3. Lorsque la période T est égale à 2π et que l'impulsion couvre une demi période ($\tau_0 / 2 = \pi$), on retrouve les résultats déjà acquis précédemment :

$$a_0 = \frac{\tau_0}{T} = 1$$

$$a_n = \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi\tau_0}{2T} = \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}$$

11.1.6. Forme exponentielle de séries de Fourier

Beaucoup d'auteurs et plus particulièrement les auteurs de manuels destinés à l'utilisation pratique continuent à utiliser le développement trigonométrique des séries de Fourier. Dans de nombreuses applications, il est, pourtant, avantageux de formuler les séries de Fourier sous une forme exponentielle, l'usage des exponentielles simplifie les calculs, essentiellement parce que la formule d'addition :

$$e^{x+y} = e^x e^y$$

de la fonction exponentielle est plus simple que celle des fonctions trigonométriques :

$$\cos(x + y) = \cos x \cdot \cos y - \sin x \cdot \sin y$$

$$\sin(x + y) = \sin x \cdot \cos y + \cos x \cdot \sin y$$

Les fonctions exponentielles e^{ikx} possèdent des propriétés très simples, mais d'utilisations universelles, à savoir :

$$e^{ik(x+y)} = e^{ikx} \cdot e^{iky}$$

$$e^{ipx} \cdot e^{iqx} = e^{i(p+q)x}$$

$$\frac{1}{e^{ikx}} = e^{-ikx} = e^{ik(-x)} = (e^{ikx})^*$$

$$|e^{ikx}| = 1$$

La transformation d'une série de Fourier trigonométrique en série de Fourier exponentielle est effectuée en utilisant les deux polynômes trigonométriques :

$$\cos(n\omega t) = \frac{e^{in\omega t} + e^{-in\omega t}}{2}$$

et

$$\sin(n\omega t) = \frac{e^{in\omega t} - e^{-in\omega t}}{2i}$$

On en tire sans difficulté :

$$\begin{aligned}
 f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)\} \\
 &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \frac{e^{in\omega t} + e^{-in\omega t}}{2} + b_n \frac{e^{in\omega t} - e^{-in\omega t}}{2i} \right\} \\
 &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n - ib_n}{2} e^{in\omega t} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n + ib_n}{2} e^{-in\omega t} \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega t}
 \end{aligned}$$

où nous posons :

$$\begin{aligned}
 c_0 &= \frac{a_0}{2} \\
 c_n &= \frac{a_n - ib_n}{2} \\
 c_{-n} &= \frac{a_n + ib_n}{2}
 \end{aligned}$$

les coefficients, c_0 , c_n et c_{-n} s'obtiennent directement par les relations :

$$\begin{aligned}
 c_0 &= \frac{a_0}{2} \\
 &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 c_n &= \frac{a_n - ib_n}{2} \\
 &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(n\omega t) dt - i \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt \\
 &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega t} dt
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 c_{-n} &= \frac{a_n + ib_n}{2} \\
 &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{in\omega t} dt
 \end{aligned}$$

Les trois relations précédentes peuvent être condensées dans l'expression :

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega t} dt$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Dans le cas de fonctions périodiques de période 2π , on déduit les relations équivalentes :

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx}$$

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Exemple

Le train d'impulsion de période 2π et de largeur π étudié précédemment aura un développement en série d'exponentielles imaginaires caractérisé par :

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) e^{-inx} dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} e^{-inx} dx$$

soit $c_0 = \frac{1}{2}$

$$c_n = \frac{1}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}$$

le développement exponentiel est similaire à celui obtenu précédemment :

$$f(x) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{c_n e^{inx} + c_{-n} e^{-inx}\}$$

$$= \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} (e^{inx} + e^{-inx})$$

$$= \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} \cos(nx)$$

Exemple alternatif

Développer en série de Fourier exponentielle, la fonction de période T définie par:

$$f(t) = 0 \quad \begin{cases} -\frac{T}{2} \leq t \leq -\frac{T}{2} + \varepsilon \\ \frac{T}{2} - \varepsilon \leq t \leq \frac{T}{2} \end{cases}$$

$$f(t) = -1 \quad -\frac{T}{2} + \varepsilon \leq t \leq 0$$

$$f(t) = 1 \quad 0 \leq t \leq \frac{T}{2} - \varepsilon$$

Notez que la fonction est équivalente à celle de l'exemple 2 du paragraphe 11.1.2 si $\varepsilon = 0$ et si la période T est égale à 2π . On trouve :

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega t} dt \\ &= \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{-\frac{T}{2}+\varepsilon} (0) e^{-in\omega t} dt + \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}+\varepsilon}^0 (-1) e^{-in\omega t} dt \\ &\quad + \frac{1}{T} \int_0^{\frac{T}{2}-\varepsilon} (+1) e^{-in\omega t} dt + \frac{1}{T} \int_{\frac{T}{2}-\varepsilon}^{\frac{T}{2}} (0) e^{-in\omega t} dt \\ &= \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}+\varepsilon}^0 (-1) e^{-in\omega t} dt + \frac{1}{T} \int_0^{\frac{T}{2}-\varepsilon} (+1) e^{-in\omega t} dt \\ &= \frac{1}{in\omega T} \left\{ 2 - 2 \frac{e^{+in\omega[\frac{T}{2}-\varepsilon]} + e^{-in\omega[\frac{T}{2}-\varepsilon]}}{2} \right\} \\ &= \frac{1}{in\omega T} \left\{ 2 - 2 \cos \left(n\omega \left[\frac{T}{2} - \varepsilon \right] \right) \right\} \end{aligned}$$

dans le cas où $\varepsilon = 0$, on obtient:

$$c_n = \frac{1}{in2\pi} \{ 2 - 2 \cos(n\pi) \}$$

d'où la série s'écrit en remplaçant t par x par souci de cohésion avec l'exemple 2 du paragraphe 11.1.2 :

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \{c_n e^{inx} + c_{-n} e^{-inx}\} \\
 &= c_1 e^{inx} + c_{-1} e^{-inx} + c_3 e^{inx} + c_{-3} e^{-inx} + c_5 e^{inx} + c_{-5} e^{-inx} + c_7 e^{inx} + c_{-7} e^{-inx} + \dots \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2 - 2 \cos(n\pi)) \left(\frac{1}{in2\pi} e^{inx} - \frac{1}{in2\pi} e^{-inx} \right) \right\} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 - 2 \cos(n\pi)}{n\pi} \cdot \frac{e^{inx} - e^{-inx}}{2i} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 - 2 \cos(n\pi)}{n\pi} \sin(nx)
 \end{aligned}$$

soit le résultat obtenu précédemment :

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \left\{ \sin(x) + \frac{1}{3} \sin(3x) + \frac{1}{5} \sin(5x) + \frac{1}{7} \sin(7x) + \dots \right\}$$

11.1.7. Théorème de PARSEVAL

Théorème

Le théorème de PARSEVAL établit que si $f(t)$ est une fonction périodique réelle, on a la relation :

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} |f|^2(t) dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2$$

où les coefficients $\{c_n\}$ sont les coefficients d'une série de Fourier sous forme exponentielle.

Le théorème se démontre aisément en utilisant le développement en série de Fourier :

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega t}$$

$$f^*(t)f(t) = |f(t)|^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_n^2 c_m e^{-in\omega t} e^{im\omega t}$$

En intégrant sur la période T et en notant que :

$$\int_{-T/2}^{+T/2} e^{-i(n-m)\omega t} dt = T \delta_{nm}$$

on démontre le théorème :

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{+T/2} |f|^2(t) dt &= T \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^* c_n \\ &= T \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 \end{aligned}$$

sous forme d'une série de Fourier réelle développée en sinus et cosinus, on aura :

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} |f|^2(t) dt = \frac{1}{2} a_0^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (a_n^2 + b_n^2)$$

Application

Le théorème de PARSEVAL nous a servi implicitement dans le calcul de l'erreur due à une limitation de la série de FOURIER comme nous l'avons démontré au paragraphe 11.1.3. Il permet également d'évaluer certaines sommes de développements infinis. Ainsi, on peut démontrer que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \frac{1}{16} + \dots = \frac{\pi^2}{6}$$

En effet, le développement en série de Fourier exponentielle de la fonction $f(t) = t$ périodique sur l'intervalle $-1, +1$ fournit les coefficients c_n :

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} t e^{-in\pi t} dt \end{aligned}$$

avec le résultat :

$$\begin{aligned} c_0 &= 0 \\ c_n &= \frac{-1}{n\pi i} \cos(n\pi) = \frac{-1}{n\pi i} (-1)^n \\ &= \frac{i}{n\pi} \cos(n\pi) = \frac{i}{n\pi} (-1)^n \end{aligned}$$

le théorème de PARSEVAL établi, à ce moment, que :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} t^2 dt &= \frac{1}{3} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} 2c_n^2 c_n = \sum_{n=1}^{\infty} 2 \frac{i}{n\pi} \frac{-i}{n\pi} \\ &= \frac{2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

d'où :

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

11.1.8. Séries de Fourier comme développements en série de fonctions orthogonales

Approche «à la Von Neumann»

La plupart des théorèmes que nous venons de démontrer ne sont, en fait, que des cas particuliers de développements en série de fonctions orthogonales. A titre d'exemple, nous montrons ci-dessous quelques cas de fonctions de période égale à 2π . L'extension aux périodes quelconques est triviale.

Montrons que, sur l'intervalle $-\pi, +\pi$, le développement :

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx}$$

est un développement en fonctions de bases orthogonales, définissons :

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= e^{inx} \\ \phi_n^*(x) &= e^{-inx} \end{aligned}$$

On en tire :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = N \delta_{nm}$$

La base des fonctions $\{\phi_n(x)\}$ constitue donc une base orthogonale.

En effet,

si $m \neq n$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx &= \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-imx} e^{inx} dx \\
 &= \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-i(m-n)x} dx \\
 &= -\frac{1}{i(m-n)} \int_{+i(m-n)\pi}^{-i(m-n)\pi} e^u du \\
 &= \left[\frac{1.2}{i(m-n)} \right] \left[\frac{e^{-i(m-n)\pi} - e^{+i(m-n)\pi}}{2} \right] \\
 &= \left(\frac{1.2}{i(m-n)} \right) \sin[(m-n)\pi] \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

si $m = n$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) \phi_m(x) dx &= \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-imx} e^{imx} dx \\
 &= \int_{-\pi}^{+\pi} dx \\
 &= 2\pi
 \end{aligned}$$

d'où, en toute généralité :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = 2\pi \delta_{nm}$$

Notons que les relations d'orthogonalité précédentes sont analogues à celles que vérifient les vecteurs unités d'un système de coordonnées rectangulaires dans le plan ou dans l'espace. Le calcul des coefficients de Fourier se démontre maintenant directement, si :

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

nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) f(x) dx &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n 2\pi \delta_{nm} \\ &= c_m 2\pi \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} c_m &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \phi_m^*(x) f(x) dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-imx} f(x) dx \end{aligned}$$

Approche «à la DIRAC»

$$\begin{aligned} |f\rangle &= \sum_n c_n |\phi_n\rangle \\ \langle \phi_m | \phi_n \rangle &= 2\pi \delta_{nm} \\ \langle \phi_m | f \rangle &= \sum_n c_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle \\ &= \sum_n c_n 2\pi \delta_{nm} \\ &= c_m 2\pi \\ c_m &= \frac{1}{2\pi} \langle \phi_m | f \rangle = \frac{\langle \phi_m | f \rangle}{\langle \phi_m | \phi_m \rangle} \end{aligned}$$

11.2. TRANSFORMEE DE FOURIER

11.2.1. Définitions

La notion de transformation de Fourier correspond, physiquement, à la notion de série de Fourier d'une fonction non périodique. Supposons une fonction $f(t)$ de période T . Lorsque T tend vers l'infini, la fonction $f(t)$ perd son caractère périodique. Dans ces conditions, la série de Fourier est remplacée par l'intégrale de Fourier. En effet, partant des relations

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{+in\omega_0 t}$$

et

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega_0 t} dt$$

avec

$$\omega_0 = \frac{2\pi}{T}$$

on obtient la forme :

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega_0 t} dt \right] \omega_0 e^{in\omega_0 t}$$

Lorsque la période T tend vers l'infini, la pulsation ω_0 devient infiniment petite; dans ces conditions, les points discrets $n\omega_0$ correspondent à une variable continue ω et leur intervalle ω_0 à $\Delta\omega$. A la limite $T \rightarrow \infty$, $n\omega_0 = \omega$, $\omega_0 = \Delta\omega \rightarrow d\omega$, la sommation devient une intégration et l'expression précédente sera :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \right] e^{i\omega t} d\omega$$

d'où on définit les relations de transformation de Fourier :

$$\boxed{F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega}$$

Notons que, dans certains manuels, le facteur $1/2\pi$ est parfois symétrisé entre les deux transformées couplées.

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt \quad f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$

Il faut également signaler que, dans d'autres approches, la transformée de Fourier est déterminée à partir du développement trigonométrique et fait, à ce moment, intervenir des composantes de Fourier appelée intégrales de Fourier ou transformées de Fourier en sinus et en cosinus. Dans ce cas, les limites d'intégration sont de 0 à ∞ ; elles proviennent, en effet, des sommations initiales de 1 à ∞ .

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)\} \\ &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \omega_0 \left\{ \left[\int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(n\omega_0 t) dt \right] \cos(n\omega_0 t) \right. \\ &\quad \left. + \left[\int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(n\omega_0 t) dt \right] \sin(n\omega_0 t) \right\} \end{aligned}$$

Comme précédemment, à la limite $T \rightarrow \infty$, $n\omega_0 = \omega$, $\omega_0 = \Delta\omega \rightarrow d\omega$, la sommation devient une intégration, le premier terme tend vers zéro et on obtient une autre forme de l'expression intégrale de Fourier :

$$f(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \{A(\omega) \cos(\omega t) + B(\omega) \sin(\omega t)\} d\omega$$

$$A(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cos(\omega t) dt$$

$$B(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \sin(\omega t) dt$$

11.2.2. Propriétés des transformées de Fourier

Dans ce paragraphe, nous décrivons un ensemble de propriétés des transformées de Fourier qui sont utiles dans les situations pratiques.

Additivité

La transformée de Fourier possède les propriétés de l'addition linéaire. Ceci découle de la définition de la transformée de Fourier et des propriétés élémentaires de l'intégration. Dans la loi de Beer en chimie, par exemple, cette caractéristique se manifeste par le fait qu'un mélange de composants produit un spectre qui est la somme des composants, comme cela est le cas avec la loi de Beer. Si :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(t)e^{-i\omega t} dt$$

alors :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} [f(t) + g(t)]e^{-i\omega t} dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt + \int_{-\infty}^{+\infty} g(t)e^{-i\omega t} dt \\ &= F(\omega) + G(\omega) \end{aligned}$$

que nous schématiserons par :

$$\boxed{f(t) + g(t) \leftrightarrow F(\omega) + G(\omega)}$$

Déplacement (« Shift »)

Un déplacement de l'origine (par exemple, un déplacement de l'origine du temps de mesure par t_0) ne change pas fondamentalement la fonction $f(t)$ mais modifie la phase de chaque composante et un déplacement de chaque fréquence. Inversement, un déplacement en fréquence provoque un déplacement dans le temps. Si :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

ou, dans notre notation :

$$f(t) \leftrightarrow F(\omega)$$

alors :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t_0) e^{-i\omega t} dt &= e^{-i\omega t_0} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t_0) e^{-i\omega(t-t_0)} d(t-t_0) \\ &= e^{-i\omega t_0} F(\omega) \end{aligned}$$

$$\boxed{f(t-t_0) \leftrightarrow e^{-i\omega t_0} F(\omega)}$$

Facteur d'échelle («*Scaling*»)

Si :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

ou, dans notre notation, :

$$f(t) \leftrightarrow F(\omega)$$

alors :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(at) e^{-i\omega t} dt &= \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} f(at) e^{-i(\omega/a)at} d(at) \\ &= \frac{1}{a} F\left(\frac{\omega}{a}\right) \end{aligned}$$

$$\boxed{f(at) \leftrightarrow \frac{1}{a} F\left(\frac{\omega}{a}\right)}$$

Ce théorème a également d'importantes conséquences pratiques; si la période d'un échantillonnage décroît, le spectre s'élargit. Il intervient également dans l'utilisation de la diffraction par rayons X que nous discuterons dans un paragraphe suivant.

Théorème de convolution

Ce théorème est essentiel dans de nombreuses applications, comme la synthèse de Patterson en diffraction des rayons X ou la théorie des filtres

linéaires qui superpose des signaux extérieurs aux mécanismes physiques. Il établit que le produit de convolution $h(t)$ de deux fonctions $f(t)$ et $g(t)$:

$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)g(t-u) du$$

possède comme transformée de Fourier le produit des deux transformées $F(\omega)$ et $G(\omega)$:

$$\boxed{h(t) = f(t) \cdot g(t) = g(t) \cdot f(t) \leftrightarrow F(\omega) \cdot G(\omega)}$$

En effet :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(u)g(t-u) du \right] e^{-i\omega t} dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(t-u)e^{-i\omega t} dt \right] du \end{aligned}$$

Par le théorème du «shift» :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(t-u)e^{-i\omega t} dt = e^{-i\omega u} F(\omega)$$

d'où :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(t-u)e^{-i\omega t} dt \right] du \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i\omega u} F(\omega) du \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i\omega u} du \\ &= F(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i\omega u} du \\ &= F(\omega)G(\omega) \end{aligned}$$

Notons ici le cas d'autocorrélation que nous discuterons en détail pour la description des mouvements moléculaires :

$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)g(t+u)du$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(u)g(t+u)du \right] e^{-i\omega t} dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(t+u)e^{-i\omega t} dt \right] du \end{aligned}$$

Par le théorème du «*shift*» :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(t+u)e^{-i\omega t} dt = e^{+i\omega u} F(\omega)$$

d'où :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(t+u)e^{-i\omega t} dt \right] du \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{+i\omega u} F(\omega) du \\ &= F(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{+i\omega u} du \\ &= F(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i(-\omega)u} du \\ &= F(\omega)F(-\omega) = F(\omega)F^*(\omega) = |F(\omega)|^2 \end{aligned}$$

Remarquons cependant que la prudence est requise pour définir la symétrie des transformations de Fourier et que l'assimilation de $F(-\omega)$ à $F^*(\omega)$ n'est strictement rigoureuse que si la fonction $f(t)$ est réelle.

11.2.3. Exemples de transformées de Fourier

Transformée de Fourier d'une impulsion rectangulaire

La transformée de Fourier d'une impulsion rectangulaire définie par :

$$\begin{aligned} f(t) &= 1 && \text{si } -\frac{\tau_0}{4} < t < +\frac{\tau_0}{4} \\ f(t) &= 0 && \text{dans le cas contraire} \end{aligned}$$

se calcule aisément par la relation :

$$\begin{aligned}
 F(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt = \int_{-\tau_0/4}^{+\tau_0/4} e^{-i\omega t} dt \\
 &= \frac{\tau_0}{2} \frac{\sin \frac{\tau_0 \omega}{4}}{\frac{\tau_0 \omega}{4}}
 \end{aligned}$$

La fonction résultante varie suivant ω comme $\sin(\omega/\omega)$. La partie principale a l'allure d'une cloche dont la largeur à mi-hauteur est inversement proportionnelle à $\tau_0 / 2$. Les transformées traitées dans cette section et dans les suivantes sont schématisées dans la figure 11.7

Transformée de Fourier d'une fonction gaussienne

La transformée de Fourier d'une fonction gaussienne définie par la relation $f(t) = \exp(-\alpha t^2)$ s'obtient en résolvant l'intégrale :

$$\begin{aligned}
 F(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha t^2} e^{-i\omega t} dt \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\alpha t^2 + i\omega t)} dt
 \end{aligned}$$

Par la manipulation algébrique et son équivalence avec l'opposé de l'argument de l'exponentielle :

$$\begin{aligned}
 a^2 + 2ab &= (a+b)^2 - b^2 \\
 \alpha t^2 + i\omega t &= \left(\sqrt{\alpha}t + \frac{i\omega}{2\sqrt{\alpha}} \right)^2 + \frac{\omega^2}{4\alpha}
 \end{aligned}$$

on arrive aisément à la relation :

$$\begin{aligned}
 F(\omega) &= e^{-\frac{\omega^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\sqrt{\alpha}t + \frac{i\omega}{2\sqrt{\alpha}}\right)^2} dt \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{\omega^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du \\
 &= \frac{\pi}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{\omega^2}{4\alpha}}
 \end{aligned}$$

La difficile résolution de l'intégrale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du$$

a été donnée dans un chapitre précédent.

La transformée de Fourier d'une fonction gaussienne est ainsi une autre fonction gaussienne. Les largeurs à mi-hauteur des deux gaussiennes transformées varient de façon inversement proportionnelle.

Transformée de Fourier d'une fonction exponentielle

La transformée de Fourier d'une fonction exponentielle à pointe («*cusp*») définie par la relation :

$$f(t) = e^{-\alpha|t|}$$

ou, alternativement par les deux relations :

$$f(t) = e^{-\alpha|t|} = e^{\alpha t} \quad \text{si } -\infty < t < 0$$

$$f(t) = e^{-\alpha|t|} = e^{-\alpha t} \quad \text{si } 0 < t < \infty$$

s'obtient par la résolution de l'intégrale :

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha|t|} e^{-i\omega t} dt \\ &= \int_{-\infty}^0 e^{-(\alpha-i\omega)t} dt + \int_0^{+\infty} e^{-(\alpha+i\omega)t} dt \\ &= \frac{1}{\alpha-i\omega} + \frac{1}{\alpha+i\omega} = \frac{2\alpha}{\alpha^2 + \omega^2} \end{aligned}$$

la transformée de Fourier de la fonction exponentielle décroissante est ainsi la fonction LORENTZIENNE.

La fonction de Dirac comme transformée de Fourier à une et trois dimensions

Une des représentations de la fonction delta de Dirac utilise le concept de transformation de Fourier. Rappelons que cette fonction satisfait la condition :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_0) dx = 1$$

et que si une fonction $f(x)$ est finie et continue au point $x = x_0$, nous aurons la relation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$$

Notons deux représentations intéressantes :

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/4k\alpha}}{\sqrt{4\pi k\alpha}} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{e^{-\alpha^2 x^2}}{\sqrt{\pi}} \end{aligned}$$

La première représentation signifie que, sauf si $x = 0$, les oscillations qui apparaissent dans l'intégration s'annulent mutuellement. Les autres représentations s'obtiennent, au facteur multiplicatif 2π près, en prenant la limite $\rightarrow \infty$ de la transformation de Fourier de la fonction gaussienne.

A trois dimensions, la fonction δ est le produit des trois fonctions unidimensionnelles :

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$$

et :

$$\begin{aligned} \int f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)d\mathbf{r} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y,z)\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)dx dy dz \\ &= f(x_0, y_0, z_0) = f(\mathbf{r}_0) \end{aligned}$$

avec les représentations :

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k} \\ \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \end{aligned}$$

INSERER FIGURE 11.7

Figure 11.7 : Transformées de Fourier

- (a) d'une impulsion rectangulaire,
- (b) d'une fonction exponentielle,
- (c) d'une fonction gaussienne.

11.3. DETERMINATION NUMERIQUE DES SERIES ET TRANSFORMEES DE FOURIER

11.4. EXEMPLES D'UTILISATION EN CHIMIE

11.4.1. Introduction

L'objectif de cette section n'est pas de donner une introduction ou une analyse plus ou moins complète aux méthodes spectroscopiques utilisant la transformation de Fourier. Il est plutôt de démystifier un langage difficile et de montrer comment les quelques éléments que nous avons développés précédemment peuvent servir, souvent au prix de longues recherches fondamentales et appliquées, à des domaines variés de la chimie moderne.

Les méthodes modernes d'imagerie (en résonance magnétique nucléaire) présentent une similarité formelle avec les méthodes connues depuis quelques décennies de détermination des structures moléculaires par diffraction des rayons X (RX). La cellule unité d'un monocristal contient, en effet, l'information structurale moléculaire recherchée par le chimiste. Il existe une certaine analogie avec l'ensemble de l'échantillon analysé en imagerie médicale, par exemple, une tête humaine. Dans les deux cas, la physique sous-jacente à l'expérience nous montrera que l'ensemble des intensités observées expérimentalement (diffractées pour les RX, signaux de radio fréquences émis en imagerie) est reliée à la structure spatiale de l'échantillon par une transformation de Fourier tridimensionnelle. En diffraction des RX, les signaux sont observés à des points fixés par le réseau réciproque du cristal investigué tandis qu'en imagerie médicale les points de mesure sont laissés à l'optimisation de l'expérimentateur.

De façon préliminaire, on peut dire que le rôle joué par les séries et transformations de Fourier provient de la dualité qui existe entre le temps et la fréquence d'une part, ou entre l'espace direct et l'espace réciproque, d'autre part. Ainsi, en spectroscopie, on peut dire en termes simples qu'un phénomène dépendant du temps, $f(t)$, sera modulé par une radiation $\exp[i(\omega t)] = \exp[i(2\pi\nu t)]$ et la mesure donnera généralement une observable moyennée sur un temps important :

$$F(\omega) = F(2\pi\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$

En diffraction des rayons X, l'onde diffusée $A(\mathbf{R},t)$ après l'interaction avec le réseau peut s'écrire simplement sous la forme :

$$A(\mathbf{R},t) = e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{r})e^{-i2\pi\mathbf{r}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{r}$$

Dans les deux cas, on voit apparaître «naturellement» une transformation de Fourier. Dans le dernier cas, l'intégrale de Fourier définit le facteur de structure dont la valeur absolue est mesurée par l'intensité du faisceau diffracté.

11.4.2. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en spectroscopie

Rappelons les différentes formulations obtenues précédemment pour une série de Fourier à une dimension (ce paragraphe peut être compris comme un résumé des sections précédentes et comme un exercice d'application) :

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \cos\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) + b_n \sin\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega t} \end{aligned}$$

avec :

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$$

et :

$$a_0 = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt$$

$$a_m = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(m\omega t) dt = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos(m2\pi vt) dt$$

$$b_m = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(m\omega t) dt = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin(m2\pi vt) dt$$

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in\omega t} dt = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) e^{-in2\pi vt} dt$$

Dans cette dernière représentation, les coefficients c_n peuvent être obtenus à partir des coefficients a_n et b_n de la série en termes de sinus et de cosinus par les relations :

$$c_n = \frac{a_n - ib_n}{2}$$

$$a_{-n} = a_n$$

$$b_{-n} = -b_n$$

$$c_{-n} = c_n^*$$

Les symboles utilisés nous induisent naturellement à voir que les coefficients de la série de Fourier forment une analyse spectrale (c'est à dire une analyse en fréquence) de la fonction périodique $f(t)$. Notons aussi que la première représentation en série de Fourier nous permet de faire la synthèse ou la reconstruction de n'importe quelle fonction à caractère ondulatoire en utilisant les fonctions sinus et cosinus comme éléments de base. Le choix de la limite de sommation permet de faire les compromis indispensables entre précision et temps de calcul (c'est à dire le coût de la synthèse).

Afin de bien comprendre l'utilisation des séries et des transformées de Fourier en spectroscopie, il est intéressant de reprendre l'exemple de la série de Fourier correspondant au train d'impulsion de largeur d'impulsion $\tau_0 / 2$, déjà choisi comme premier exercice dans le paragraphe 11.1.5.

Prenons initialement l'exemple du train d'impulsion de période $T_0 = \tau_0$ soit de fréquence égale à $\nu_0 = 1 / \tau_0 = 1 / T_0$ cycles par seconde (cycle par

seconde = cps ou Hz). Cette fonction périodique peut être représentée par une série de Fourier. En choisissant l'origine du train d'impulsion de manière à ce que l'impulsion soit située symétriquement par rapport à l'origine (comme l'indique la figure 11.5), le théorème démontré dans le paragraphe 11.1.4 implique que les coefficients b_m soient tous nuls et ramène la série de Fourier à une série en termes de cosinus. Les coefficients sont, sous leur forme intégrale :

$$\begin{aligned} a_m &= \frac{2}{\tau_0} \int_{-\tau_0/2}^{+\tau_0/2} f(t) \cos(m\omega t) dt \\ &= \frac{2}{\tau_0} \int_{-\tau_0/2}^{+\tau_0/2} f(t) \cos\left(m \frac{2\pi}{\tau_0} t\right) dt \\ &= \frac{2}{\tau_0} \int_{-\tau_0/2}^{+\tau_0/2} f(t) \cos(m2\pi\nu_0 t) dt \end{aligned}$$

Notons aussi que la valeur du coefficient numérique a_m fait apparaître la fréquence $m\nu_0$ dans le terme en cosinus et que l'intégrale est prise sur une période $T_0 = \tau_0$. Les valeurs de a_m sont explicitement :

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\tau_0}{T_0} = 1 \\ a_m &= \frac{2}{m\pi} \sin\left(\frac{m\pi}{2} \frac{\tau_0}{T_0}\right) \\ &= \frac{2}{m\pi} \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) \quad \text{lorsque } \tau_0 = T_0 \end{aligned}$$

Ces valeurs sont reprises schématiquement dans la figure 11.8. On peut y définir le produit $m\nu_0$ comme le paramètre de fréquence et l'axe horizontal de la figure représente la variable fréquence exprimée en unités ν_0 . Un déplacement du train d'impulsion parallèlement à l'axe du temps introduirait des termes b_m différents de zéro et des contributions en sinus dans la série de Fourier. Si la fréquence ν_0 est augmentée en diminuant la période $T_0 = \tau_0$, le train d'impulsion devient plus compact sur l'axe du temps et le spectre de fréquence s'élargit sur l'axe des fréquences. La démarche

précédente correspond à une analyse en fréquence de la fonction périodique $f(t)$.

INSERER FIGURE 11.8

Figure 11.8 : Evolution de l'amplitude des coefficients a_n de deux trains d'impulsion différents de période T [(a) $T = 2(\tau_0/2)$, (b) $T = 3(\tau_0/2)$] et de largeur d'impulsion $\tau_0/2$ et (c) transformée de Fourier de l'impulsion de largeur $\tau_0/2$.

La représentation d'une impulsion isolée peut être simulée en augmentant les intervalles entre les impulsions du train périodique. Afin de se familiariser avec la procédure, il est intéressant de choisir, en second lieu, l'exemple du train d'impulsion de largeur $\tau_0/2$ mais d'intervalle entre les impulsions plus grand de telle manière que la période devienne maintenant $T_0 = 3 \tau_0/2$. Dans ce deuxième cas, les résultats sont explicitement :

$$\begin{aligned}
 a_0 &= \frac{\tau_0}{T_0} = \frac{2}{3} \\
 a_m &= \frac{2}{m\pi} \sin\left(\frac{m\pi \tau_0}{2 T_0}\right) \\
 &= \frac{2}{m\pi} \sin\left(\frac{m\pi}{3}\right) \qquad \text{lorsque } T_0 = 3 \frac{\tau_0}{2}
 \end{aligned}$$

La figure 11.8 donne les valeurs correspondant à a_m ou à $2c_m$ (puisque si b_m est égal à 0, $c_m = a_n/2$). Dans un espace défini, le nombre de fréquences représentées sera plus grand même si l'enveloppe du spectre de fréquence est identique à celle du premier cas.

Si nous étendons encore l'intervalle entre les impulsions, on tend de plus en plus vers la représentation d'une impulsion isolée et on remplace la notion de série de Fourier par celle de transformée de Fourier:

$$\begin{aligned}
F(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt \\
&= F(2\pi\nu) \\
&= F(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i2\pi\nu t} dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\cos(2\pi\nu t) dt - i \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\sin(2\pi\nu t) dt \\
&= A(\nu) - iB(\nu)
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
A(\nu) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\cos(2\pi\nu t) dt \\
B(\nu) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\sin(2\pi\nu t) dt
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)e^{i\omega t} d\omega \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(2\pi\nu)e^{i2\pi\nu t} d(2\pi\nu) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu)e^{i2\pi\nu t} d\nu
\end{aligned}$$

Nous ne prêtons guère attention ici aux conventions qui existent pour le choix du facteur multiplicatif. De même, nous avons fait remarquer, à la fin du paragraphe 11.2a que cette dernière relation est parfois écrite de façon strictement équivalente comme (noter les différences de limites d'intégration dues à la symétrie des fonctions cosinus et sinus) :

$$\begin{aligned}
f(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu)e^{i2\pi\nu t} d\nu \\
&= \int_0^{+\infty} \{A(\nu)\cos(2\pi\nu t) + B(\nu)\sin(2\pi\nu t)\} d\nu \\
&= \int_0^{+\infty} D(\nu)\sin[2\pi\nu t + \theta(\nu)] d\nu
\end{aligned}$$

Les quantités $A(\nu)$, $B(\nu)$, $D(\nu)$, $F(\nu)$ et $\theta(\nu)$ définissent différents types de spectres :

- Spectre d'absorption $A(\nu) = F(\nu) + F(-\nu) = D(\nu)\sin[\theta(\nu)]$
- Spectre de dispersion $B(\nu) = i[F(\nu) - F(-\nu)] = D(\nu)\cos[\theta(\nu)]$
- Spectre de puissance $D^2 = A^2(\nu) + B^2(\nu) = F(\nu) \cdot F^*(-\nu)$

Dans ce dernier cas, $D^2(\nu)$ correspond à l'intensité du signal telle qu'elle est enregistrée par le détecteur physique. On constate que la phase $\theta(\nu)$ n'apparaît pas dans l'expression de $D^2(\nu)$. On voit ainsi que la plupart des détecteurs perdent l'information sur la phase qui ne peut donc être obtenue expérimentalement. Ceci constitue, par exemple, le problème de phase en diffraction des RX, problème qui empêche la détermination directe des structures cristallines.

Revenant à l'exemple de l'impulsion rectangulaire, on note que les coefficients (a_m ou c) sont devenus une fonction continue de la fréquence ν . Ce cas a été traité comme exemple du paragraphe 11.2.3 avec les résultats :

$$\begin{aligned}
 F(\nu) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i2\pi\nu t} dt = \int_{-\tau_0/4}^{+\tau_0/4} e^{-i2\pi\nu t} dt \\
 &= \frac{\tau_0}{2} \frac{\sin \frac{\tau_0 \pi \nu}{2}}{\frac{\tau_0 \pi \nu}{2}} \\
 &= \frac{\tau_0}{2} \frac{\sin \frac{\pi \nu}{2\nu_0}}{\frac{\pi \nu}{2\nu_0}}
 \end{aligned}$$

en se rappelant la définition $\nu_0 = 1/\tau_0$ utilisée précédemment. On peut vérifier que la position de l'impulsion choisie symétrique par rapport à l'origine réduit l'intégrale à sa seule contribution en cosinus :

$$\begin{aligned}
 F(\nu) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i2\pi\nu t} dt \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\cos(2\pi\nu t) dt - i \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\sin(2\pi\nu t) dt \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\cos(2\pi\nu t) dt
 \end{aligned}$$

Dans ce cas-ci, un choix de l'origine différent ou une impulsion moins symétrique auraient introduit des termes en sinus dans l'intégrale. Les coefficients c_n contiendraient également une composante imaginaire et la représentation de $F(\nu)$ devrait se faire à partir de deux courbes au lieu de sa seule composante réelle. Dans notre démarche, nous avons obtenu le spectre de fréquence $F(\nu)$ (ou encore la dépendance dans une échelle inverse du temps) d'une impulsion $f(t)$. La transformation inverse permet également d'obtenir $f(t)$ à partir de $F(\nu)$.

Une étape indispensable pour la suite de la compréhension de l'utilisation des transformées de Fourier en spectroscopie est de passer aux représentations en transformées de Fourier discrètes. En effet, si une expérience de laboratoire est toujours une fonction continue du temps, sa mesure est toujours échantillonnée à des intervalles de temps discrets. Toute procédure de transformation doit dès lors être effectuée sur un échantillonnage discret de données expérimentales. Prenons le cas de l'échantillonnage d'une fonction $f(t)$ en N points séparés de δt . Le temps complet pour l'ensemble de l'observation sera dès lors de $N\delta t$ et la fréquence d'échantillonnage $1/\delta t$. Le spectre de fréquence sera ainsi mesuré pour un intervalle $\delta \nu$. Les anciennes variables t et ν sont maintenant remplacées par $n\delta t$ et $k\delta \nu$ où n et k sont des entiers. Les équations de la transformation de Fourier continue deviennent pour la transformée de Fourier discontinue (DFT = Discrete Fourier Transform) :

$$\begin{aligned}
 f(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu t} d\nu \\
 \rightarrow f(n\delta t) &= f_n = \delta \nu \sum_{k=0}^{N-1} F(k\delta \nu) e^{i2\pi(k\delta \nu)(n\delta t)} \\
 F(\nu) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i2\pi\nu t} dt \\
 \rightarrow F(k\delta \nu) &= F_k = \delta t \sum_{n=0}^{N-1} f(n\delta t) e^{-i2\pi(k\delta \nu)(n\delta t)}
 \end{aligned}$$

La résolution en fréquence est déterminée par le temps total d'observation, $\delta\nu = 1/(N\delta t)$. En remarquant que $\delta\nu\delta t = 1/N$, on obtient les formules habituelles de la DFT :

$$f_n = \delta\nu \sum_{k=0}^{N-1} F_k e^{i2\pi kn/N}$$

$$F_k = \delta t \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{-i2\pi kn/N}$$

L'utilisation d'un multicanal (*multichannel*) combiné avec la transformation de Fourier peut maintenant être comprise. Supposons que l'évolution dans le temps d'une propriété physique $f(t)$ soit échantillonnée par N intervalles de temps égaux $t_n = n\delta t$ pendant une durée totale de mesure égale à $T = N\delta t$. Chacune de ces valeurs $f(t_1), f(t_2), f(t_3), \dots, f(t_N)$ est la somme de ses composantes en fréquences :

$$f(t_1) = a_{11}F(\nu_1) + a_{12}F(\nu_2) + a_{13}F(\nu_3) + \dots + a_{1N}F(\nu_N)$$

$$f(t_2) = a_{21}F(\nu_1) + a_{22}F(\nu_2) + a_{23}F(\nu_3) + \dots + a_{2N}F(\nu_N)$$

...

$$f(t_N) = a_{N1}F(\nu_1) + a_{N2}F(\nu_2) + a_{N3}F(\nu_3) + \dots + a_{NN}F(\nu_N)$$

où

$$a_{nm} = \exp[i2\pi m t_n / T]$$

$$= \exp[i2\pi mn / N]$$

Comme le système d'équations correspond à N points expérimentaux indépendants, $f(t_1), f(t_2), f(t_3), \dots, f(t_N)$, dont chacun est développé en termes de N fréquences, $F(\nu_1), F(\nu_2), F(\nu_3), \dots, F(\nu_N)$, il est possible de décoder les données expérimentales pour obtenir le spectre en fréquence $F(\nu_N)$. Cette procédure de décodage DFT a donné naissance, en 1965, à un algorithme de calcul sur ordinateur électronique très efficace dû à Cooley & Turkey et connu sous le nom de FFT (Fast Fourier Transform).

La fréquence maximale qui peut être déterminée pour la fonction échantillonnée, encore appelée fréquence de Nyquist ν_{Ny} est fixée par l'intervalle de temps entre deux échantillonnages,

$$V_{\max} = v_{Ny} = v_{\text{échantillonnage}}/2 = 1/(2\delta t).$$

Le facteur 2 provient d'un théorème général de la théorie de la mesure. Intuitivement, on comprend qu'il est nécessaire d'échantillonner une onde au moins deux fois par cycle pour estimer sa fréquence correctement. En effet, nous devons être capables de dire qu'une onde a oscillé entre sa partie positive et sa partie négative pour être certain qu'un cycle complet s'est déroulé.

Un exemple indicatif est donné par le *compact disc* (CD). La fréquence d'échantillonnage digital standard a été choisie à 44 kHz (soit à des intervalles de temps constants de 22.72 μ s). Dès lors, la fréquence théorique maximale de reproduction du son sur un CD est de 22 kHz. Les tentatives de générer des fréquences supérieures produiront des effets indésirables; le signal doit donc être filtré pour éviter que cette fréquence limite ne soit dépassée ou même approchée de trop près.

En pratique, dans les spectroscopies par transformées de Fourier, on échantillonne sur un temps nécessairement limité des fonctions du type :

Exemple 1

$$\begin{aligned} f(t) &= \cos(\omega_0 t) && \text{si } 0 \leq t \leq T \\ f(t) &= 0 && \text{si } t < 0 \text{ ou } t > T \end{aligned}$$

La transformée de Fourier de la fonction précédente décrit généralement les spectres de réponse par un flash de courte durée, de diffraction par une fente ou de *scattering*. La transformation de Fourier nous donne pour le terme d'absorption :

$$\begin{aligned}
A(\nu) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} f(t) \cos(2\pi\nu t) dt \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^T \cos(\omega_0 t) \cos(2\pi\nu t) dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^T \cos([\omega_0 - 2\pi\nu]t) dt + \frac{1}{2\pi} \int_0^T \cos([\omega_0 + 2\pi\nu]t) dt \\
&= \frac{1}{2\pi} \frac{\sin(2\pi\nu - \omega_0)T}{2\pi\nu - \omega_0} \\
&= \frac{1}{2\pi} \frac{\sin(\omega - \omega_0)T}{\omega - \omega_0}
\end{aligned}$$

Cette raie possède sa valeur maximale ($T/2\pi$) lorsque $\omega = \omega_0$:

$$A(\omega_0) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\omega \rightarrow \omega_0} \frac{\sin(\omega - \omega_0)T}{\omega - \omega_0} = \frac{T}{2\pi}$$

La largeur de raie à mi-hauteur de $A(\omega)$ est obtenue en écrivant :

$$A(\omega) = \frac{1}{2} \frac{T}{2\pi} = \frac{T}{4\pi} = \frac{1}{2\pi} \frac{\sin(\omega - \omega_0)T}{\omega - \omega_0}$$

qui fournit l'équation trigonométrique à résoudre :

$$\frac{\sin(\omega - \omega_0)T}{\omega - \omega_0} = \frac{T}{2}$$

dont la solution est :

$$\omega = \omega_0 \pm \frac{1.8955}{T}$$

La largeur de raie à mi-hauteur est ainsi donnée par la formule (que nous utiliserons plus loin dans la discussion) :

$$\text{largeur de raie} = \Delta\omega = 2 \frac{1.8955}{T} = \frac{3.791}{T}$$

Exemple 2

$$f(t) = \exp(-t / \tau) \cos(\omega_0 t) \quad \text{si } 0 \leq t < \infty$$

$$f(t) = 0 \quad \text{si } t < 0$$

La transformée de Fourier correspond, ici, à de nombreux spectres, parmi lesquels on peut citer la résonance magnétique nucléaire, la diffusion de la lumière, la fluorescence, ...

Exemple 3

$$f(t) = \exp(-t / \tau) \cos(\omega_0 t) \quad \text{si } 0 \leq t \leq T$$

$$f(t) = 0 \quad \text{si } t < 0 \text{ ou } t > T$$

Cette excitation $f(t)$ permet de décrire les formes de raies observées en résonance magnétique par transformation de Fourier, en résonance ionique cyclotronique, ...

Comme indiqué précédemment, dans tous les cas, la fréquence d'échantillonnage doit être au minimum égale à :

$$v_{\text{échantillonnage}} = 2 v_{\text{max}}$$

où v_{max} est la fréquence la plus importante du spectre qui nous intéresse. De plus, le nombre de points expérimentaux N que nous pouvons stocker dans un ordinateur électronique est fixé par la taille de la mémoire disponible. Dès lors, le temps total de mesure (et, en conséquence, la meilleure résolution possible ou la plus petite largeur de raie) est conditionné par :

$$v_{\text{échantillonnage}} \cdot T = 2 v_{\text{max}} \quad T = N$$

$$T = \frac{N}{2 v_{\text{max}}}$$

A partir de cette expression, de la relation $\omega = 2\pi\nu$ et de la définition de la largeur de raie d'absorption à mi-hauteur :

$$\Delta\omega = \frac{3.791}{T}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}\Delta\nu &= \frac{3.791}{2\pi T} \text{ Hz} \\ &= \frac{(3.791)(2\nu_{max})}{2\pi N} \text{ Hz} \\ &= \frac{3.791\nu_{max}}{\pi N} \text{ Hz}\end{aligned}$$

On voit que pour une mémoire vive d'ordinateur de 4096 mots ($N = 4096$), la relation précédente s'écrit :

$$\Delta\nu = 2.94610^{-4} \nu_{max}$$

Dans un spectre RMN dont la fréquence maximale est de 10.000, 1.000 ou 100 Hz, elle autorise les largeurs de raie suivantes :

$\nu_{max} = 10^4 \text{ Hz}$	$\Delta\nu = 2.94610^{-4} 10^4 = 2.95 \text{ Hz}$
$\nu_{max} = 10^3 \text{ Hz}$	$\Delta\nu = 2.94610^{-4} 10^3 = 0.295 \text{ Hz}$
$\nu_{max} = 10^2 \text{ Hz}$	$\Delta\nu = 2.94610^{-4} 10^2 = 0.0295 \text{ Hz}$

En pratique, les largeurs de raies d'un spectre de résonance magnétique nucléaire sont généralement limitées intrinsèquement au delà de 0.3 Hz par suite de l'inhomogénéité du champ magnétique. Le raisonnement précédent montre que pour un spectre RMN du proton couvrant un domaine de 1000 Hz, 4096 points ou un mini-ordinateur de 4K est suffisant pour distinguer deux pics dans cette région.

11.4.3. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en détermination de structures moléculaires

Nous avons signalé précédemment qu'en diffraction des rayons X, le rayon diffracté pouvait être représenté par la forme d'onde :

$$A(\mathbf{R}, t) = e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{r}) e^{-i2\pi\mathbf{r}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{r}$$

où intervient un facteur de structure de la structure cristalline, $F(\mathbf{R})$, transformée de Fourier de la densité électronique, qui dépend, dès lors, directement de la localisation des atomes dans la maille élémentaire :

$$F(\mathbf{R}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{r}) e^{-i2\pi\mathbf{r}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{r}$$

L'expérience de diffraction des rayons X mesure l'intensité du signal diffracté et perd donc la notion de phase (ou de signe, lorsque les facteurs de structure sont réels) :

$$|A(\mathbf{R}, t)|^2 = A(\mathbf{R}, t) A^*(\mathbf{R}, t) = F(\mathbf{R}) F^*(\mathbf{R}) = |F(\mathbf{R})|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{r}) e^{-i2\pi\mathbf{r}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{r} \right|^2$$

Pour la clarté de l'exposé et pour insister sur l'utilisation des formules abstraites que nous avons déduites au début de ce chapitre, nous traiterons successivement la question pour un modèle à une dimension et pour la réalité tridimensionnelle.

Séries de Fourier spatiales à une dimension

Pour faciliter les déterminations de structure, il est souhaitable du point de vue de la notation de réécrire les séries de Fourier, en utilisant la variable spatiale x au lieu de la variable t et en choisissant une période (longueur de cellule unité) égale à a ; la formulation de Fourier devient dans ces conditions :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \cos\left(n \frac{2\pi}{a} x\right) + b_n \sin\left(n \frac{2\pi}{a} x\right) \right\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i2\pi n x/a} \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
a_0 &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} f(x) dx \\
a_m &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} f(x) \cos\left(m \frac{2\pi}{a} x\right) dx \\
b_m &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} f(x) \sin\left(m \frac{2\pi}{a} x\right) dx \\
c_n &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} f(x) e^{-i2\pi nx/a} dx
\end{aligned}$$

Pour préparer aux notations traditionnellement utilisées en cristallographie, nous écrivons cette dernière relation, en choisissant la densité électronique unidimensionnelle $\rho(x)$ comme fonction périodique $f(x)$:

$$\begin{aligned}
\rho(x) &= f(x) \\
&= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i2\pi nx/a} \\
&= \sum_g A_g e^{igx} \quad \text{avec } g = \frac{n2\pi}{a}
\end{aligned}$$

Dans cette dernière expression, g est défini dans l'espace réciproque et appartient au réseau réciproque. Le facteur de structure, coefficient de Fourier, A_g est calculé par :

$$A_g = \frac{1}{a} \int_{\text{cellule}} f(x) e^{-igx} dx$$

Il peut être intéressant pour le lecteur de vérifier que de cette manière la fonction $\rho(x)$ est bel et bien une fonction périodique de période a :

$$\begin{aligned}
\rho(x) &= \sum_g A_g e^{igx} \\
\rho(x + ma) &= \sum_g A_g e^{ig(x+ma)} \\
&= \sum_g A_g e^{igx} e^{igma} \\
&= \sum_g A_g e^{igx}
\end{aligned}$$

puisque :

$$\begin{aligned}
 e^{igma} &= 1 \\
 &= \cos(gma) + i \sin(gma) \\
 &= \cos\left(\frac{n2\pi}{a}ma\right) + i \sin\left(\frac{n2\pi}{a}ma\right) \\
 &= 1 + i \cdot 0
 \end{aligned}$$

Notons ici que la convention de faire apparaître ou disparaître le facteur 2π distingue, en cristallographie, les réseaux amplifiés ou non.

Il est instructif de voir que le raisonnement tenu jusqu'à présent en termes de *série* de Fourier peut être également tenu en termes de *transformée* de Fourier. Le facteur de structure est la transformée de Fourier de la densité électronique périodique, dès lors :

$$\begin{aligned}
 \rho(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i2\pi nx/a} \\
 A_g &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) e^{-igx} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i2\pi nx/a} e^{-igx} dx \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi nx/a} e^{-igx} dx \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(2\pi n/a - g)x} dx
 \end{aligned}$$

où apparaît l'intégrale de Dirac qui est nulle si l'argument de l'exponentielle est différent de zéro et qui présente une valeur définie dans le cas contraire. Le résultat est donc que ne subsiste dans l'intégrale que le seul terme c_n qui correspond à la valeur de $(2\pi n/a) - g$, ce qui ramène la sommation au seul point du réseau réciproque $g = 2\pi n/a$. La phrase précédente exprimée en d'autres termes nous dit aussi que, dans l'*espace réciproque*, toutes les intensités A_g sont nulles excepté celles pour lesquelles g est un noeud du *réseau réciproque*.

Séries de Fourier spatiales à trois dimensions

La généralisation à trois dimensions se fait aisément.

Choisissons au départ des axes orthogonaux \mathbf{a}_x , \mathbf{a}_y et \mathbf{a}_z de longueurs respectives $|\mathbf{a}_x| = a$, $|\mathbf{a}_y| = b$, $|\mathbf{a}_z| = c$. Si nous avons une fonction $f(\mathbf{r})$ de période \mathbf{R} , où \mathbf{R} est un vecteur de translation du réseau direct défini par :

$$\mathbf{R} = r_x \mathbf{a}_x + r_y \mathbf{a}_y + r_z \mathbf{a}_z \quad \text{où } r_x, r_y \text{ et } r_z \text{ sont des entiers}$$

nous pouvons écrire :

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

qui se démontre, par exemple, par étapes :

$$\begin{aligned} f(x, y, z) &= f(x + r_x a, y, z) \\ &= \sum_{G_x} A_{G_x}(y, z) e^{iG_x \cdot x} \quad \text{avec } G_x = \frac{n_x 2\pi}{a} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(x, y, z) &= f(x, y + r_y b, z) \\ &= \sum_{G_x} A_{G_x}(y, z) e^{iG_x \cdot x} \\ &= \sum_{G_x} A_{G_x}(y + r_y b, z) e^{iG_x \cdot x} \end{aligned}$$

$$A_{G_x}(y, z) = \sum_{G_y} A_{G_x, G_y}(z) \cdot e^{iG_x \cdot y} \quad \text{avec } G_y = \frac{n_y 2\pi}{b}$$

$$\begin{aligned}
 f(x, y, z) &= f(x, y, z + r_z c) \\
 &= \sum_{G_x} \sum_{G_y} A_{G_x, G_y}(z) \cdot e^{iG_x \cdot x} e^{iG_y \cdot y} \\
 &= \sum_{G_x} \sum_{G_y} A_{G_x, G_y}(z + r_z c) \cdot e^{iG_x \cdot x} e^{iG_y \cdot y}
 \end{aligned}$$

$$A_{G_x, G_y}(z) = \sum_{G_z} A_{G_x, G_y, G_z} e^{iG_z \cdot z} \quad \text{avec } G_z = \frac{n_z 2\pi}{c}$$

Ce développement en trois séries de Fourier successives nous donne finalement :

$$\begin{aligned}
 f(x, y, z) &= \sum_{G_x} \sum_{G_y} \sum_{G_z} A_{G_x, G_y, G_z} e^{i(G_x \cdot x + G_y \cdot y + G_z \cdot z)} \\
 &= \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}
 \end{aligned}$$

La vérification est immédiate :

$$\begin{aligned}
 f(x + ha, y + lb, z + mc) &= \sum_{G_x} \sum_{G_y} \sum_{G_z} A_{G_x, G_y, G_z} e^{i(G_x \cdot [x+ha] + G_y \cdot [y+lb] + G_z \cdot [z+mc])} \\
 &= \sum_{G_x} \sum_{G_y} \sum_{G_z} A_{G_x, G_y, G_z} e^{i(G_x \cdot x + G_y \cdot y + G_z \cdot z)} e^{iG_x \cdot ha} e^{iG_y \cdot lb} e^{iG_z \cdot mc}
 \end{aligned}$$

L'égalité implique la définition du réseau réciproque pour un système d'axes orthogonaux :

$$\begin{aligned}
 G_x \cdot ha &= 2\pi n_x h \\
 G_y \cdot lb &= 2\pi n_y l \\
 G_z \cdot mc &= 2\pi n_z m
 \end{aligned}$$

Remarquons que ces relations impliquent seulement que :

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

c'est à dire que le produit scalaire des vecteurs \mathbf{R} de composantes $(r_x |\mathbf{a}_x|; r_y |\mathbf{a}_y|; r_z |\mathbf{a}_z|)$ et \mathbf{G} de composantes $(2\pi n_x / |\mathbf{a}_x|; 2\pi n_y / |\mathbf{a}_y|; 2\pi n_z / |\mathbf{a}_z|)$ soit égal à un nombre entier de fois 2π , ce qui est vérifié.

Dans le cas général d'axes non-orthogonaux, la cellule unité est construite sur des axes non-orthogonaux \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 et \mathbf{a}_3 de composantes cartésiennes respectives (a_{1x}, a_{1y}, a_{1z}) , (a_{2x}, a_{2y}, a_{2z}) et (a_{3x}, a_{3y}, a_{3z}) . Un vecteur de translation du réseau direct \mathbf{R} est défini par :

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad \text{où } n_1, n_2 \text{ et } n_3 \text{ sont des entiers}$$

Le développement de Fourier de la densité électronique s'écrit comme précédemment :

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

Afin de conserver l'invariance de translation vis-à-vis de tous les vecteurs de translation du réseau direct \mathbf{R}_n , le vecteur \mathbf{G} doit satisfaire les conditions :

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi m$$

où m est un entier quelques soient les valeurs de n_1 , n_2 et n_3 . Au même sens que \mathbf{R}_n se construit sur trois vecteurs élémentaires non-orthogonaux (\mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 et \mathbf{a}_3), \mathbf{G} sera construit sur trois vecteurs élémentaires non-orthogonaux (\mathbf{g}_1 , \mathbf{g}_2 et \mathbf{g}_3) :

$$\mathbf{G} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3 \quad \text{où } h, k \text{ et } l \text{ sont des entiers.}$$

La condition de périodicité de la densité électronique mène directement aux neuf conditions résumées par :

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{R}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

En effet, dans ces conditions :

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \\
 &= \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \\
 &= \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)} \\
 &= \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i(h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \cdot (\mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3)} \\
 &= \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} e^{i(h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \cdot (n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3)} \\
 &= \rho(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

puisque la dernière exponentielle imaginaire se réduit à l'unité d'après les conditions imposées aux axes du réseaux réciproques :

$$\begin{aligned}
 e^{i(h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \cdot (n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3)} &= e^{ihn_1\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_1} e^{ihn_2\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_2} e^{ihn_3\mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{a}_3} \\
 &\quad \cdot e^{ikn_1\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_1} e^{ikn_2\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_2} e^{ikn_3\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_3} \\
 &\quad \cdot e^{iln_1\mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{a}_1} e^{iln_2\mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{a}_2} e^{iln_3\mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{a}_3} \\
 &= e^{im2\pi} e^{i0} e^{i0} \\
 &\quad \cdot e^{i0} e^{in2\pi} e^{i0} \\
 &\quad \cdot e^{i0} e^{i0} e^{il2\pi} \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

Notons ici que les relations précédentes sont généralement mises sous une forme matricielle intéressante. En effet, les composantes des trois vecteurs du réseau direct et des trois vecteurs du réseau réciproque définissent deux matrices d'ordre 3 :

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} & g_{1z} \\ g_{2x} & g_{2y} & g_{2z} \\ g_{3x} & g_{3y} & g_{3z} \end{pmatrix}$$

La condition :

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{R}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

s'exprime, à ce moment, sous forme compacte :

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} &= 2\pi\mathbf{1} \\
&= \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} & g_{1z} \\ g_{2x} & g_{2y} & g_{2z} \\ g_{3x} & g_{3y} & g_{3z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \\
&= 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Cette dernière expression nous donne un procédé numérique direct pour déterminer les composantes du réseau réciproque par une simple inversion de matrice d'ordre 3 :

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} &= 2\pi\mathbf{1} \\
\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^{-1} &= 2\pi\mathbf{1} \cdot \mathbf{R}^{-1} \\
\mathbf{G} &= 2\pi\mathbf{R}^{-1}
\end{aligned}$$

11.4.4. Principe de l'utilisation des séries et transformées de Fourier en dynamique moléculaire

La transformée de Fourier sert également à décrire et à analyser en fréquence des phénomènes aléatoires, comme des radiations incohérentes ou des mouvements moléculaires. Par phénomène aléatoire, nous entendons un processus dans lequel l'amplitude, $f(t)$, d'une position moléculaire ou la direction d'un champ électromagnétique dépendent du temps d'une manière non définie, soit dans l'état actuel de nos connaissances, soit par une limitation intrinsèque. A titre d'exemple, nous reproduisons ci-dessous trois courbes donnant la distance moléculaire de trois molécules par rapport à une origine :

INSERER FIGURE 11.9

Figure 11.9 : Mouvement décrit par l'évolution en fonction du temps de la distance de trois molécules à une origine spatiale.

Dans cet exemple, nous trouvons que la position moyenne d'une molécule est égale à zéro. Nous sommes également en mesure de calculer la position quadratique moyenne qui sera directement reliée au coefficient de diffusion moléculaire. Si nous mesurons la distance aléatoire $f(t)$, pour différents intervalles de temps T , cette distance peut être décomposée, comme précédemment, en une série infinie d'oscillations de fréquence $n\nu_0$ (ou de pulsation: $n\omega_0 = n2\pi\nu_0 = n2\pi/T$) et d'amplitudes $\{a_n$ et $b_n\}$, exprimées par la série de Fourier :

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(n\omega_0 t) + b_n \sin(n\omega_0 t)\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \cos\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) + b_n \sin\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) \right\} \end{aligned}$$

Dans le cas de mouvements aléatoires, l'amplitude du signal aléatoire varie au cours du temps et d'une molécule à l'autre. Le résultat de la mesure expérimentale est donc une moyenne du mouvement des particules individuelles, moyenne temporelle, d'une part, et sur toutes les particules, d'autre part. On voit d'après la relation de Fourier que la valeur de $f(t)$ moyennée sur le temps d'observation T que nous appellerons $\langle f(t) \rangle$ est égale à zéro puisque:

$$\begin{aligned} \int_0^T \cos\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) dt &= \int_0^T \sin\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) dt = 0 \\ \langle f(t) \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Si les valeurs des coefficients a_n et b_n sont non-nulles à un moment donné et pour une molécule particulière, elles deviennent cependant nulles lorsqu'elles sont moyennées dans le temps; nous ne pouvons donc tirer aucune information sur la valeur instantanée de a_n et b_n à partir d'observations sur le comportement moyen d'un ensemble de particules.

Cependant, si nous faisons une expérience qui mesure le carré de $f(t)$, c'est à dire une expérience qui mesure l'intensité plutôt que l'amplitude d'un mouvement, en se rappelant que:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \cos^2\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) dt = \frac{1}{T} \int_0^T \sin^2\left(\frac{n2\pi}{T}t\right) dt = \frac{1}{2}$$

nous obtenons pour la moyenne temporelle (notée par $\langle \rangle$) d'une particule que:

$$\langle f^2(t) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n^2 + b_n^2}{2}$$

Effectuant ensuite la moyenne sur l'ensemble des particules (notée par la barre supérieure):

$$P(n\omega_0) = \frac{\overline{a_n^2 + b_n^2}}{2}$$

et :

$$\overline{\langle f^2(t) \rangle} = \sum_{n=1}^{\infty} P(n\omega_0)$$

En observant la figure 11.9, nous ne pouvons *a priori* rien dire de la valeur de la fonction $f(t)$ à un moment donné et pour une particule donnée. Cependant, si nous disposons d'une information sur le mouvement étudié, par exemple, si nous connaissons la valeur du coefficient de diffusion, nous pouvons émettre l'hypothèse que la valeur de la fonction au temps $t + \tau$ ne différera que peu de la valeur de la fonction au temps t si τ est petit. Nous dirons que, pour de faibles valeurs de τ , les valeurs des fonctions $f(t)$ et $f(t + \tau)$ sont «corrélées». D'autre part, si le temps τ devient important, nous ne pourrions plus préciser le comportement de la fonction $f(t + \tau)$. Les fonctions $f(t)$ et $f(t + \tau)$ sont à ce moment dites «non-corrélées». Puisque le temps requis pour que les fonctions $f(t + \tau)$ et $f(t)$ ne soient plus corrélées dépend des caractéristiques du mouvement, par exemple, du coefficient de diffusion moléculaire, nous pouvons espérer obtenir des informations sur le phénomène aléatoire en étudiant la fonction de corrélation :

$$G(\tau) = G(0)e^{-\tau/\tau_c}$$

A partir des éléments décrits lors de l'étude des transformées de Fourier, nous sommes en mesure d'obtenir sans difficulté la fonction Lorentzienne, transformée de la décroissance exponentielle :

$$\begin{aligned} P(\omega) &= \frac{2}{\pi} G(0) \int_0^{\infty} e^{-\tau/\tau_c} \cos(\omega\tau) d\tau \\ &= \frac{2}{\pi} G(0) \cdot \left(\frac{\tau_c}{1 + \omega^2 \tau_c^2} \right) \end{aligned}$$

11.4.5. Quelques autres applications

Facteur de diffusion atomique

Diffraction X de structures liquides

Génération de seconde harmonique en optique linéaire

L'optique non linéaire repose sur la polarisation moléculaire en présence d'un champ électrique externe. Si le champ est faible, il est commun d'admettre que la polarisation est proportionnelle à l'intensité du champ électrique externe :

$$P = \varepsilon_0 \chi E$$

où χ est la susceptibilité électrique linéaire. La réponse est ici directement proportionnelle au champ.

INSERER FIGURE 11.10

Figure 11.10 : Réponse moléculaire à un champ électrique extérieur

- (a) réponse linéaire
- (b) réponse non-linéaire.

En présence de champs électriques intenses comme ceux produits par les lasers, des termes non-linéaires apparaissent :

$$P = \epsilon_0 \chi E + \epsilon_0 \chi_2 E^2 + \epsilon_0 \chi_3 E^3 + \dots$$

où χ_2 et χ_3 sont les premières et secondes hyperpolarisabilités (non-linéaires). L'introduction d'un champ électrique oscillant $E = E_0 \sin(\omega t)$ provoque la polarisation qui, par développement trigonométrique ou par développement en série de Fourier, nous donne une polarisation totale qui n'est plus proportionnelle au champ incident et qui est, donc, une réponse non symétrique :

$$\begin{aligned} P &= \epsilon_0 \chi E + \epsilon_0 \chi_2 E^2 + \epsilon_0 \chi_3 E^3 + \dots \\ &= \epsilon_0 (\chi E_0 \sin \omega t + \chi_2 (E_0 \sin \omega t)^2 + \chi_3 (E_0 \sin \omega t)^3 + \dots) \\ &= \epsilon_0 \left(\chi E_0 \sin(\omega t) + \frac{1}{2} \chi_2 E_0^2 (1 - \cos(2\omega t)) + \dots \right) \\ &= \epsilon_0 \frac{1}{2} \chi_2 E_0^2 \quad \Rightarrow \text{composante fixe (d.c.)} \\ &\quad + \epsilon_0 \chi E_0 \sin \omega t \quad \Rightarrow \text{composante fondamentale} \\ &\quad - \epsilon_0 \frac{1}{2} \chi_2 E_0^2 \cos(2\omega t) + \dots \quad \Rightarrow \text{seconde harmonique} \end{aligned}$$

INSERER FIGURE 11.11

Figure 11.11 : Décomposition d'une polarisation non linéaire en ses composantes d.c., fondamentale et première harmonique.

On voit donc qu'un champ de fréquence $\omega = 2\pi\nu$ génère une réponse de fréquence double $2\omega = 4\pi\nu$. Il s'agit du phénomène de génération de seconde harmonique (SHG = Second Harmonic Generation). Ainsi, par exemple, un rayonnement de laser dans le domaine du rouge traverse un cristal de phosphate dihydrogène d'ammonium et en ressort avec une fréquence double dans le bleu. Si nous avons mené le développement de

Fourier jusqu'aux termes provenant de $\sin^3(\omega t)$, on aurait obtenu la forme mathématique de la génération de troisième harmonique (THG = Third Harmonic Generation). Notons qu'en français, on devrait logiquement utiliser le terme «première et deuxième harmoniques» au lieu de «seconde et troisième» harmoniques. Il s'agit ici d'un franglicisme où le «*first floor*» correspond au rez-de-chaussée, le «*second floor*» au premier étage, et ainsi de suite.

Détermination de la structure du DNA par Crick et Watson

Barrières de rotation interne

11.5. EXERCICES

11.6. BIBLIOGRAPHIE SELECTIVE

Waser, J., Pictorial representation of the Fourier method of X-ray crystallography, *J. Chem. Educ.*, **1968**, *45*, 446.

Perkins, W.D., Fourier transforms infrared spectroscopy

Part I: Instrumentation, *J. Chem. Educ.*, **1986**, *63*, A5.

Part II: Advantages of FT-IR, *J. Chem. Educ.*, **1987**, *64*, A269.

Part III: Applications, *J. Chem. Educ.*, **1987**, *64*, A296.

Glasser, L., Fourier transforms for chemists

Part I: Introduction to the Fourier transform, *J. Chem. Educ.*, **1987**, *64*, A228.

Part II: Fourier transforms in chemistry and spectroscopy, *J. Chem. Educ.*, **1987**, *64*, A260.

Part III: Fourier transforms in data treatment, *J. Chem. Educ.*, **1987**, *64*, A306.

Chesick, J.P., Fourier analysis and structure determination

Part I: Fourier transforms, *J. Chem. Educ.*, **1989**, 66, 128.

Part II: Pulse NMR and NMR imaging, *J. Chem. Educ.*, **1989**, 66, 283

Part III: X-ray crystal structure analysis, *J. Chem. Educ.*, **1989**, 66, 413.

Conventions dactylographiques prises pour les intégrales :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\pi}^{+\pi} \int_{-T/2}^{+T/2}$$