

Eléments d'analyse

G. Marcou *

Strasbourg, 16 octobre 2006

*Université Louis-Pasteur, Faculté de Chimie de Strasbourg, Laboratoire de Pharmacochimie de la Communication Cellulaire (UMR7081).

Introduction

- △ Applications linéaires
- △ Equations linéaires, systèmes d'équations linéaires
- △ Equations non-linéaires
- △ Dérivées
- △ Opérateurs différentiels
- △ Equation différentielles
- △ Equations aux dérivées partielles
- △ Conclusion

Applications linéaires

Une **application linéaire**, f , est une fonction d'un monoïde, E , vers un autre qui possède la propriété suivante :

$$x \in E, y \in E \quad f(x + y) = f(x) + f(y)$$

Si ces ensembles ont une structure d'espace vectoriel, λ et μ étant des scalaires :

$$x \in E, y \in E \quad f(\lambda x + \mu y) = \lambda f(x) + \mu f(y)$$

Exemples :

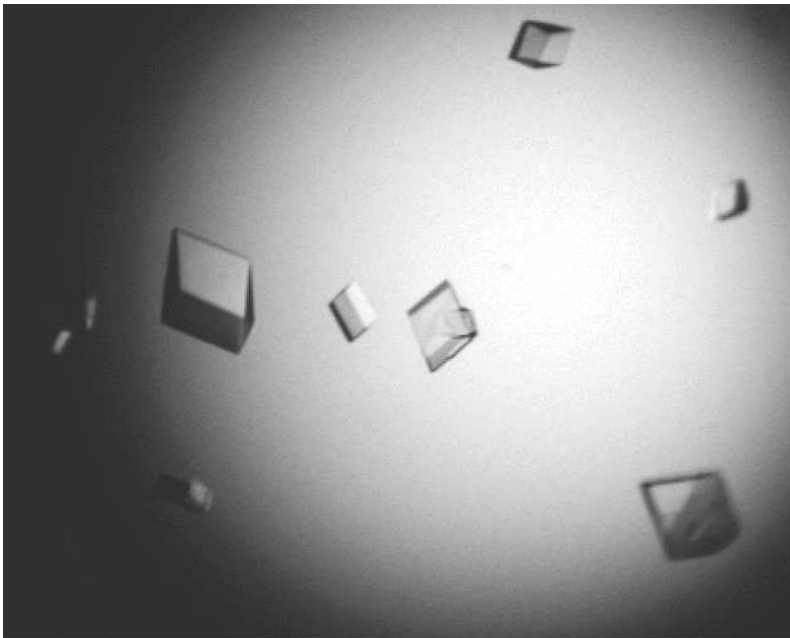
- les équation des droites passant par l'origine
- les matrices
- les tenseurs
- un ressort...

Espace dual d'un espace vectoriel

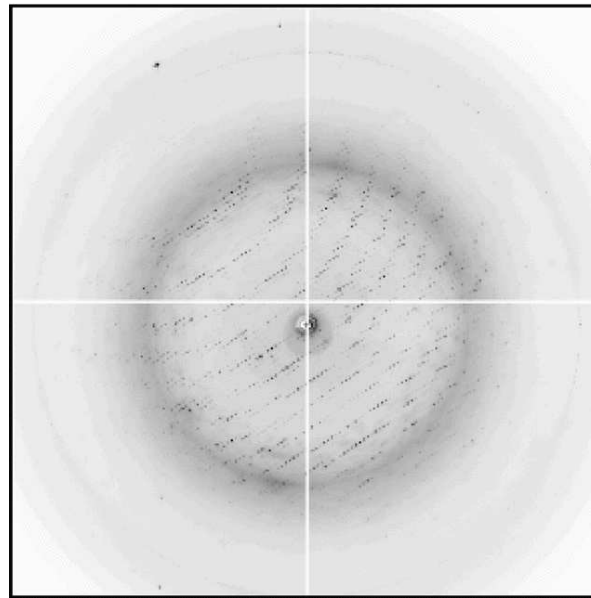
Un **espace dual** d'un espace vectoriel E est l'espace vectoriel E^* constitué par l'ensemble des applications linéaires de E sur l'espace des scalaires de E -le support de E .

Le dual du réseau cristallin est son réseau réciproque. L'application linéaire est ici le produit scalaire : $L_{\vec{y}}(\vec{x}) = \vec{y} \cdot \vec{x}$.

La base du dual se déduit de la base de l'espace vectoriel : $\vec{e}_i^* \cdot \vec{e}_j = \delta_i^j$. Note : l'emploi du produit scalaire est ici abusif.



réseau cristallin (cristaux d' α -glycerophosphate oxidase from *Streptococcus*)



réseau réciproque (diffraction X d' α -glycerophosphate oxidase from *Streptococcus*)

Equations linéaires

Une **équation**, \mathcal{E} , est une relation entre un ou plusieurs éléments inconnus d'un ensemble avec un ou plusieurs éléments connus.

Une **solution** est un ou plusieurs éléments d'un ensemble qui satisfont une équation.

On se limite par la suite à des ensembles munis d'une structure d'espace vectoriel.

Une **équation linéaire** est telle que si x et y sont solution, α et μ sont des scalaires, alors $\alpha x + \mu y$ est aussi solution de cette équation.

$$\mathcal{E}(x) = 0, \mathcal{E}(y) = 0 \Rightarrow \mathcal{E}(\alpha x + \mu y) = 0$$

La magnétisation à l'équilibre des noyaux d'une molécule dans un champs magnétique oscillant sont solution d'une équation linéaire : l'équation de Solomon.

L'ensemble des inconnues formant un vecteur \vec{X} , il est souvent possible d'écrire une équation linéaire sous la forme $[A]\vec{X} = \vec{B}$: résoudre cette équation revient à inverser une matrice.

Equations homogènes et inhomogènes

Une équation est dite **homogène** si elle peut prendre la forme $\mathcal{E}(x) = 0$.

Une équation linéaire est dite **inhomogène** si il existe un terme constant tel que l'équation puisse être écrit : $\mathcal{E}(x) = b$ et $\mathcal{E}(x) = 0$ est une équation linéaire homogène.

Les concentrations des espèces dans une réaction en état d'équilibre se déduisent d'une équation homogène.

Les concentrations des espèces dans une réaction en état stationnaire se déduisent d'une équation inhomogène.

Equations non-linéaires

Les équations **non-linéaires** sont le plus souvent impossible à résoudre algébriquement.

Ces équations font intervenir des opérateurs non linéaires, comme la multiplication des inconnues entre elles ou des fonctions analytiques (fonctions trigonométriques, exponentielle et logarithme,...).

La position des atomes de la conformation d'une molécule minimisant son énergie potentielle est solution d'une équation non-linéaire.

Il faut donc faire appel à des algorithmes numériques pour trouver des solutions.

Fonction d'une variable, différentielle, dérivée

Une **fonction**, $f(x)$, est une application d'un corps dans un autre. Quand une représentation géométrique d'une fonction existe, on parle de **graphe** de cette fonction.

La **différentielle** en un point d'une fonction est l'application linéaire par laquelle l'**image** de ce seul point, ramené à l'origine, se confond avec celle de ce même point à travers la fonction. L'analogie géométrique de la différentielle est la tangente au graphe de la fonction. Cette application approxime la fonction en un point.

La **dérivée**, $f'(x)$, d'une fonction en un point est la **pente** de la différentielle.

$$f(x_0 + \epsilon) - f(x_0) = df(x_0) = f'(x_0) * \epsilon = f'(x_0)dx$$
$$\frac{f(x_0 + \epsilon) - f(x_0)}{(x_0 + \epsilon) - x_0} = \frac{df(x_0)}{dx} = f'(x_0)$$

différentielle → application linéaire, fonction

dérivée → scalaire, nombre

Dérivée multiple

L'ensemble des dérivées d'une fonction est aussi une fonction qui peut-être elle-même dérivée. Le **degré** de la dérivée d'une fonction est le nombre de fois que cette fonction a été dérivée.

Manipuler les dérivées à l'aide de Maple. Vérifier la linéarité du calcul de dérivée et la loi de composition des dérivées.

En cinétique, la vitesse est la dérivée par rapport au temps de l'état d'un système, l'accélération est la dérivée par rapport au temps de la vitesse.

Cas de fonctions de plusieurs variables, dérivées partielles

Une fonction de plusieurs variables relie un espace vectoriel à un autre. Dans ce cas une dérivée est calculée pour chaque variable. Ces dérivées sont dites **partielles**, $\frac{\partial f}{\partial x} = f'_x$:

$$\begin{aligned} f(\dots, x_0^i + \epsilon^i, \dots) &= f'_{x^i}(\dots, x_0^i, \dots) * \epsilon^i + f(\dots, x_0^i, \dots) \\ \frac{f(\dots, x_0^i + \epsilon^i, \dots) - f(\dots, x_0^i, \dots)}{(x_0^i + \epsilon^i) - x_0^i} &= \frac{\partial f(\dots, x_0^i, \dots)}{\partial x} = f'_{x^i}(\dots, x_0^i, \dots) \end{aligned}$$

Dans le cas d'une fonction composée :

$$\frac{df}{dt}(x(t_0), t_0) = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t_0), t_0) \frac{\partial x}{\partial t}(t_0) + \frac{\partial f}{\partial t}(x(t_0), t_0)$$

En dynamique, les forces se déduisent des dérivées partielles de l'énergie potentielle.

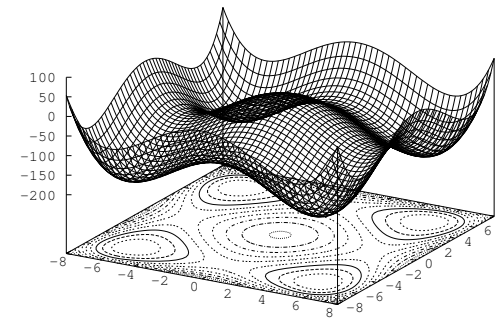
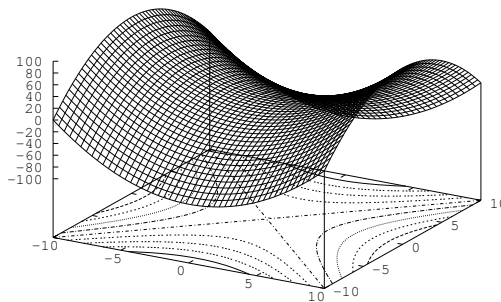
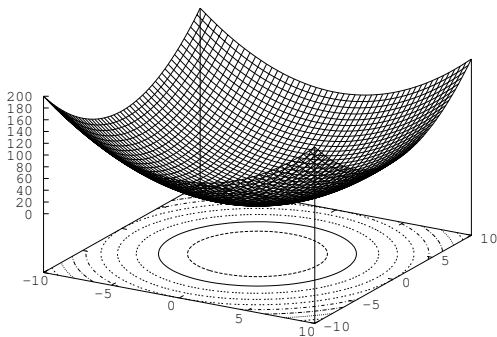
Manipuler les dérivées à l'aide de Maple. Vérifier la linéarité du calcul de dérivée et la loi de composition des dérivées.

Extremums, point selle

Dans le cas d'une fonction d'une variable, lorsque la dérivée d'une fonction s'annule, la fonction a atteint un **extremum**. Si au voisinage d'un extremum, tous les points images par la fonction sont supérieurs (inférieurs) à l'image du point extremum, l'extremum est qualifié de **maximum (minimum)**. Autrement, il s'agit d'un **point d'inflexion**.

Dans le cas de fonction de plusieurs variables, un extremum n'existe que si toutes les dérivées s'annulent en ce point. Si ce point est un maximum (minimum) pour toutes les dérivées partielles alors l'extremum est qualifié de maximum (minimum). Dans le cas contraire, il s'agit d'un **point selle** ou **col**.

Un système est stable si il se trouve dans un minimum de son énergie potentielle. Les cols correspondent aux états de transition.



Espaces de Riemann

Un **espace de Riemann** est un espace ponctuel muni d'une métrique dépendante du point et vérifiant des hypothèses de régularité supplémentaire.

La sphère, le tore et d'autres surfaces sont des exemples d'espaces de Riemann.

Tracer les surfaces suivantes :

$x \in [-3 : 3]$	$u \in [0 : \pi], v \in [0 : 2\pi]$	$u \in [0 : \pi], v \in [0 : 2\pi]$
$y \in [-3 : 3]$	$x(u, v) = \sin(u)\cos(v)$	$x(u, v) = (1 + \cos(v))\cos(u)$
$z(x, y) = x^2 - y^2$	$y(u, v) = \sin(u)\sin(v)$	$y(u, v) = (1 + \cos(v))\sin(u)$
	$x(u, v) = \cos(v)$	$x(u, v) = \sin(v)$

Les espaces de Riemann décrivent l'univers à grande échelle comme à très petite échelle. La théorie de ces espaces sous-tend la relativité générale et la théorie des cordes. L'espace des phases de la physique statistique est aussi un espace de Riemann.

Différentielle d'un champs vectoriel, symboles de Christoffel

Calculer une différentielle revient à comparer un champs en deux points voisins. Quand ce champs est vectoriel, cette comparaison ne peut être faite que si les vecteurs images sont exprimés dans la même base.

Dans le cas d'un repère cartésien, la même base est associée à chaque point de l'espace ponctuel. Dans le cas contraire, il faut savoir exprimer les vecteur de la base associé à un point M à l'aide de la base associée à son point voisin M' :

$$d\vec{e}_i = \vec{e}'_i(M) - \vec{e}_i(M') = [k_{i,j}] dx^k \vec{e}_j$$

Les coefficients noté $[k_{i,j}]$ sont les **symboles de Christoffel de seconde espèce**.

On définit aussi les **symboles de Christoffel de première espèce** comme :

$$\vec{e}_j \cdot d\vec{e}_i = \{k^j_i\} dx^k$$

Les symboles de Christoffel s'expriment uniquement à l'aide des composantes des tenseurs métriques. Ils reflètent la courbure de l'espace.

Gradient

Quand une fonction prend ses valeurs dans un espace ponctuel, on parle de **champs**.

Un champs vers un corps est une **champs scalaire**.

Les dérivées partielles d'un champs scalaires forment les composantes covariantes d'un vecteur, le **gradient**, $\vec{\nabla}$.

$$\vec{\nabla} f(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i) = \sum_{\vec{e}_i} \sum_k g^{ik} \frac{\partial f}{\partial x^k} (\sum_{\vec{e}_j} x^j \vec{e}_j) \vec{e}_i$$

Le gradient indique la direction de plus grande pente, direction dans laquelle le champs varie le plus.

Les forces de la mécanique classique s'exprime en fonction du gradient du potentiel, le champs électrostatique se déduit du gradient du potentiel électrostatique, la chaleur s'écoule le long des grandient de température...

Jacobien, Rotationnel

Un champs vers un espace vectoriel est un **champs vectoriel**. La matrice composée des dérivées partielles des composantes du vecteur image est le **Jacobien**. La matrice anti-symétrique obtenue à partir du Jacobien est le **tenseur rotationnel**, $\vec{\nabla} \wedge$.

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{V}(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i) = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} V_j(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) - \frac{\partial}{\partial x^j} V_i(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) \right) (\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j)$$

Dans un espace à 3 dimensions le nombre de composantes indépendante est aussi égale à 3. On définit le **vecteur rotationnel** :

$$\begin{aligned} [\vec{\nabla} \wedge \vec{V}(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i)]^1 &= \frac{\partial}{\partial x^2} V_3(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) - \frac{\partial}{\partial x^3} V_2(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) \\ [\vec{\nabla} \wedge \vec{V}(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i)]^2 &= \frac{\partial}{\partial x^3} V_1(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) - \frac{\partial}{\partial x^1} V_3(\sum_{\vec{e}_k} x^k \vec{e}_k) \\ &\dots = \dots \end{aligned}$$

Divergence

L'opération de contraction d'indice sur les composantes de la matrice des dérivées partielles des composantes covariantes d'un champ vectoriel s'appelle la **divergence**, $\vec{\nabla} \cdot$.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} \left(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i \right) = \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k} \left(V^k \left(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i \right) \sqrt{\det(g)} \right)$$

La divergence exprime un flux : la quantité de vecteur traversant un élément de volume. Quand le vecteur est identifié au champ électrostatique, la divergence est liée à la densité de charge. Quand le vecteur est identifié au champ de vecteur d'un fluide incompressible, cette quantité est nulle car ce qui rentre doit sortir en même proportion, etc.

Laplacien

Le gradient d'un champs scalaire est un vecteur. La divergence de ce vecteur est appelé le **Laplacien** du champs scalaire.

$$\Delta f(\sum_{\vec{e}_i} x^i \vec{e}_i) = \frac{1}{\sqrt{\det(g)}} \sum_i \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{\det(g)} \sum_k g^{ik} \frac{\partial f}{\partial x^k})$$

Cette quantité traduit la quantité de variation du champs scalaire au travers d'un élément de volume.

La mécanique classique peut s'interpréter comme la conservation d'un flux de quantité de mouvement au travers de l'espace, les forces étant des sources ou des puits de quantité de mouvement

Opérateurs différentiels et métrique

En général les opérateurs différentiels ne sont simples que dans le cas d'espaces ponctuels munis de repères orthonormés. Dans ce cas, les métriques qui apparaissent dans les formules sont toutes égales à la matrice unité.

Dans les autres cas, ces opérateurs ont une écriture sensiblement plus compliquée.

Coordonnées sphériques par rapport à un repère cartésien :

$$x = r \cos \theta \cos \phi$$

$$y = r \cos \theta \sin \phi$$

$$z = r \sin \theta$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 V^r + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (V^\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} V^\phi$$

$$(\vec{\nabla} f) \cdot \vec{e}_r = \frac{\partial f}{\partial r}$$

$$(\vec{\nabla} f) \cdot \vec{e}_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}$$

$$(\vec{\nabla} f) \cdot \vec{e}_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{V} \cdot \vec{e}^r = \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (V^\phi \cos \theta) - \frac{\partial}{\partial \theta} V^\phi \right)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{V}_\theta = \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial V^r}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V^\phi) \right)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{V}_\phi = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r V^\theta) - \frac{\partial}{\partial \theta} V^r \right)$$

Série de Taylor

Une fonction scalaire est **analytique** autour d'un point x_0 si elle peut être écrite sous la forme d'une série :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial x^n}(x_0)(x - x_0)^n$$

Cette série est appelée **série de Taylor**. Elle se généralise au cas de champs scalaires ou vectoriel. Par exemple dans le cas d'un champs scalaire sur espace ponctuel a 2 dimensions :

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)(y - y_0) \\ & + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0)(x - x_0)(y - y_0) + \\ & \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0)(y - y_0)^2 + \dots \end{aligned}$$

Série de Laurent

L'hypothèse qu'une loi inconnue, reliant des quantités physiques ou des propriétés chimiques soit analytique est très fréquente. Elle permet d'en rechercher une approximation sous la forme d'un polynôme.

Une fonction singulière -elle devient infinie- en un point ne peut pas être développée en série de Taylor. Mais elle peut être développée en série de Laurent dans le plan \mathbb{C} :

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - c)^n$$

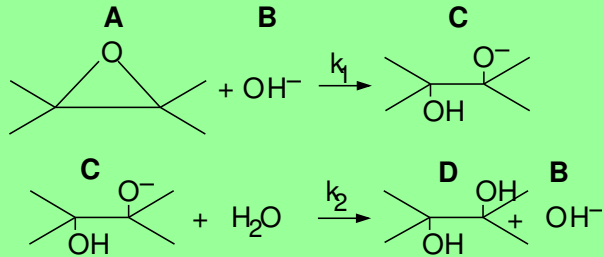
Une fonction pour laquelle existe une série de Laurent est dite **méromorphe**. Si cette série n'a que des valeurs nulles que pour $n \geq 0$, la fonction est **holomorphe**.

On peut comprendre ces développements comme l'écriture des fonctions analytiques sur une base de polynômes.

Equation différentielle

Une **équation différentielle** met en relation les dérivées d'une fonction entre elles. Quand ces relations mettent plusieurs fonctions entre elles ou les composantes d'une fonction vectorielle ces équations différentielles sont dites couplées.

La cinétique chimique est très riche en équations différentielle :



$$\frac{d}{dt}[A](t) = -k_1[A](t)[B](t)$$

$$\frac{d}{dt}[B](t) = -k_1[A](t)[B](t) + k_2[C](t)$$

$$\frac{d}{dt}[C](t) = k_1[A](t)[B](t) - k_2[C](t)$$

$$\frac{d}{dt}[D](t) = k_2[C](t)$$

Quand ces relations sont non-linéaires, il n'existe pas en général pas de solutions analytiques.

Equation aux dérivées partielles

Quand une équation met en relation les dérivées partielles de champs scalaires on parle d'**équation aux dérivées partielles**. Quand l'équation met en relation les composantes d'un champs scalaire, on parle d'équation aux dérivées partielles **couplées**.

L'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x})}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}) - V(\vec{x}, \frac{\partial}{\partial t} \vec{x}) \Psi(\vec{x}) = 0$$

Comme pour les équations différentielles, il est rare de trouver des solutions analytiques pour une équation aux dérivées partielles non-linéaire.

Conditions initiales, conditions aux limites

L'**ordre** d'une équation différentielle ou aux dérivées partielles est le plus haut degré de dérivation de la solution qui apparaît dans l'équation.

La donnée d'une équation différentielle ou aux dérivées partielles n'est pas suffisante pour trouver une solution unique. Il faut fournir des **conditions initiales**.

Il s'agit des valeurs prises par la fonction solution et ses dérivées successives en un point. Pour qu'une solution unique existe pour une équation d'ordre n , il faut les valeurs de la fonction et de ses dérivées successives jusqu'à l'ordre $n - 1$.

Pour chaque condition initiale manquante, un paramètre apparaît caractérisant une **famille de solutions**.

Quand la valeur de la fonction solution est spécifiées en plus d'un point on parle de **conditions aux limites**. Un tel problème est le plus souvent mal définis : il n'admet pas de solutions ou en admet une infinité.

Equations différentielles inhomogènes

Quand une équation différentielle ou une équation aux dérivées partielles fait intervenir une autre fonction utilisant les mêmes variables, on parle d'équation **inhomogène**.

Ces équations reflètent les plus souvent les effets d'un environnement extérieur. L'écriture d'une équation de cinétique chimique au sein d'un réacteur fait intervenir le débit d'arrivée des réactifs et celui d'évacuation des produits.

Dans le cas des équations aux différentielles linéaires, la famille de solutions de l'équation homogène fournit une base de l'espace vectoriel dans lequel existe la solution de l'équation inhomogène. Ce fait constitue la base de la méthode de variation de la constante pour résoudre ce type d'équation.

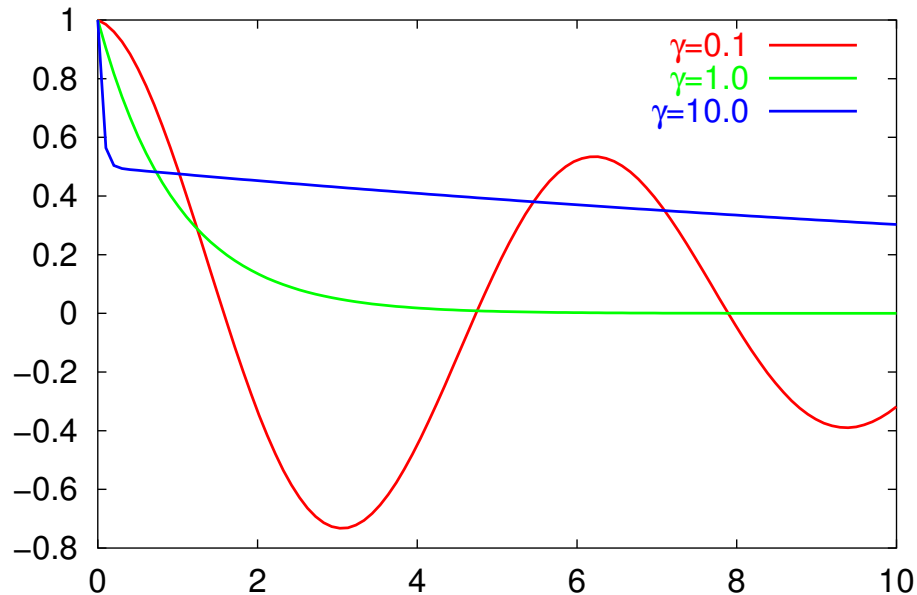
Une autre méthode, très populaire, consiste à trouver une fonction $G(x)$ telle que la solution de l'équation se déduise du terme inhomogène par une opération de **convolution**. Cette fonction est appelée **propagateur** ou **fonction de Green**.

Exemples d'équation différentielle homogène et inhomogène

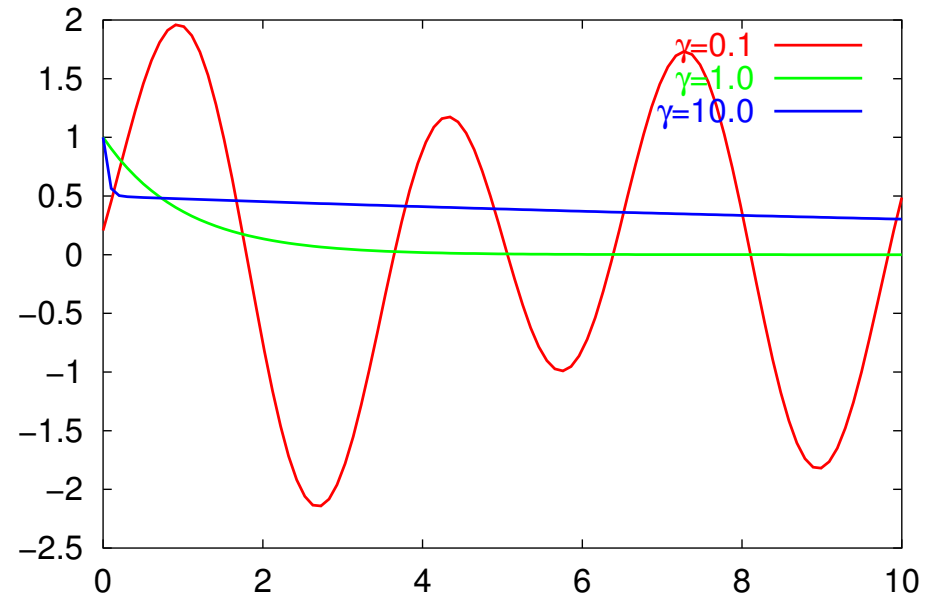
$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \gamma \frac{d}{dx}\phi(x) + k\phi(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \gamma \frac{d}{dx}\phi(x) + k\phi(x) = F \cos(\omega t + \theta)$$

Equation harmonique dissipative libre



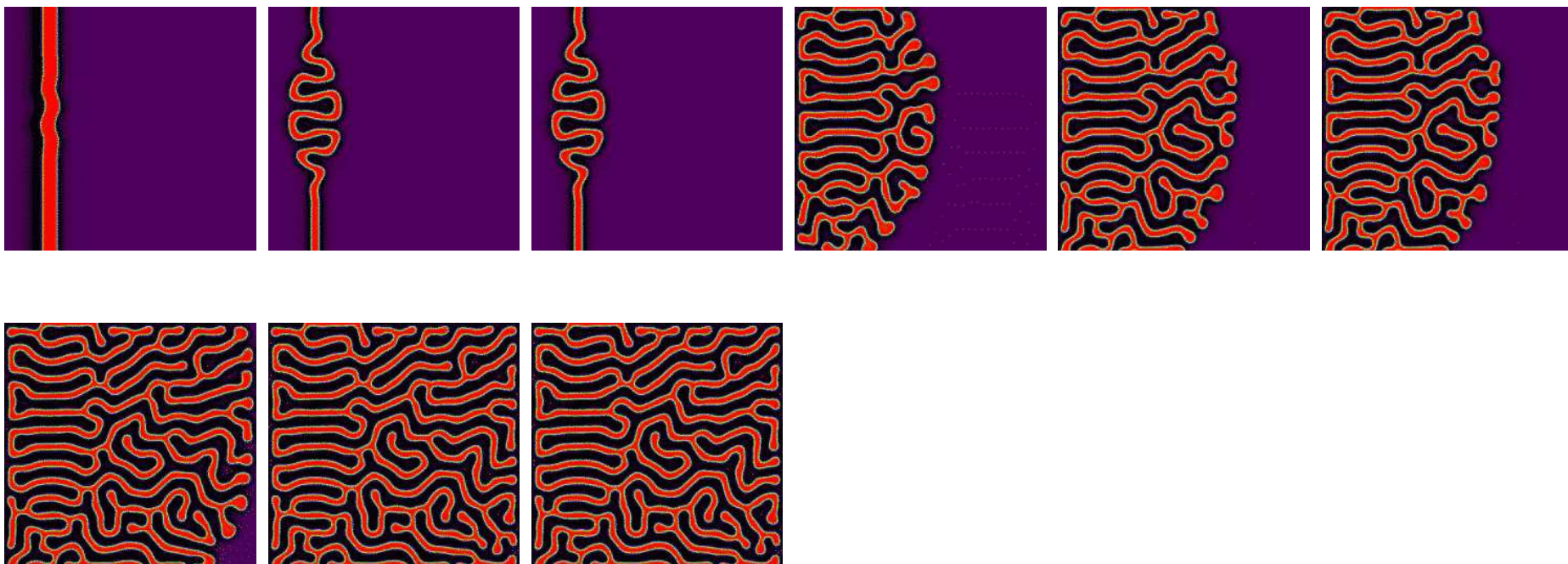
Equation harmonique dissipative forcée



Sensibilité aux conditions initiales, chaos déterministe

Un même système d'équations différentielles ou aux dérivées partielles possède des solutions très divergentes pour une différence entre les conditions initiales arbitrairement petite. Ceci caractérise la **sensibilité aux conditions initiales** ou **chaos déterministe**.

Dans les phénomènes de réaction-diffusion, une réaction chimique oscillante a lieu en milieu visqueux. La compétition entre les vitesses de diffusions des réactifs et des produits et de l'oscillation de la réaction conduit à l'apparition de motifs apparemment désordonnés quoique parfaitement déterministes.



Conclusion

Connaissances considérées acquise :

- systèmes d'équations
- équations inhomogènes
- différentielle
- dérivées partielles
- opérateurs différentiels
- équations différentielles
- équations aux dérivées partielles