Master I Chimie Théorique Oran
éléments de mathématiques

Peter Reinhardt

Laboratoire de Chimie Théorique, Université Paris VI, 75252 Paris CEDEX 05,

Peter.Reinhardt@upmc.fr

Organisation

Quatre cours (1 h 30) pour rappeller les mathématiques utilisées et nécessaires en chimie théorique

- Dérivation et Intégration, en une et plusieurs dimensions
- Matrices et vecteurs
- Minimisations, recherche d'extrêmes (pas encore fait)
- Fonctions spéciales en chime théorique (pas encore fait)

Loin d'être complet, cela ne remplacera pas un enseignement de maths à part.

Fonctions, dérivées et intégrales

Fonctions, dérivées et intégrales

- Une fonction vit sur un espace, ici l'espace de nombres réels.
- Pour chaque $x \in \mathbb{R}$ il y a une et seulement une valeur $f(x)$ associée
- Définition : f est continu si pour toute suite h_i avec $\lim\limits_{i\to\infty} h_i = x_0$ la valeur $f(x_0)$ est unique et existe.
- Définition : f est dérivable en x_0 si f est continu en x_0 et la limite $\lim\limits_{h\to 0} \dfrac{f(x_0 \pm h) - f(x_0)}{\pm h} = f'(x_0)$ est unique et existe.
- Exemple : $f(x) = a\,x + b$, alors $\dfrac{a(x+h) + b - (ax+b)}{h} = a$
- Par conséquent : soit $p_n(x)$ un polynôme de degré n en x : $p_n(x) = \sum\limits_{i=0}^{n} a_i\,x^i$.

$$\frac{d}{dx} p_n(x) \;=\; \sum_{i=1}^{n} a_i\,i\,x^{i-1}$$

Fonctions, dérivées et intégrales

Définition de l'exponentiel e^x :

$$\frac{d}{dx}e^x \;=\; e^x$$

Proposition : $e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$

Preuve :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}e^x &= \frac{d}{dx}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\frac{d}{dx}x^k = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{k!}x^{k-1}\\ &= \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(k-1)!}x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}x^k = e^x\end{aligned}$$

Corrolaire :

$$e = e^1 = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{24} + \frac{1}{120} + \ldots = 2.718281828459...$$

Fonctions, dérivées et intégrales

Nombres complexes : $z = a + ib$, avec $i^2 = -1$

- nombre complexe conjugée à z : $\bar{z} = a - ib$, donc $z\bar{z} = (a+ib)(a-ib) = a^2 - (ib)^2 = a^2 + b^2 = |z|^2$
- $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$
- Par série infinie :

$$\begin{aligned} \sin x &= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} \pm \\ \cos x &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} \pm \end{aligned}$$

- Par conséquent :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\sin x &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} \pm = \cos x \\ \frac{d}{dx}\cos x &= -\frac{x}{1!} + \frac{x^3}{3!} - \frac{x^5}{5!} \pm = -\sin x \end{aligned}$$

Règles de dérivation

- Produit de fonctions :
$$\frac{d}{dx}(f(x)g(x)) = \left(\frac{d}{dx}f(x)\right)g(x) + f(x)\left(\frac{d}{dx}g(x)\right)$$
- Fonctions sucessives : $\frac{d}{dx}f(g(x)) = \left(\frac{d}{du}f(u)\right)\left(\frac{d}{dx}g(x)\right)$
- Logarithme : inverse de l'exponentiel, $y = e^x \leftrightarrow \ln y = x$
- Logarithme : $y = \frac{dy}{dx} \Longrightarrow \frac{1}{y} = \frac{dx}{dy} = \frac{d}{dy}\ln y$ et alors $\frac{d}{dx}\ln x = \frac{1}{x}$
- Fonctions à plusieurs variables : $\frac{\partial}{\partial x}f(x,y)$ ne concerne que la dépendance de x; y est une constante.
- Théorème de Schwarz :

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

Intégration

Opération inverse de la dérivation

$$\int \frac{d}{dx} f(x)\, dx \;=\; f(x) + C$$

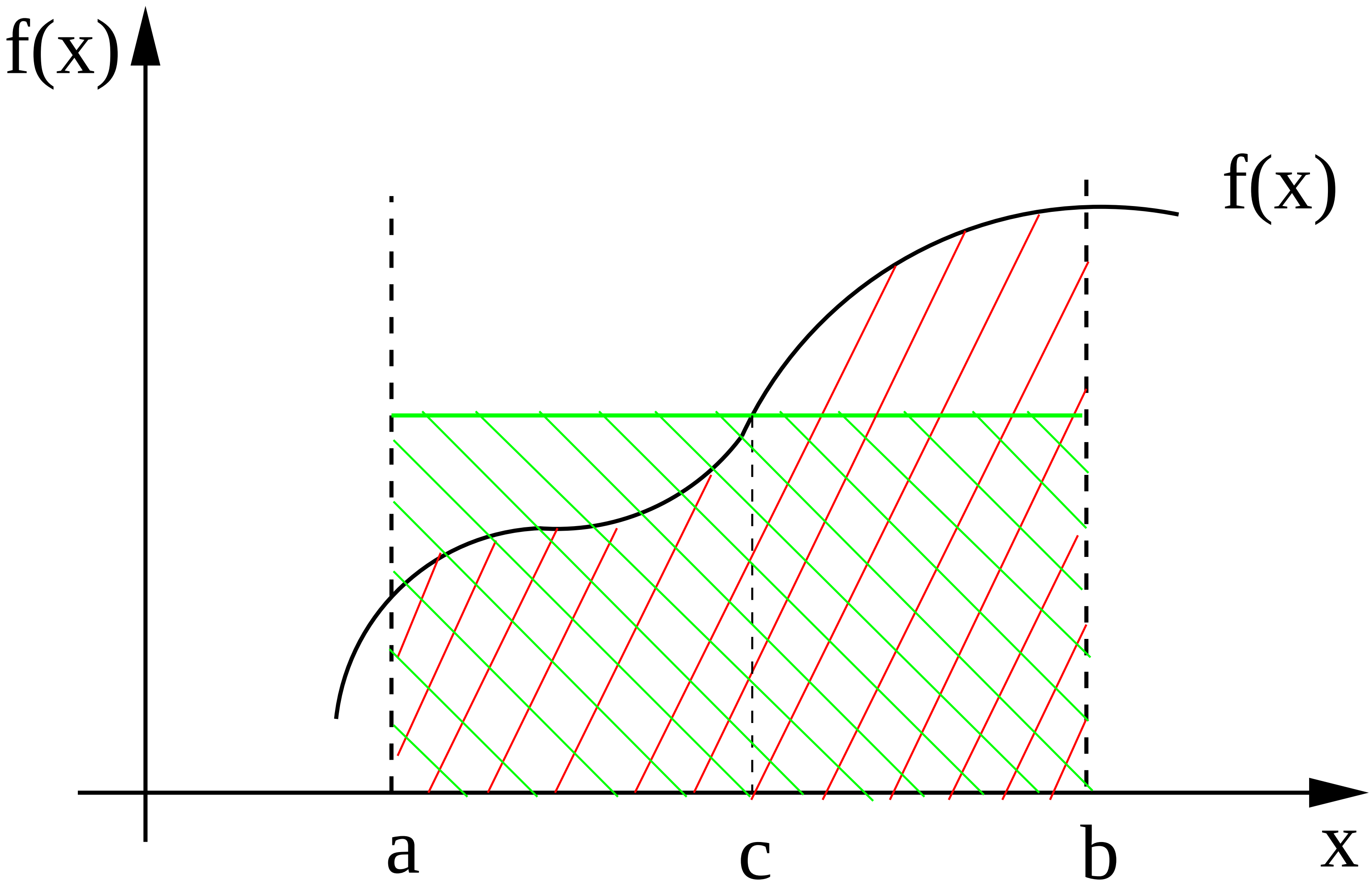
Moyenne

$$\int_a^b f(x)\, dx \;=\; (b-a)\, f(c) \quad \text{avec} \quad c \in [a,b]$$

Fonction primitive $F(x)$:

$$\int_a^b f(x)\, dx = [F(x)]_a^b = F(b) - F(a) \quad \text{avec} \quad \frac{d}{dx} F(x) = f(x)$$

Intégration



Intégration

Exemple :

$$\int_a^b e^x \, dx \; = [e^x]_a^b = e^b - e^a$$

En particulier

$$\int_a^b f(x) \, dx \; = \; \int_a^c f(x) \, dx \; + \int_c^b f(x) \, dx$$

$$\int_a^b f(x) \, dx \; = \; - \int_b^a f(x) \, dx$$

$$\int_a^b \left(\mu \, f(x) + \lambda \, g(x) \right) \, dx \; = \; \mu \int_a^b f(x) \, dx \; + \; \lambda \int_a^b g(x) \, dx$$

Intégration

Techniques :

- Intégration par parties

$$\int_a^b u'(x)v(x)\,dx \;=\; [u(x)v(x)]_a^b - \int_a^b u(x)v'(x)\,dx$$

- Intégration par substitution :

$$\int_a^b f(u(x))u'(x)\,dx \;=\; \int_{u(a)}^{u(b)} f(u)\,du$$

par substitution $x \rightarrow u(x)$ et $\dfrac{du}{dx} = u'(x) \rightarrow du = u'(x)dx$

- Exemple : $\displaystyle\int_0^{\pi/2} \sin x \,\cos x \,dx$
- Exemple de substitution inverse : $\displaystyle\int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx$

Intégration

Intégration en plusieurs dimensions

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2+z^2)}\,dx\,dy\,dz = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx\right)^3$$

car x, y et z indépendants, comme $\left(\sum_i a_i\right)\left(\sum_i b_j\right) = \sum_i\sum_j a_i b_j$

Exemple :

$$\int\int \left(x^2 - y^2\right)\,dx\,dy = \left(\int x^2\,dx\right)\left(\int dy\right) - \left(\int dx\right)\left(\int y^2\,dy\right)$$

Echange de variables

$$\int_{x_1}^{x_2}\int_{y_1}^{y_2} f(x,y)\,dy\,dx = \int_{y_1}^{y_2}\int_{x_1}^{x_2} f(x,y)\,dx\,dy$$

(si $\int_{x_1}^{x_2}\int_{y_1}^{y_2} |f(x,y)|\,dy\,dx$ existe — théorème de Fubini)

Changement de coordonnées

Coordonnées polaires par $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$, car cercle de rayon r: $x^2 + y^2 = r^2$; transformation de l'élément de volume $dx\,dy \longrightarrow r\,dr\,d\varphi$
Exemple : intégration de $f(x, y) = x\,y^2$ sur le demi-cercle de rayon R et $x \geq 0$

$$\begin{aligned}
\int_0^R \int_{-\sqrt{R^2-x^2}}^{\sqrt{R^2-x^2}} x\,y^2\,dy\,dx &= \int_0^R x\left(\int_{-\sqrt{R^2-x^2}}^{\sqrt{R^2-x^2}} y^2\,dy\right)dx \\
= \frac{2}{3}\int_0^R x\,(R^2-x^2)^{3/2}\,dx &= \frac{1}{3}\int_0^{R^2}(R^2-u)^{3/2}\,du \\
= -\frac{1}{3}\,\frac{2}{5}\left[(R^2-u)^{5/2}\right]_0^{R^2} &= \frac{2}{15}R^5
\end{aligned}$$

Ou bien

$$\begin{aligned}
\int_0^R \int_{-\sqrt{R^2-x^2}}^{\sqrt{R^2-x^2}} x\,y^2\,dy\,dx &= \int_0^R \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (r\cos\varphi)(r\sin\varphi)^2\,r\,d\varphi\,dr \\
= \int_0^R r^4\,dr\ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\varphi\ \sin^2\varphi\,d\varphi &= \frac{1}{5}R^5\,\frac{2}{3} = \frac{2}{15}R^5
\end{aligned}$$

Changement de coordonnées

Coordonnées sphériques par $x = r\cos\varphi\sin\theta$, $y = r\sin\varphi\sin\theta$, $z = r\ \cos\theta$, car sphère de rayon r: $x^2+y^2+z^2=r^2$;

- Transformation de l'élément de volume $dx\,dy\,dz \longrightarrow r^2\,dr\,d\varphi\,d\theta$
- Volume d'une sphère de rayon R :

$$\begin{aligned}\int_{-R}^{R}\int_{-\sqrt{R^2-z^2}}^{\sqrt{R^2-z^2}}\int_{-\sqrt{R^2-z^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-z^2-y^2}} 1\,dx\,dy\,dz &= \int_0^R\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} r^2\ \sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,dr \\ \int_0^R r^2\,dr\ \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{=2\pi}\underbrace{\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta}_{=2} &= \frac{4}{3}\pi\,R^3\end{aligned}$$

- Exemple : intégration de $f(x,y,z)=e^{-r^2}$ dans l'espace 3D

$$\int\int\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2+z^2)}\,dx\,dy\,dz = \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} e^{-r^2}\,r^2\ \sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,dr$$

$$= \int_0^{\infty} e^{-r^2}\,r^2\,dr\int_0^{2\pi} d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta = 4\pi\int_0^{\infty} e^{-r^2}\,r^2\,dr$$

Changement de coordonnées

L'intégrale $\displaystyle\int_0^\infty e^{-r^2} r^2\, dr$

$$\int_0^\infty \underbrace{e^{-r^2} r}_{u'} \underbrace{r}_{v}\, dr \quad = \quad \left[\frac{1}{2} r e^{-r^2}\right]_0^\infty + \frac{1}{2}\int_0^\infty e^{-r^2}\, dr$$

Rien gagné ...
En 2 dimensions

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(x^2+y^2)}\, dx\, dy &= \frac{1}{4}\int_0^{2\pi}\int_0^\infty e^{-r^2}\, r\, dr\, d\varphi \\ &= -\frac{\pi}{2}\int_0^\infty \frac{1}{2} e^{-u}\, du = \frac{\pi}{4}\end{aligned}$$

Par conséquent $\displaystyle\int_0^\infty e^{-r^2}\, dr = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ et $\quad \displaystyle 4\pi \int_0^\infty e^{-r^2}\, r^2\, dr = \sqrt{\pi^3}$

Matrices et Vecteurs

Vecteurs et espace vectoriel

- Vecteur = élément d'un espace vectoriel
- Espace vectoriel : 2 opérations "+" (intérieur) et "$*$" (extérieur) avec vecteurs a, b, c et deux scalaires μ et λ réels ou complexes :
  - il y a un vecteur zéro tel que $a + 0 = a$
  - pour chaque a il y a un $-a$ pour que $a + (-a) = 0$
  - $(a + b) + c = a + (b + c)$ (associativité)
  - il y a un scalaire 1 tel que $1 * a = a$
  - $\mu * (a + b) = \mu * a + \mu * b$ (distributivité)
- Produit scalaire $a.b$ bilinéaire :

$$\begin{aligned} (\mu * a + \lambda * b).c &= \overline{\mu}(a.c) + \overline{\lambda}(b.c) \\ a.b &= \overline{(b.a)} \end{aligned}$$

- Norme: $a.a \geq 0$, et $= 0$ seulement si $a = 0$, alors $|a| = \sqrt{a.a}$
- Angle entre vecteurs : $a.b = |a|\,|b|\,\cos\varphi$
- Orthogonal : $a.b = 0$

Vecteurs et espace vectoriel

Base dans un espace vectoriel :

- N vecteurs linéairement indépendants;

$$a_k \neq \sum_{i=1}^{k-1} \mu_i \, a_i$$

- max(N) = dimension de l'espace vectoriel

Construction d'une base orthonormale (Gram–Schmidt) à partir de N vecteurs

$$\begin{aligned} a'_k &= a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k . a''_i) \, a''_i \\ a''_k &= \frac{a'_k}{|a'_k|} \end{aligned}$$

Si tous les $a'_k \neq 0$, alors la base est linéairement indépendante.

Vecteurs et espace vectoriel

Représentation de base standard (3D) :

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad e_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Un quelconque vecteur

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

et produit scalaire “standard”

$$\vec{a}.\vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$$

Vecteurs et espace vectoriel

Exemple, espace 3D : prenons 4 vecteurs

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad a_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad a_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cette représentation sous-entend déjà une base ! Orthonormons :

$$a_1' = a_1; \qquad a_1'' = \frac{a_1'}{\sqrt{a_1'.a_1'}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$a_2' = a_2 - (a_2.a_1'')\, a_1'' = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} - \frac{3}{3} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Vecteurs et espace vectoriel

Suite :

$$a_2'' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} a_3' &= a_3 - (a_3.a_1'')a_1'' - (a_3.a_2'')a_2'' \\ &= \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix} \\ a_3'' &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} ; \qquad \text{puis} \qquad a_4' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Conclusion : les 3 vecteurs a_1'', a_2'' et a_3'' forment une base orthonormale pour cet espace tridimensionnel.

Matrices

- Matrice **A** = représentation d'un opérateur linéaire $\hat{A}$ dans une base
- Linéaire : $\hat{A}(\mu a + \lambda b) = \mu \hat{A} a + \lambda \hat{A} b$, en particulier $\hat{A}\, 0 = 0$ (vecteur zéro).
- Eléments de la matrice :

$$A_{ij} = a_i.(\hat{A} a_j) = \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \qquad \{a_k\} = \text{base}$$

- Deux vecteurs $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{N} x_i\, a_i, \qquad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{N} y_i\, a_i$

  dans la même base
- Regardons

$$\begin{aligned} x.(\hat{A}.y) &= \langle x | \hat{A} y \rangle = \langle x | \hat{A} | y \rangle = \sum_{\alpha\beta} x_\alpha y_\beta \langle a_\alpha | \hat{A} | a_\beta \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} x_\alpha y_\beta = \sum_{\alpha\beta} A^\dagger_{\beta\alpha} x_\alpha y_\beta = \langle \hat{A}^\dagger x | y \rangle = (\hat{A}^\dagger x).y \end{aligned}$$

Matrices

- Définition de l'opérateur adjoint $\hat{A}^\dagger$:

$$\langle x|\hat{A}y\rangle = \langle \hat{A}^\dagger x|y\rangle \;\longrightarrow\; A^\dagger_{ij} = A_{ji}$$

- En particulier le produit scalaire $x.y$ des deux vecteurs

$$x.y = \sum_\alpha \sum_\beta x_\alpha y_\beta (a_\alpha . a_\beta) = \langle x|\hat{1}|y\rangle = \sum_\alpha \sum_\beta x_\alpha S_{\alpha\beta} y_\beta = x^\dagger \mathbf{S} y$$

- Si $\{a_k\}$ est un base orthonormale ($S_{ii} = 1$, $S_{ij} = 0$ pour $i \neq j$) :

$$x.y = \sum_k x_k y_k$$

Matrices

- Changement de la base par opérateur $\hat{B}$:

$$b_i = \hat{B} a_i$$

- Eléments de $\hat{B}$ dans la base $\{a_k\}$:

$$\hat{B}\,a_j = \sum_i b_{ij} a_j \quad \rightarrow \quad \langle a_k|\hat{B}|a_i\rangle = \sum_j b_{ij} S_{ij} = B_{ij}$$

  La matrice de la transformation n'est pas en général la matrice des coefficients des nouveaux vecteurs b dans la base $\{a_k\}$!

- Si la base $\{a_k\}$ est orthonormale, alors

$$\langle a_k|\hat{B}|a_i\rangle = \langle b_k|a_i\rangle$$

Matrices

- Transformation inverse :

$$a_i = \hat{B}^{-1} b_i = \underbrace{\hat{B}^{-1}\hat{B}}_{=1} a_i = a_i \ ,$$

alors

$$\langle b_i | b_j \rangle = \langle \hat{B} a_i | \hat{B} a_j \rangle = \langle a_i | \hat{B}^\dagger \hat{B} a_j \rangle$$

- Si les bases $\{a_k\}$ et $\{b_k\}$ sont orthonormales, alors

$$\langle b_i | b_j \rangle = \langle a_i | a_j \rangle \quad \longrightarrow \quad \hat{B}^\dagger \hat{B} = 1, \text{ donc } \hat{B}^\dagger = \hat{B}^{-1}$$

(Définition de “matrice orthogonale” ou “matrice unitaire”)

- Plus généralement :

$$\langle b_i | \hat{A} | b_j \rangle = \langle \hat{B} a_i | \hat{A} | \hat{B} a_j \rangle = \langle a_i | \hat{B}^\dagger \hat{A} \hat{B} | a_j \rangle$$

Transformation des éléments d’une matrice d’une base à une autre.

Matrices

Espace 2D, matrices de rotation

$$\mathbf{D}_\varphi = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}_\varphi^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = \mathbf{D}_\varphi^\dagger$$

Application : $\mathbf{D}_\varphi \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\ \cos\varphi - y\ \sin\varphi \\ x\ \sin\varphi + y\ \cos\varphi \end{pmatrix}$

$$\left|\mathbf{D}_\varphi \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\right| = \sqrt{(x\ \cos\varphi - y\ \sin\varphi)^2 + (x\ \sin\varphi + y\ \cos\varphi)^2}$$

$$= \sqrt{(x^2+y^2)(\sin^2\varphi + \cos^2\varphi)} = \sqrt{x^2+y^2} = \left|\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\right|$$

Espace de fonctions

Fonctions $f(x)$ avec produit scalaire

$$\langle f|g\rangle = \int f(x)g(x)\,dx$$

- Seulement fonctions pour lesquelles $\int |f(x)|^2\,dx = \langle f|f\rangle$ existe
- Le produit scalaire est bilinéaire :

$$\begin{aligned}\langle (f+g)|h\rangle &= \int (f(x)+g(x))h(x)\,dx \\ &= \int f(x)h(x)\,dx + \int g(x)h(x)\,dx = \langle f|h\rangle + \langle g|h\rangle\end{aligned}$$

- Fonctions orthogonales : $\displaystyle\int f(x)g(x)\,dx = 0$
- Fonctions normées $\displaystyle\int |f(x)|^2\,dx = 1$

Espace de fonctions

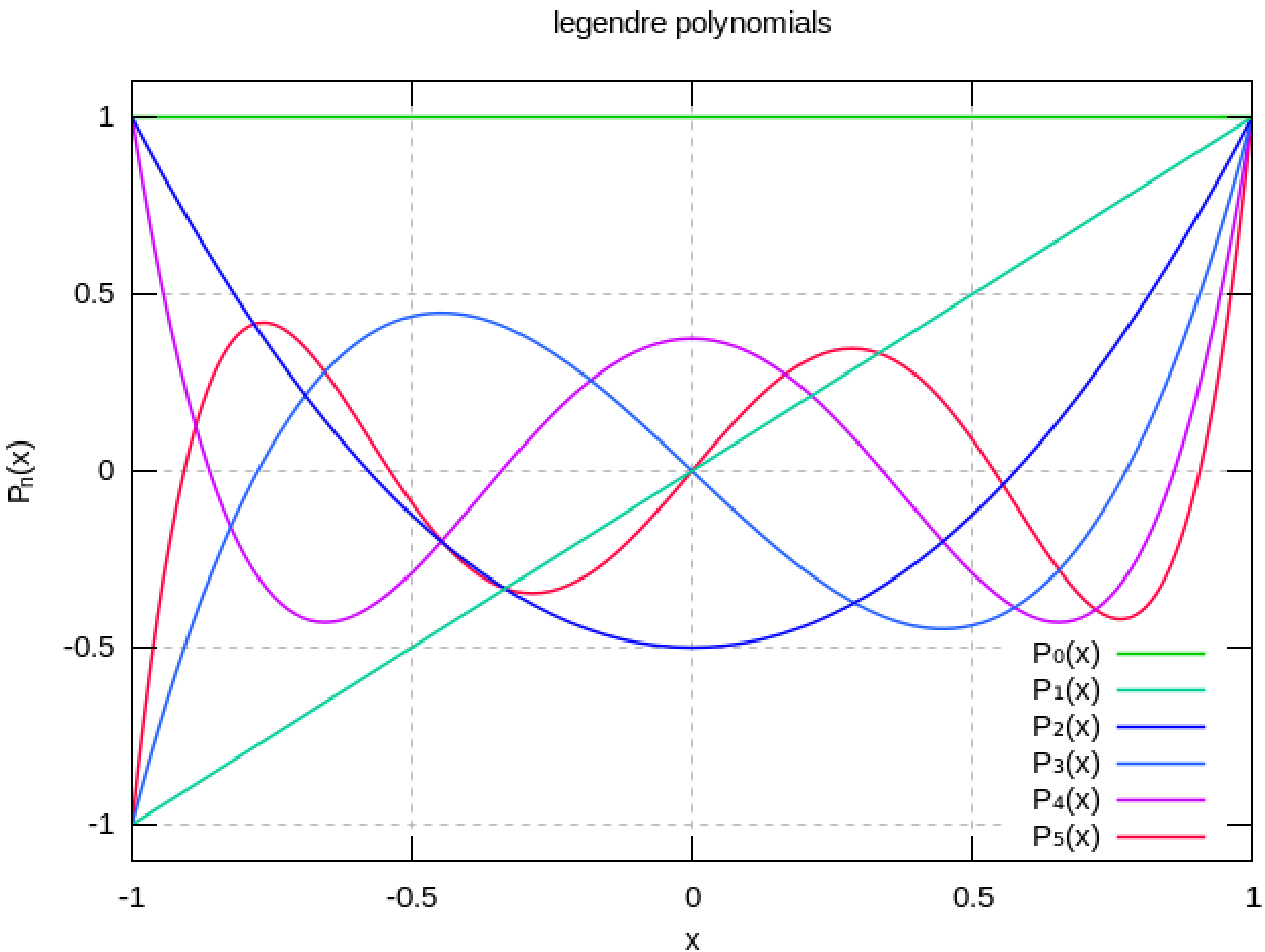
Exemple : les polynômes de Legendre $P_\ell(x)$, définies sur l'intervalle $[-1, 1]$

- $P_0(x) = 1$, constant. $\int_{-1}^{1} |P_0(x)|^2 \, dx = 2$
- $P_1(x) = ax + b$, orthogonal sur $P_0(x)$
- $$\langle ax + b | P_0 \rangle = \int_{-1}^{1} (ax + b) \, dx = 2b,$$

  donc $b = 0$ et $P_1(x) = x$
- $P_2(x)$ orthogonal à $P_0(x)$ et $P_1(x)$, de forme $P_2(x) = ax^2 + bx + c$
- $$\int_{-1}^{1} (ax^2 + bx + c) \, dx = \int_{-1}^{1} (ax^2 + bx + c) \, x \, dx = 0,$$

  donc $b = 0$ et $2a/3 + 2c = 0$, alors par exemple $P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$
- Plus systématiquement : orthogonalisation par procédure Gram-Schmidt, avec condition $P_\ell(1) = 1$

Espace de fonctions



Déterminants

Forme multilinéaire alternante $\mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}$

- $\det(a_1, \ldots, ba_j + cv, \ldots, a_n) = b\det(\mathbf{A}) + c\det(a_1, \ldots, v, \ldots, a_n)$
- $\det(a_1, \ldots, a_i, \ldots, a_j, \ldots, a_n) = -\det(a_1, \ldots, a_j, \ldots, a_i, \ldots, a_n)$

Soit $(1, 2, \ldots, n)$ donné, une permutation élémentaire P échange deux éléments :

$$P_{ij}(1, 2, \ldots, i, \ldots, j, \ldots, n) = -(1, 2, \ldots, j, \ldots, i, \ldots, n)$$

Permutation générale P est un succession de permutations élémentaires, séquence pas unique, mais signe de P qu'on notera $(-1)^P$

$$\det(\mathbf{A}) = |\mathbf{A}| = \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^{n} a_{iP(i)}$$

Déterminants

Exemple : matrice 3×3

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

Règles de calcul — $\mathbf{A} = (a_1, \ldots, a_i, \ldots, a_n)$

- Il y a $n!$ termes à calculer (nombre de permutations pour n éléments) .
- $\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A}) \det(\mathbf{B})$
- $\det(\mathbf{A}^{-1}) = \dfrac{1}{\det(\mathbf{A})}$
- $\det(\mathbf{A}) = 0 \ \rightarrow$ les colonnes de $\mathbf{A}$ sont linairement dépendantes.

Valeurs et vecteurs propres

Définition : si $\hat{A}\,x = \lambda\,x$, alors on appelle λ valeur propre et x vecteur propre associé à λ.

- On trouve les valeurs/vecteurs propres par $|\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I}| = 0$
- Exemple : $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I}) = (a-\lambda)(b-\lambda) - c^2 = \lambda^2 - (a+b)\lambda + ab - c^2$$

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I}) = 0 \;\rightarrow\; \lambda_{1,2} = \frac{a+b}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 + c^2}$$

- Une matrice symétrique ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$) de dimension $n \times n$ a n valeurs propres réelles et n vecteurs propres
- Il existe alors une base dans laquelle $\mathbf{A}$ est diagonale.
- Regardons l'élément $\langle x|\hat{A}|y\rangle = \langle x|\hat{A}y\rangle = \sum_{ij} x_i A_{ij} y_j = \sum_{ij} A^\dagger_{ji} x_i y_j = \langle \hat{A}^\dagger x|y\rangle$

Valeurs et vecteurs propres

- Supposons que $\hat{A}x = \lambda x$ et $\hat{A}y = \mu y$ avec $\lambda \neq \mu$ pour une matrice symétrique $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

$$\mu\langle x|y\rangle = \langle x|\hat{A}y\rangle = \langle \hat{A}^\dagger x|y\rangle = \langle \hat{A}x|y\rangle = \lambda\langle x|y\rangle \rightarrow \langle x|y\rangle = 0,$$

  c'est-à-dire x et y sont orthogonales.

- $\hat{A}$ peut être écrit comme $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i|x_i\rangle\langle x_i|$ (décomposition spectrale).
- L'opérateur $\hat{P} = |x_i\rangle\langle x_i|$ est un projecteur, avec $\hat{P}^2 = \hat{P}$.
- On définit le commutateur de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ comme $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.
- Si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, alors tout vecteur propre de $\hat{A}$ est aussi vecteur propre de $\hat{B}$:

$$\hat{A}\,x = \lambda\,x \qquad \rightarrow \qquad \hat{A}\,\hat{B}\,x = \hat{B}\,\hat{A}\,x = \hat{B}\,(\lambda\,x) = \lambda\hat{B}x$$

  x et $\hat{B}x$ sont alors vecteurs propres pour la même valeur propre, donc $\mu x = \hat{B}\,x$, x alors aussi vecteur propre de $\hat{B}$.

Dans une base non-orthogonale

En développant dans la base $\{a_\alpha\}$: $x = \sum_\alpha c_\alpha a_\alpha$

$$\hat{A}\,x = \lambda\,x \qquad \rightarrow \qquad \sum_\alpha c_\alpha\,\hat{A}a_\alpha = \lambda \sum_\alpha c\alpha\,a\alpha$$

et en multipliant à gauche par a_β, nous avons

$$\sum_\alpha c_\alpha \underbrace{a_\beta.\hat{A}a_\alpha}_{=\langle a_\beta|\hat{A}|a_\alpha\rangle = A_{\beta\alpha}} = \lambda \sum_\alpha c_\alpha \underbrace{a_\beta.a_\alpha}_{=\langle a_\beta|a_\alpha\rangle = S_{\beta\alpha}} \rightarrow \mathbf{A}x = \lambda\mathbf{S}x$$

- La base initiale est normalisée ($S_{\alpha\alpha} = 1$), mais pas orthogonale.
- On transforme le problème en un problème dans une base orthogonale
- Changement de base par une matrice $\mathbf{X}$, avec $\mathbf{X}^\dagger.\mathbf{S}.\mathbf{X} = 1$
- Nouveau problème : $\underbrace{\mathbf{X}^\dagger.\mathbf{A}.\mathbf{X}}_{\tilde{\mathbf{A}}}.\underbrace{\mathbf{X}^{-1}x}_{\tilde{x}} = \lambda\,\underbrace{\mathbf{X}^\dagger.\mathbf{S}.\mathbf{X}}_{=1}.\underbrace{\mathbf{X}^{-1}x}_{\tilde{x}}$
- Multiplication de la solution $\mathbf{X}^{-1}x$ avec $\mathbf{X}$ donne la solution cherchée x.
- Pas besoin de déterminer $\mathbf{X}^{-1}$

Dans une base non-orthogonale

- Par exemple par $\mathbf{X} = \mathbf{S}^{-1/2}$:
  - Diagonalisation de $\mathbf{S} \longrightarrow \mu_i$ valeurs propres > 0
  - Remplacement $\mu \longrightarrow \mu^{-1/2}$ sur la diagonale
  - Retransformation dans la base d'origine de la matrice des $\mu^{-1/2}$
  - $(\mathbf{S}^{-1/2})^\dagger = \mathbf{S}^{-1/2}$ car $\mathbf{S}^\dagger = S$
- Nouveau problème :

$$\underbrace{\mathbf{S}^{-1/2}.\mathbf{A}.\mathbf{S}^{-1/2}}_{\tilde{\mathbf{A}}}.\underbrace{(\mathbf{S}^{-1/2})^{-1}x}_{\tilde{x}} = \lambda\underbrace{\mathbf{S}^{-1/2}.\mathbf{S}.\mathbf{S}^{-1/2}}_{=1}.\underbrace{(\mathbf{S}^{-1/2})^{-1}x}_{\tilde{x}}$$

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{x} = \lambda\tilde{x}$$

- Multiplication de la solution $(\mathbf{S}^{-1/2})^{-1}x$ avec $\mathbf{S}^{-1/2}$ donne la solution cherchée x.