HAC310X Mathématiques pour la chimie S3

J.L. Ramírez Alfonsín
Institut Montpelliérain Alexander Grothendieck,
Université de Montpellier
Place Eugène Bataillon, 34095, Montpellier

10 septembre 2024

Chapitre 1

Un peu de calcul vectoriel

1.1 Vecteur

Un *vecteur* est un objet mathétamique caractérisé par : une *direction*, un *sens*, une *norme*. La physique utilise régulièrement des vecteurs pour représenter des quantités ayant à la fois une *grandeur* et une *direction*.

Un vecteur $\mathbf{u}$ est représenté par un segment orienté (une flèche), ayant pour extrémités un point A de départ et un point B d'arrivée, on le note $\overrightarrow{AB}$.
- la direction de $\mathbf{u}$ est celle de la droite (AB)
- le sens de $\mathbf{u}$ est le sense de l'origine A vers l'extrémité B
- la norme de $\mathbf{u}$ est la longueur du segment $[AB]$, notée $\|\mathbf{u}\|$.

Deux vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$ sont égaux, $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ si leurs directions, sens et normes sont les mêmes.

Soient A, B et C trois points tels que $\mathbf{u} = \overrightarrow{AB}$ et $\mathbf{v} = \overrightarrow{BC}$. Alors, la *somme* de $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ est définie par $\mathbf{u} + \mathbf{v} = \overrightarrow{AC}$.

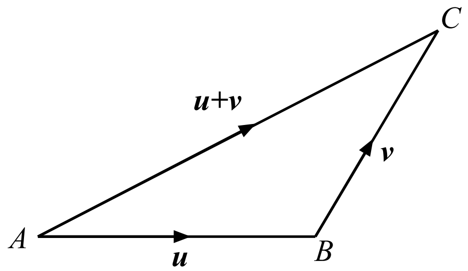

FIGURE 1.1 – Somme de deux vecteurs

La multiplication de $\mathbf{v}$ par un nombre (scalaire) c est le vecteur $c\mathbf{v}$ avec le même sens que $\mathbf{v}$, une norme de c fois la longueur de $\mathbf{v}$ et la même direction que $\mathbf{v}$ si c est positif ou une direction opposée à celle de $\mathbf{v}$ si c est négatif.

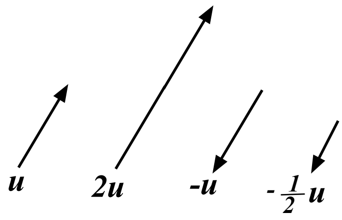

FIGURE 1.2 – Multiplication du vecteur $\mathbf{u}$ par un scalaire

1.1.1 Le produit scalaire

Soit $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ deux vecteurs du plan. On appelle *produit scalaire* [1] de $\mathbf{u}$ par $\mathbf{v}$, noté $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$, le nombre réel définit par
- $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$ si l'un des deux vecteurs $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ est nul
- $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \|\mathbf{u}\| \times \|\mathbf{v}\| \times \cos(\mathbf{u}; \mathbf{v})$ dans le cas contraire.

Quelques propriétés

- Pour tous vecteurs $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$, on a $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}$.
- Pour tous vecteurs $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ et $\mathbf{w}$, on a

$$\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{w}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} \text{ et } \mathbf{u} \cdot (c\mathbf{v}) = c(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \text{ avec } c \text{ un réel.}$$

Quelques identités remarquables

Pour tous vecteurs $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ on a
- $(\mathbf{u} + \mathbf{v})^2 = \mathbf{u}^2 + 2\mathbf{uv} + \mathbf{v}^2$
- $(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 = \mathbf{u}^2 - 2\mathbf{uv} + \mathbf{v}^2$
- $(\mathbf{u} + \mathbf{v})(\mathbf{u} - \mathbf{v}) = \mathbf{u}^2 - \mathbf{v}^2$

Nous avons le lien suivant entre le produit scalaire et la norme

$$\mathbf{u}^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = \|\mathbf{u}\| \times \|\mathbf{u}\| \times \cos(\mathbf{u}; \mathbf{u}) = \|\mathbf{u}\|^2 \times \cos 0 = \|\mathbf{u}\|^2.$$

Nous avons que

$$\text{les vecteurs } \mathbf{u} \text{ et } \mathbf{v} \text{ sont orthogonaux si et seulement si } \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0.$$

En effet,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0 \iff \|\mathbf{u}\| \times \|\mathbf{v}\| \times \cos(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = 0 \iff \cos(\mathbf{u}; \mathbf{v}) = 0 \iff \mathbf{u} \text{ et } \mathbf{v} \text{ sont orthogonaux.}$$

1. La notion de produit scalaire est apparue pour les besoins de la physique. Le concept relativement récent et a été introduit au milieu du XIXe siècle par le mathématicien allemand Hermann Grassmann(1809-1877). Il fut baptisé produit scalaire par William Hamilton (1805-1865) en 1853.

On peut démontrer qu'un ensemble de vecteurs non nuls et mutuellement orthogonaux est toujours linéairement indépendant. Ceci nous amène à la définition suivante.

Un ensemble de vecteurs de $\mathbb{R}^n$ est dit *orthogonal* si deux vecteurs distincts quelconques de cet ensemble sont orthogonaux. Il est dit *orthonormal* s'il est orthogonal et si chaque vecteur de cet ensemble est *unitaire*, c'est-à-dire, de longueur 1. Une base *orthogonale* est une base qui est aussi un ensemble orthogonal. Une base *orthonormale* est une base qui est aussi un ensemble orthonormal.

Supposons que le plan est muni d'un repère orthonormé $(O; \mathbf{i}, \mathbf{j})$. Soit $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ deux vecteurs de coordonnées respectives (x, y) et (x', y'), c'est-à-dire, $\mathbf{u} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j}$ et $\mathbf{v} = x'\mathbf{i} + y'\mathbf{j}$ avec $\mathbf{i} = (1, 0)$ et $\mathbf{j} = (0, 1)$. Alors,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = xx' + yy'.$$

En effet,

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} &= (x\mathbf{i} + y\mathbf{j}) \cdot (x'\mathbf{i} + y'\mathbf{j}) \\
&= xx'\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} + xy'\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} + yx'\mathbf{j} \cdot \mathbf{i} + yy'\mathbf{j} \cdot \mathbf{j} \\
&= xx'\|\mathbf{i}\|^2 + xy'\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} + yx'\mathbf{j} \cdot \mathbf{i} + yy'\|\mathbf{j}\|^2 \\
&= xx' + yy'
\end{aligned}$$

car $\|\mathbf{i}\| = \|\mathbf{j}\| = 1$ (le repère étant normé) et $\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{i} = 0$ (le repère étant orthogonal).

1.1.2 Le produit vectoriel

Le produit vectoriel des vecteurs $\mathbf{u} = (x, y, z)$ et $\mathbf{v} = (x', y', z')$ dans l'espace 3-dimensionnel est le vecteur $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ défini par

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = (yz' - zy')\mathbf{i} + (zx' - xz')\mathbf{j} + (xy' - yx')\mathbf{k}$$

avec $\mathbf{i} = (1, 0, 0), \mathbf{j} = (0, 1, 0)$ et $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$.

Nous avons que $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$:

- a pour norme $\|\mathbf{u} \times \mathbf{v}\| = \|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\| \sin\theta$ où θ est l'angle entre $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$;
- est orthogonal à $\mathbf{u}$ et à $\mathbf{v}$;
- est tel que les vecteurs $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ et $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ soient orientés de la même façon que le sont les vecteurs $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ et $\mathbf{k}$.

L'expression habituelle du produit vectoriel utilise un déterminant (voir chapitre suivant pour le définition du déterminant) :

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = \det \begin{pmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ x' & y' & z' \end{pmatrix}.$$

Le produit scalaire de deux vecteurs peut-être interprété géométriquement comme la longueur de la projection de l'un sur l'autre. En effet, considéront la projection du vecteur u sur v dans la figure 1.4

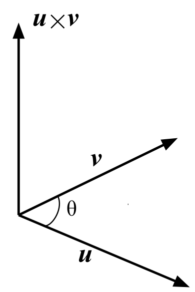

FIGURE 1.3 – Produit vectoriel

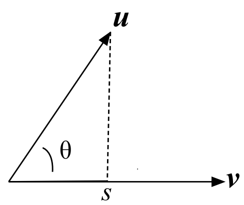

FIGURE 1.4 – Projection de **u** sur **v**.

Nous avons $\mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = \|\mathbf{v}\| \times (\|\mathbf{u}\| \cos(\mathbf{u}; \mathbf{v})) = \|\mathbf{v}\| s$. Ceci nous permets de calculer l'aire du parallélogramme $Aire(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ engendré par **u** et **v**, voir figure 1.5

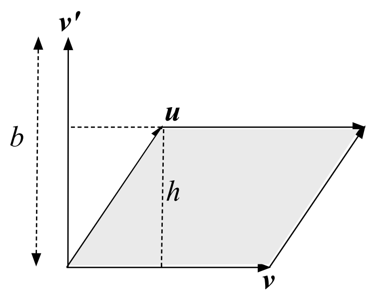

FIGURE 1.5 – Parallélogramme engendré par **u** et **v**.

En effet, soit $\mathbf{v} = (x_1, y_1)$ et $\mathbf{u} = (x_2, y_2)$ et $\mathbf{v}' = (-y_1, x_1)$. On remarque que $\mathbf{v}'$ est perpendiculaire à **v** et $\|\mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}'\|$. Nous avons que la projection de **u** sur $\mathbf{v}'$ est égale à

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}' = \|\mathbf{v}'\| \times h = \|\mathbf{v}\| \times h = b \times h = Aire(\mathbf{u}, \mathbf{v})$$

On remarque que

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}' = |x_1 y_2 - y_1 x_2|.$$

Maintenant, on considère l'aire d'un parallélogramme engendré par deux vecteur $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ dans l'espace, voir figure 1.6

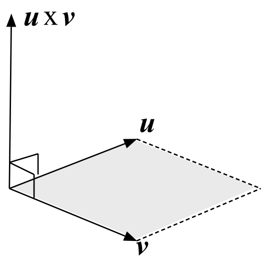

FIGURE 1.6 – Parallélogramme engendré par $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ dans l'espace.

En fait, le produit vectoriel de $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ est lié à la surface A que les deux vecteurs couvrent, à savoir que $Aire(P) = \|\mathbf{u} \times \mathbf{v}\|$.

Exemple 1 *Calculer l'aire du parallélogramme P dans $\mathbb{R}^3$ engendré par $\mathbf{u} = (1, 2, 3)$ et $\mathbf{v} = (2, 2, 2)$.*

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = \det \begin{pmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ 1 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix} = \mathbf{i}(4-6) - \mathbf{j}(2-6) + \mathbf{k}(2-4) = -2\mathbf{i} + 4\mathbf{j} - 2\mathbf{k} = (2, 4, -2).$$

Nous avons donc

$$Aire(P) = \|\mathbf{u} \times \mathbf{v}\| = \sqrt{2^2 + 4^2 + (-2)^2} = \sqrt{4 + 16 + 4} = \sqrt{24}.$$

Comme une extension de la façon dont le produit vectoriel est lié à la surface engendré par ses deux vecteurs, nous définissons le *produit mixte* comme suit. Soient $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ et $\mathbf{w}$, trois vecteurs non nuls dans l'espace. Alors le produit mixte est défini comme $\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w})$. Pour l'interprétation géométrique, il peut être démontré que $\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w})$ correspond au volume du parallélépipède que les trois vecteurs engendrent, voir figure 1.7

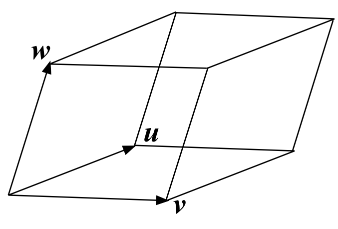

FIGURE 1.7 – Parallélépipède engendré par $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ et $\mathbf{w}$.