Épreuve de Session 2

Durée 2h. Documents autorisés. Vous avez accès à votre répertoire personnel sur le réseau interne. Vous n'avez pas accès à l'internet. La barème est à titre indicatif et peut encore changer. Il faut que vos programmes soient **exécutables** par la commande `python3 nomdufichier.py` et qu'ils **affichent leurs résultats**. Notamment, il ne sera pas accepté que les résultats ne soient accessibles que par le débogueur de votre environnement de développement. Vous n'avez pas le droit d'utiliser la bibliothèque `SciPy`.

Exercice 1. Recherche de zéros (7 points)

Une variante du *modèle de Kronig-Penney* donne l'inéquation suivante pour les bandes d'énergies E qui peuvent prendre un électron de valence dans un solide :

$$-1 \leq \cos(\kappa) + \gamma \frac{\sin(\kappa)}{\kappa} \leq 1\,.$$

Ici $\kappa = ka$ avec a la distance entre les atomes du réseau cristallin, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, et γ est un paramètre du modèle.

1. Tracez les fonctions $\cos(\kappa) + \gamma \frac{\sin(\kappa)}{\kappa} \pm 1$ en fonction de κ pour $\kappa \in [-2\pi, 2\pi]$ et $\gamma = 5$.
2. Réalisez un programme qui calcule les valeurs de κ permises pour κ entre 0 et 2π et $\gamma = 5$, avec une précision de $\leq 10^{-5}$. (La figure de la partie 1. peut vous aider d'obtenir des valeurs de départ pour votre code.) Modèle de sortie :

```
Bande d'énergie entre kappa = x.xxxxxxxxxxxxxxx et kappa = x.xxxxxxxxxxxxxxx
Bande d'énergie entre kappa = x.xxxxxxxxxxxxxxx et kappa = x.xxxxxxxxxxxxxxx
```

Exercice 2. Calcul matriciel et algèbre linéaire numérique (8 points)

On rappelle la valeur limite de la série géométrique :

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N} b^k = (1-b)^{-1} \qquad \text{(si } b \text{ est tel que la série converge)} \qquad (*)$$

(a) Réalisez une fonction `sgeom(B, N=100)` avec B une matrice $n \times n$ représentée par un tableau `numpy`. Cette fonction renverra la matrice

$$\sum_{k=0}^{N} B^k$$

où les puissances impliquent le produit matriciel et $B^0 \equiv \mathbb{1}$ est la matrice identité. Pour rappel, le nombre de lignes d'un tableau `B` s'obtient avec `B.shape[0]`.

(b) Réalisez un programme qui se sert de la fonction `sgeom` pour numériquement calculer l'inverse A^{-1} de la matrice

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

Instructions : Posez $B = \mathbb{1} - A$ (alors $A = \mathbb{1} - B$) et appliquez la formule $(*)$ aux matrices.

(c) Réalisez un programme qui résout le système linéaire $A\vec{x} = \vec{b}$ avec l'aide de la matrice A^{-1} calculée dans (b). Ici on prend $\vec{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Exercice 3. Équations différentielles (5 points)

On donne l'équation différentielle

$$y'(x) + \alpha\, y(x)^3 + \beta = 0$$

et la condition initiale $y(1) = 1$. Calculez une solution numérique de ce problème de Cauchy pour $\alpha = 1$, $\beta = -2$ et $x \in [1,\ 2]$ avec une précision globale d'au moins 10^{-3}. Tracez la solution $y(x)$.