

## I Autour des matrices tridiagonales

Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 2$ , on pose  $A_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  et on note  $I_n$  la matrice identité d'ordre  $n$ .

Pour toute matrice  $M$  de  $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ , par convention  $M^0 = I_n$ .

Les trois sous-parties I.A, I.B et I.C sont indépendantes.

### I.A – Cas des matrices $3 \times 3$ et $4 \times 4$ — Applications en physique et en chimie

#### I.A.1) Préliminaires

Soit  $n \in \mathbb{N}^*$ . Soient  $A$  et  $B$  deux matrices de  $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ . On suppose qu'il existe  $P \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$  inversible telle que  $A = PBP^{-1}$ .

a) Montrer que pour tout  $k \in \mathbb{N}$ ,  $A^k = PB^kP^{-1}$ .

b) En déduire que pour tout  $N \in \mathbb{N}$ , pour tout  $a_0, \dots, a_N$  dans  $\mathbb{R}$  :  $\sum_{k=0}^N a_k A^k = P \left( \sum_{k=0}^N a_k B^k \right) P^{-1}$ .

c) Expliciter  $\sum_{k=0}^N a_k B^k$  lorsque  $B$  est la matrice diagonale :  $\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$ .

#### I.A.2) Diagonalisation d'une famille de matrices $3 \times 3$

On considère, dans cette question, les matrices  $A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  et  $J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ .

a) Déterminer une matrice diagonale  $D_3$  et une matrice inversible  $P_3$  telles que  $A_3 = P_3 D_3 P_3^{-1}$ .

b) On considère l'ensemble  $\mathcal{F} = \left\{ M(a, b, c) = \begin{pmatrix} a & c & b \\ c & a+b & c \\ b & c & a \end{pmatrix} \mid (a, b, c) \in \mathbb{R}^3 \right\}$ .

Montrer que  $\mathcal{F}$  est un sous-espace vectoriel de  $\mathcal{M}_3(\mathbb{R})$  et en donner une base.

c) Justifier que toute matrice  $M(a, b, c)$  de  $\mathcal{F}$  est diagonalisable.

d) Exprimer  $A_3^2$  en fonction de  $J$  et de  $I_3$ .

e) Soit  $M(a, b, c)$  appartenant à  $\mathcal{F}$ . Exprimer  $M(a, b, c)$  en fonction de  $I_3$ ,  $A_3$  et  $A_3^2$ .

f) En déduire les valeurs propres et les vecteurs propres de  $M(a, b, c)$ .

#### I.A.3) Application en physique

On considère, dans cette question, la matrice  $A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ .

On considère un système de 3 oscillateurs couplés, où les 4 ressorts sont identiques et de constante de raideur  $k$ . Les positions des masses  $m$  sont repérées par leurs abscisses  $x_1$ ,  $x_2$  et  $x_3$  à partir de leur position d'origine respective  $O_1$ ,  $O_2$  et  $O_3$ , positions pour lesquelles les ressorts ne sont pas tendus. On suppose qu'on lâche les masses aux abscisses  $x_{1m}$ ,  $x_{2m}$  et  $x_{3m}$  sans vitesse initiale.

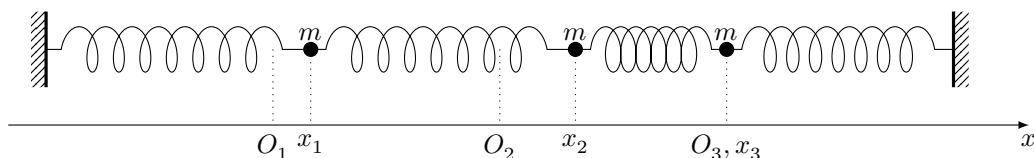


Figure 1

On montre, en appliquant le principe fondamental de la dynamique et en posant  $\omega_0^2 = k/m$  (avec  $\omega_0 \in \mathbb{R}^{+*}$ ), que les abscisses  $x_1, x_2$  et  $x_3$  vérifient le système différentiel

$$(S1) : \begin{cases} x_1''(t) &= -2\omega_0^2 x_1(t) + \omega_0^2 x_2(t) \\ x_2''(t) &= \omega_0^2 x_1(t) - 2\omega_0^2 x_2(t) + \omega_0^2 x_3(t) \\ x_3''(t) &= \omega_0^2 x_2(t) - 2\omega_0^2 x_3(t) \end{cases}$$

On pose  $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ .

- Déterminer une matrice  $M_3$  telle que (S1) s'écrive  $X''(t) = M_3 X(t)$ .
- Exprimer cette matrice  $M_3$  en fonction de  $A_3$  et de  $I_3$ .
- En déduire une matrice  $D'_3$  diagonale et une matrice  $P'_3$  inversible telles que  $M_3 = P'_3 D'_3 P_3^{-1}$ .
- Résoudre alors le système (S1), c'est-à-dire déterminer les expressions de  $x_1, x_2$  et  $x_3$  en fonction de  $t$  et des conditions initiales  $x_{1m}, x_{2m}$  et  $x_{3m}$ .

#### I.A.4) Application en chimie

On considère, dans cette question, la matrice  $A_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ .

Dans le modèle quantique de l'atome, on ne considère plus que les électrons d'un atome sont en orbite circulaire autour du noyau, mais occupent de manière probabiliste certaines régions de l'espace autour du noyau. Une orbitale atomique correspond à une région de l'espace dans laquelle on a 95% de chance de trouver un électron considéré. Pour une molécule, constituée de plusieurs atomes, on parle d'orbitale moléculaire. En 1930, Hückel publie une méthode permettant de déterminer des orbitales moléculaires qui conduit à diagonaliser des matrices tridiagonales. Par exemple, si on s'intéresse à la construction des orbitales moléculaires du trans-butadiène (figure 2), les orbitales moléculaires, notées  $\pi$ , sont des combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, notées respectivement  $p_1, p_2, p_3$  et  $p_4$  des atomes de carbone, elles s'écrivent sous la forme  $\pi = C_1 p_1 + C_2 p_2 + C_3 p_3 + C_4 p_4$ .

On est alors amené à déterminer les valeurs de  $\varepsilon$ , pour lesquelles il existe  $C_1, C_2, C_3$  et  $C_4$  réels non tous nuls, solutions du système

$$(S2) : \begin{cases} \alpha C_1 + \beta C_2 &= \varepsilon C_1 \\ \beta C_1 + \alpha C_2 + \beta C_3 &= \varepsilon C_2 \\ \beta C_2 + \alpha C_3 + \beta C_4 &= \varepsilon C_3 \\ \beta C_3 + \alpha C_4 &= \varepsilon C_4 \end{cases}$$

Les différentes valeurs de  $\varepsilon$  que l'on va trouver correspondent aux énergies des différentes orbitales moléculaires possibles.  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes données, indépendantes des atomes de carbone considérés. La constante  $\alpha$  correspond à une énergie propre à l'atome de carbone. La constante  $\beta$  correspond à une énergie d'interaction entre deux atomes de carbone voisins.

- À la recherche des valeurs propres et vecteurs propres de quelle matrice correspond la recherche des  $\varepsilon$ , pour lesquelles il existe  $C_1, C_2, C_3$  et  $C_4$  non tous nuls, solutions de (S2) ?

On note  $M_4$  cette matrice.

- Exprimer  $M_4$  en fonction de  $I_4$  et de  $A_4$ .

c) On admet que si on pose  $\varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$ ,  $D_4 = \begin{pmatrix} \varphi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varphi - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varphi \end{pmatrix}$  et  $P_4 = \begin{pmatrix} \varphi - 1 & \varphi & \varphi & \varphi - 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ \varphi - 1 & \varphi & -\varphi & 1 - \varphi \end{pmatrix}$ ,

alors  $P_4$  est inversible et on a  $D_4 = P_4^{-1} A_4 P_4$ .

Déterminer, en fonction de  $\varphi$ , une matrice  $D'_4$  diagonale et une matrice  $P'_4$  inversible telle que  $D'_4 = P_4^{-1} M_4 P_4$ . En déduire les différentes valeurs de  $\varepsilon$  possibles et, pour chaque valeur de  $\varepsilon$ , les valeurs de  $C_1, C_2, C_3$  et  $C_4$  correspondantes.

- On s'intéresse maintenant aux orbitales moléculaires de la molécule de cis-butadiène (cf figure 3). On souhaite appliquer à cette molécule la même méthode que précédemment, mais sans négliger l'énergie d'interaction entre le premier et le dernier atome de carbone. Quels coefficients de  $M_4$  doit-on modifier ? On ne demande pas de calcul.

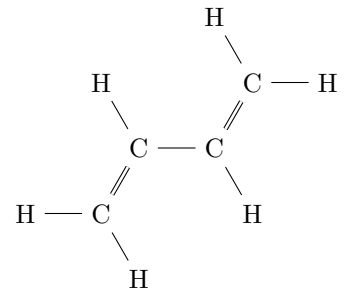


Figure 2 trans-butadiène

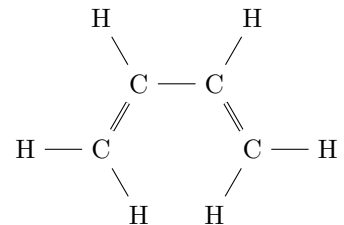


Figure 3 cis-butadiène

### I.B – Diagonalisation de $A_n$

Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 2$ , on appelle  $\chi_n$  le polynôme caractéristique de  $A_n$  :  $\chi_n(X) = \det(XI_n - A_n)$  et, pour

$$\text{tout } \alpha \in ]0, \pi[, \text{ on pose } u_n = \chi_n(2 \cos \alpha) = \begin{vmatrix} 2 \cos \alpha & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 \cos \alpha & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & 2 \cos \alpha & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \cos \alpha \end{vmatrix}.$$

**I.B.1)** Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 4$ , déterminer une relation de récurrence liant  $u_n$ ,  $u_{n-1}$  et  $u_{n-2}$ .

**I.B.2)** En déduire que pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 2$ ,  $u_n = \frac{\sin(n+1)\alpha}{\sin \alpha}$ .

**I.B.3)** En déduire que pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 2$ ,  $A_n$  possède  $n$  valeurs propres deux à deux distinctes, que l'on explicitera.

**I.B.4)** Pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n \geq 2$ , déterminer les sous-espaces propres associés aux valeurs propres de  $A_n$ .

$$\text{On pourra considérer les vecteurs } X_\alpha = \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \sin 2\alpha \\ \vdots \\ \sin n\alpha \end{pmatrix}.$$

### I.C – Localisation des valeurs propres de certaines matrices tridiagonales

Dans cette sous-partie, on considère un entier  $n \geq 2$ ,  $a$  et  $b$  deux nombres réels strictement positifs et  $B$

la matrice de  $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$  suivante :  $\begin{pmatrix} 0 & a & 0 & \cdots & 0 \\ b & 0 & a & \ddots & \vdots \\ 0 & b & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & a \\ 0 & \cdots & 0 & b & 0 \end{pmatrix}$ . On note  $\text{sp}(B)$  le spectre de la matrice  $B$  c'est-à-dire

l'ensemble des valeurs propres réelles de la matrice réelle  $B$  et, pour  $\lambda \in \mathbb{R}$ , on pose  $C_\lambda = B - \lambda I_n$ . Le but de cette sous-partie est de localiser les valeurs propres réelles de  $B$ , c'est-à-dire de trouver un intervalle  $I$  de  $\mathbb{R}$  tel que  $\text{sp}(B) \subset I$ .

**I.C.1)** Soit  $\lambda$  une éventuelle valeur propre réelle de  $B$ . Soit  $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ , non nul, vérifiant  $C_\lambda X = 0$ .

On pose  $|x_k| = \max(|x_1|, \dots, |x_n|)$ .

a) En examinant la  $k$ -ième ligne du système  $C_\lambda X = 0$ , montrer que  $|\lambda| \leq a + b$ .

b) En déduire un premier intervalle  $I$  tel que  $\text{sp}(B) \subset I$ .

**I.C.2)** Dans la suite de cette sous-partie, on considère  $\lambda$  quelconque dans  $\mathbb{R}$ .

On dira qu'une suite  $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$  vérifie la propriété (R) lorsque l'on a :

$$\forall k \in \mathbb{N} : bu_k - \lambda u_{k+1} + au_{k+2} = 0$$

Soit  $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ . On pose  $x_0 = x_{n+1} = 0$ .

Montrer que  $X$  vérifie  $C_\lambda X = 0$  si et seulement si les nombres  $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}$  sont les  $n+2$  premiers termes d'une suite vérifiant (R).

**I.C.3)** On suppose dans cette question que  $\lambda^2 > 4ab$ .

a) Déterminer l'ensemble des suites vérifiant (R).

b) Montrer que si un vecteur  $X \in \mathbb{R}^n$  vérifie  $C_\lambda X = 0$  alors c'est le vecteur nul.

**I.C.4)** On suppose dans cette question que  $\lambda^2 = 4ab$ .

a) Déterminer l'ensemble des suites vérifiant (R).

b) Montrer que si un vecteur  $X \in \mathbb{R}^n$  vérifie  $C_\lambda X = 0$  alors c'est le vecteur nul.

**I.C.5)** En déduire que  $\text{sp}(B) \subset ]-2\sqrt{ab}, 2\sqrt{ab}[$ .

**I.C.6)** Le résultat de la question **I.C.5** est-il meilleur que celui du **I.C.1** ?

## II Séries de pile ou face

Soit  $n \in \mathbb{N}^*$ . On effectue  $n$  lancers indépendants d'une pièce donnant pile avec la probabilité  $p \in ]0, 1[$  et face avec la probabilité  $q = 1 - p$ . On va s'intéresser dans ce problème aux successions de lancers amenant un même côté. Pour décrire la succession de  $n$  lancers, on introduit la notion de séries de lancers amenant un même côté et on parle de longueur d'une série. Ainsi, la première série est de longueur  $m \in \llbracket 1, n - 1 \rrbracket$  si les  $m$  premiers

lancers ont amené le même côté de la pièce et le  $(m + 1)$ -ième l'autre côté, et de longueur  $n$  si les  $n$  lancers ont amené le même côté de la pièce. Si la longueur de la première série est égale à  $m < n$ , la deuxième série commence au  $(m + 1)$ -ième lancer et se termine au lancer précédant un changement de côté s'il y a au moins un deuxième changement de côté au cours des  $n$  lancers, sinon on dit qu'elle est de longueur  $n - m$ . On peut définir de même les séries suivantes.

$\Omega_n$  désigne l'ensemble des successions de pile ou face au bout de  $n$  lancers. Pour  $i \in \mathbb{N}^*$ , on note  $P_i$  l'événement « le  $i$ -ième lancer amène pile » et  $F_i$  l'événement contraire.

Les deux sous-parties **II.A** et **II.B** sont indépendantes.

### II.A – Étude des longueurs de séries

On considère dans cette sous-partie que  $m \in \mathbb{N}^*$  et  $k \in \mathbb{N}^*$ .

**II.A.1)** On note  $L_1$  la longueur de la première série.

a) Déterminer  $L_1(\Omega_n)$  (ensemble des valeurs prises par  $L_1$ ).

b) On suppose que  $m < n$ . Exprimer l'événement  $(L_1 = m)$  à l'aide des événements  $P_i$  et  $F_i$  pour  $i$  entier naturel variant entre 1 et  $m + 1$ . En déduire la probabilité de l'événement  $(L_1 = m)$ .

c) On suppose maintenant que  $m = n$ . Exprimer l'événement  $(L_1 = n)$  à l'aide des événements  $P_i$  et  $F_i$  pour  $i$  entier naturel variant entre 1 et  $n$ . En déduire la probabilité de l'événement  $(L_1 = n)$ .

d) Vérifier que  $\sum_{m=1}^n P(L_1 = m) = 1$ .

**II.A.2)** On note  $L_2$  la longueur de la deuxième série, s'il y en a une, et on pose  $L_2 = 0$  s'il n'y a pas de deuxième série.

a) Déterminer  $L_2(\Omega_n)$ .

b) On suppose que  $m + k < n$ . Exprimer l'événement  $(L_1 = m) \cap (L_2 = k)$  à l'aide des événements  $P_i$  et  $F_i$  pour  $i$  entier naturel variant entre 1 et  $m + k + 1$ . En déduire la probabilité de l'événement  $(L_1 = m) \cap (L_2 = k)$ .

c) On suppose que  $m + k = n$ . Exprimer l'événement  $(L_1 = m) \cap (L_2 = k)$  à l'aide des événements  $P_i$  et  $F_i$  pour  $i$  entier naturel variant entre 1 et  $n$ . En déduire la probabilité de l'événement  $(L_1 = m) \cap (L_2 = k)$ .

d) En déduire la valeur de  $P(L_2 = k)$  pour  $k \in \llbracket 1, n - 1 \rrbracket$ .

e) Calculer  $P(L_2 = 0)$ .

### II.B – Étude du nombre de séries lors de $n$ lancers

On considère dans toute cette sous-partie que la pièce est équilibrée, c'est-à-dire que  $p = 1/2$ . On suppose que l'on effectue  $n$  ( $n \geq 3$ ) lancers indépendants et on note  $N_k$  le nombre de séries lors des  $k$  premiers lancers ( $k \leq n$ ). Par exemple, si on prend  $n = 11$  et si les lancers successifs donnent : FFPPPPFFPPP (F désignant face et P pile), on a pour une telle succession  $\omega \in \Omega_{11}$  :  $N_1(\omega) = N_2(\omega) = 1$ ,  $N_3(\omega) = \dots = N_6(\omega) = 2$ ,  $N_7(\omega) = N_8(\omega) = 3$  et  $N_9(\omega) = \dots = N_{11}(\omega) = 4$ . On admettra que pour tout  $k \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,  $N_k$  est une variable aléatoire sur  $\Omega_n$ .

**II.B.1)** Déterminer les lois de  $N_1$ ,  $N_2$  et  $N_3$  et donner leurs espérances.

**II.B.2)** Déterminer  $N_n(\Omega_n)$ , puis calculer les valeurs de  $P(N_n = 1)$  et  $P(N_n = n)$ .

**II.B.3) Fonctions génératrices de  $N_n$**

On pose, pour  $n \in \mathbb{N}^*$  et pour  $s \in [0, 1]$ ,  $G_n(s) = \sum_{k=1}^n P(N_n = k) s^k$ .

a) Pour  $s \in [0, 1]$ , comparer l'espérance de la variable aléatoire  $s^{N_n}$  avec  $G_n(s)$ .

b) Que représente  $G'_n(1)$  ?

c) Montrer que pour tout  $n \geq 2$  et tout  $k \in \llbracket 1, n \rrbracket$  on a :

$$P((N_n = k) \cap P_n) = \frac{1}{2} P((N_{n-1} = k) \cap P_{n-1}) + \frac{1}{2} P((N_{n-1} = k - 1) \cap F_{n-1})$$

On admet que l'on obtiendrait de même

$$P((N_n = k) \cap F_n) = \frac{1}{2} P((N_{n-1} = k) \cap F_{n-1}) + \frac{1}{2} P((N_{n-1} = k - 1) \cap P_{n-1})$$

Montrer alors que  $P(N_n = k) = \frac{1}{2} P(N_{n-1} = k) + \frac{1}{2} P(N_{n-1} = k - 1)$ .

d) Soit  $n \geq 2$ . Montrer que  $G_n(s) = \frac{1+s}{2} G_{n-1}(s)$ .

Calculer  $G_1(s)$  et en déduire que  $G_n(s) = \left(\frac{1+s}{2}\right)^{n-1} s$ .

e) Déterminer le nombre moyen de séries dans les  $n$  lancers.

• • • FIN • • •