Méthodologie scientifique (L1) : fonctions usuelles, dérivées première et seconde, point d'inflexion

1 Cinétique chimique

On s'intéresse aux fonctions $f : t \mapsto f(t)$ avec $t \geq 0$ dont la dérivée première est proportionnelle à une puissance entière n de f soit

$$f'(t) = -kf^n(t), \tag{1}$$

avec $k > 0$ et $f^n(t) = \Big(f(t)\Big)^n$. En chimie, f et t pourraient être respectivement la concentration d'un réactif et le temps dans une réaction d'ordre n, et k correspondrait à la constante de vitesse de la réaction.

a) Vérifier que, si $n = 1$, $f(t) = f(0)e^{-kt}$ est bien solution de l'équation (1).

b) On suppose que $n > 1$. Vérifier que, dans ce cas, $f(t) = \Big[(n-1)kt + f^{1-n}(0)\Big]^{1/1-n}$.

c) Sachant qu'une droite est simple à analyser (puisqu'elle représente une fonction affine), expliquer comment il est possible de vérifier graphiquement qu'une réaction chimique a bien une cinétique d'ordre n. Comment déterminerait-on alors la constante de vitesse k ? **Aide :** on exprimera, en fonction de t, $\ln(f(t))$ pour $n = 1$ et $f^{1-n}(t)$ pour $n > 1$.

d) La loi d'Arrhénius dit que la constante de vitesse est une fonction de la température T,

$$k : T \mapsto k(T) = Ae^{-E_a/RT}, \tag{2}$$

où A est une constante, E_a est l'énergie d'activation et $R = 8.314\,\mathrm{J\,K^{-1}\,mol^{-1}}$ est la constante des gaz parfaits. Comment pourrait-on déterminer expérimentalement les valeurs de E_a et A pour une réaction donnée ? **Aide :** exprimer $\ln(k(T))$ en fonction de T.

2 Puits d'énergie d'interaction double

Soit la fonction $V : x \mapsto V(x) = \lambda x^4 - 2kx^2$ où $\lambda > 0$ et $k > 0$. Ce type de fonction est utilisé en chimie théorique pour modéliser, par exemple, la molécule d'ammoniac. Dans ce cas, x décrit la position de l'atome d'azote par rapport au plan des atomes d'hydrogène ($x > 0$ s'il est au dessus du plan et $x < 0$ s'il est en dessous). Le nombre $V(x)$ correspond alors à l'énergie d'interaction entre l'azote et les hydrogènes. L'objectif de l'exercice est de comprendre pourquoi la fonction V est dite "à double puits".

a) Déterminer le tableau de variations de la fonction V puis en donner une représentation graphique qualitative.

b) Dans le cas de l'ammoniac, les minima x_0 et $-x_0$ ($x_0 > 0$) de V correspondent aux positions d'équilibre de l'atome d'azote. Exprimer x_0 en fonction de λ et k. Justifier le nom "puits double" attribué à la fonction V.

c) Soit $W = V(0) - V(x_0)$ la hauteur du puits. Exprimer W en fonction de λ et k.

d) Réécrire $V(x)$ à l'aide des quantités physiques x_0 et W.

3 Méthode des tangentes

On s'intéresse à l'ensemble des fonctions $f : x \mapsto f(x)$ ayant un point remarquable x_0 tel que, pour n'importe quelle valeur de x, l'égalité suivante est vérifée :

$$f(x_0 + x) + f(x_0 - x) = 2f(x_0). \tag{3}$$

L'objectif de l'exercice est de montrer que la courbe représentative de toute fonction f vérifiant l'équation (3) admet un point d'inflexion en x_0. On montrera ensuite que, si l'on dipose de la représentation graphique de f (sans que l'on connaisse l'expression analytique de $f(x)$ en fonction de x), alors il est possible de déterminer par la méthode dite "des tangentes" les valeurs exactes de x_0 et $f(x_0)$. Cette méthode est utilisée en chimie pour le titrage pH-métrique d'un acide ou d'une base. Dans ce cas, la fonction f correspond au pH, x étant le volume de soude ou d'acide ajouté à la solution dosée, et x_0 est le volume à l'équivalence.

a) Montrer que toute fonction affine (c'est-à-dire telle que $f(x) = ax + b$) satisfait l'équation (3) et ce, quel que soit la valeur de x_0. **On s'intéresse dans la suite aux fonctions f qui ne sont pas affines.**

b) Montrer que $f : x \mapsto f(x) = 5 + \dfrac{x - 10}{1 + (x - 10)^2}$, dont la représentation est donnée dans la Figure 1, est un exemple de fonction non affine satisfaisant l'équation (3) avec $x_0 = 10$.

c) Soit $\mathcal{C}$ la courbe représentant une fonction f quelconque vérifiant l'équation (3). Montrer graphiquement que le point $M_0\Big(x_0, f(x_0)\Big)$ est un point d'inversion pour $\mathcal{C}$, autrement dit les points $M_-\Big(x_0 - x, f(x_0 - x)\Big)$ et $M_+\Big(x_0 + x, f(x_0 + x)\Big)$ de $\mathcal{C}$ sont symétriques par rapport à M_0 et ce, quelle que soit la valeur de x (voir la Figure 2).

d) Expliquer pourquoi, en dérivant l'équation (3) par rapport à x, les relations suivantes sont vérifiées pour n'importe quelle valeur de x :

$$f'(x_0 + x) = f'(x_0 - x), \tag{4}$$

$$f''(x_0 + x) = -f''(x_0 - x). \tag{5}$$

En déduire que la fonction f admet un point d'inflexion en x_0.

e) Soit a un nombre réel positif. Expliquer pourquoi les équations des droites tangentes T_- et T_+ à $\mathcal{C}$ en $x = x_0 - a$ et $x = x_0 + a$ sont, respectivement,

$$y_-(x) = f'(x_0 - a)\Big(x - x_0 + a\Big) + f(x_0 - a), \tag{6}$$

$$y_+(x) = f'(x_0 + a)\Big(x - x_0 - a\Big) + f(x_0 + a). \tag{7}$$

Montrer, en utilisant l'équation (4), que T_- et T_+ sont parallèles.

f) On note D_m la droite parallèle aux deux tangentes et passant par le milieu du segment qui leur est perpendiculaire. Montrer, en utilisant la représentation graphique de la Figure 2 ainsi que la question e), que D_m a pour équation

$$y_m(x) = f'(x_0 - a)\Big(x - x_0\Big) + \frac{1}{2}\Bigg(f(x_0 - a) + f(x_0 + a)\Bigg). \tag{8}$$

Aide : donner l'expression des ordonnées à l'origine de T_- et T_+ (c'est-à-dire $y_-(0)$ et $y_+(0)$) puis expliquer pourquoi l'ordonnée à l'origine de D_m vaut $y_m(0) = \frac{1}{2}\Big(y_+(0) + y_-(0)\Big)$.

g) Déduire de la question f) et de la condition (3) que le point d'intersection entre D_m et $\mathcal{C}$ correspond bien au point d'inflexion $x = x_0$, et ce, quel que soit le choix de a.

h) Appliquer la méthode des tangentes à la fonction f de la Figure 1 et vérifier que l'on retrouve bien graphiquement la valeur $x_0 = 10$.

Figure 1 – Exemple de fonction non affine satisfaisant l'équation (3) avec $x_0 = 10$.

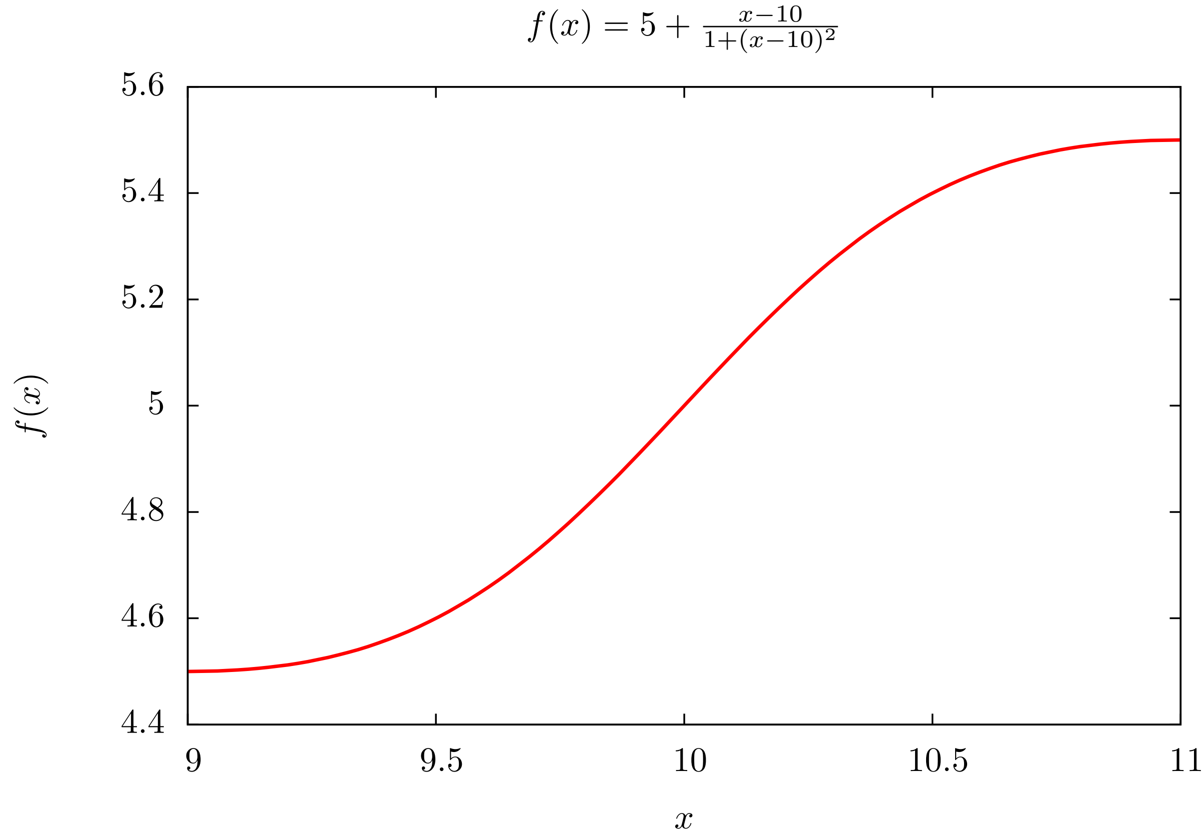
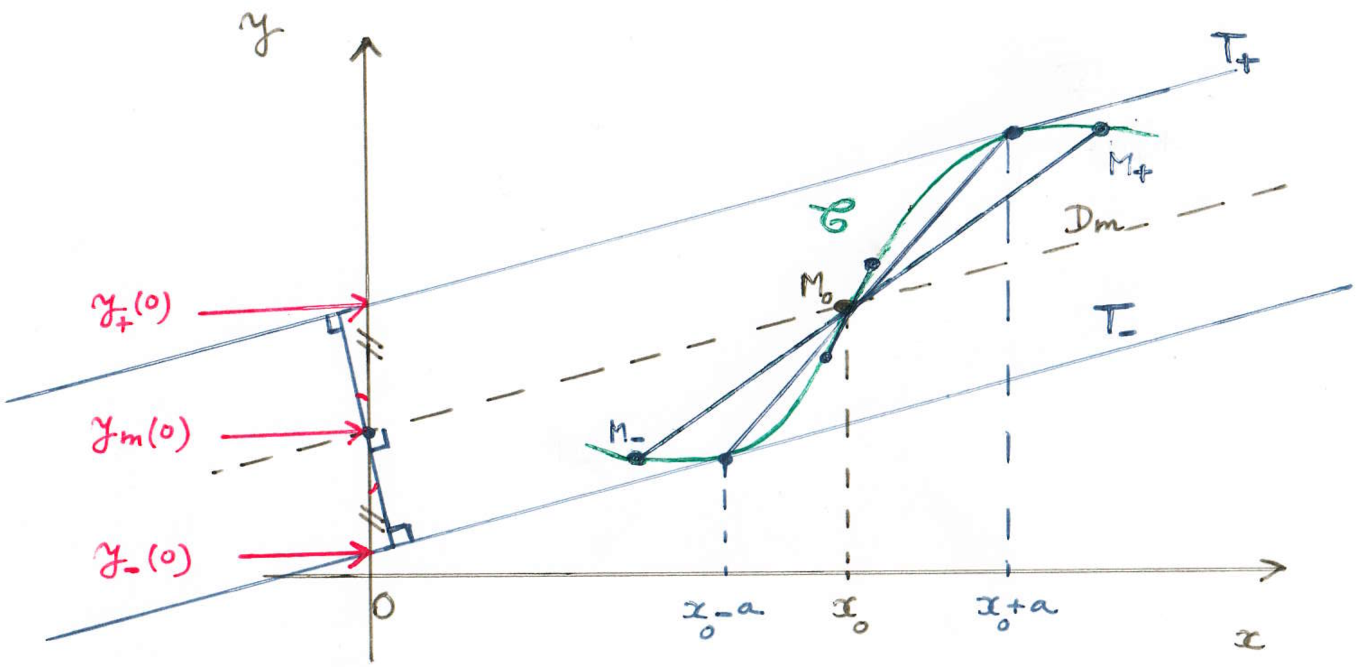


Figure 2 – Représentation graphique de la méthode des tangentes.



Fiche de cours : fonctions usuelles, dérivées première et seconde, point d'inflexion

Les notions suivantes permettent de résoudre le premier exercice.

1) Une fonction quelconque f dite réelle associe à un nombre réel x un autre nombre réel que l'on notera $f(x)$. Ceci s'écrit mathématiquement comme suit,

$$f : x \mapsto f(x).$$

Exemples de fonctions réelles :

$$f : x \mapsto f(x) = x^2, \;\; g : x \mapsto g(x) = \sqrt{x}, \;\; h : x \mapsto h(x) = (x^4 + 3x)^2.$$

2) Une fonction $f : x \mapsto f(x) = ax + b$ où a et b sont des constantes (c'est-à-dire des nombres réels indépendant de x) est dite **affine**.

3) Soit la fonction exponentielle $\quad x \mapsto \exp(x) = 1 + x + \dfrac{x^2}{2!} + \dfrac{x^3}{3!} + \ldots = 1 + \displaystyle\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{x^n}{n!}$

où $n! = 1 \times 2 \times \ldots \times (n-1) \times n$.

On note généralement $\exp(x) = e^x \quad$ avec $\quad e = \exp(1) = 2 + \dfrac{1}{2!} + \dfrac{1}{3!} + \ldots \approx 2,718.$

4) Il est important de souligner que $e^x > 0$ quelle que soit la valeur de x.

5) Soit une fonction f et un nombre réel x. Pour étudier la variation de f autour de x, on peut considérer un autre nombre réel h et calculer $\big(f(x+h) - f(x)\big)/h$. En prenant h de plus en plus petit jusqu'à le faire tendre vers 0, on obtient un nombre que l'on appelle **dérivée** de la fonction f en x et que l'on note $f'(x)$.

6) La dérivée d'une fonction constante $f : x \mapsto f(x) = c$ est **nulle** puisque $f(x+h) = c = f(x)$.

7) Si f est affine, $f(x) = ax + b$ et donc $f(x+h) = ax + ah + b = f(x) + ah$ de sorte que $f'(x) = a$. La dérivée d'une fonction affine est donc **constante**.

8) On peut montrer que si $f(x) = x^q$ alors $f'(x) = q \times x^{q-1}$ où q est un nombre réel quelconque.

9) Une propriété remarquable de la fonction exponentielle est que sa dérivée est égale à elle-même soit $\exp'(x) = \exp(x)$.

10) **Formules utiles** : soient deux fonctions f et g.

$$\begin{array}{llll} \text{Si} & h(x) = f(x) + g(x) & \text{alors} & h'(x) = f'(x) + g'(x) & \leftarrow \textbf{somme} \\ \text{Si} & h(x) = f(x) \times g(x) & \text{alors} & h'(x) = f'(x) \times g(x) + f(x) \times g'(x) & \leftarrow \textbf{produit} \\ \text{Si} & h(x) = f\Big(g(x)\Big) & \text{alors} & h'(x) = g'(x) \times f'\Big(g(x)\Big) & \leftarrow \textbf{composition} \end{array}$$

11) D'après 8) et 10), si $h(x) = \Big(f(x)\Big)^q = f^q(x)$ alors $h'(x) = q \times f'(x) \times f^{q-1}(x)$, où q est un nombre réel quelconque.

Preuve : il suffit de poser $g(x) = x^q$, d'écrire $h(x) = g\Big(f(x)\Big)$ puis d'utiliser la règle de composition (voir point 10)) .

12) Un point M est repéré dans l'espace réel à deux dimensions à l'aide de son abscisse x et de son ordonnée y. On le note souvent $M(x, y)$.

13) La représentation graphique d'une fonction réelle f est l'ensemble des points $M(x, f(x))$ obtenus en faisant varier x. Il en résulte une courbe. Par exemple, la représentation graphique de $f : x \mapsto f(x) = x^2$ est une parabole.

14) La représentation graphique d'une fonction affine $f : x \mapsto f(x) = ax + b$ est une droite. On dira que a est le **coefficient directeur** (ou pente) de cette droite et que b est l'**ordonnée à l'origine**. Ce que l'on appelle "équation de la droite" s'écrit $y = ax + b$. Cela signifie que tout point de la droite d'abscisse x a pour ordonnée $ax + b$. Il faut noter que, si l'on connait les coordonnées de deux points $A(x_A, y_A)$ et $B(x_B, y_B)$ de la droite, alors on peut déterminer a et b. En effet, puisque $y_A = ax_A + b$ et $y_B = ax_B + b$, il vient $a = \dfrac{y_B - y_A}{x_B - x_A}$ et $b = \dfrac{y_A x_B - x_A y_B}{x_B - x_A}$.

15) La fonction logarithme népérien $x \mapsto \ln(x)$ peut se définir comme la fonction réciproque de la fonction exponentielle. Concrètement, la fonction ln est telle que

$$\ln\Big(\exp(x)\Big) = x,$$

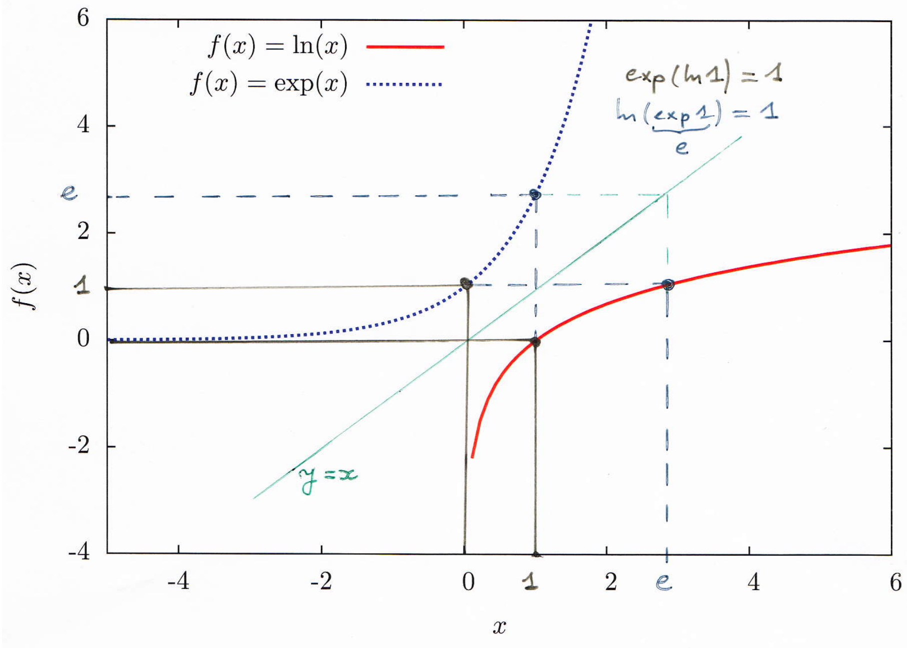
ou bien, de manière équivalente,

$$\exp\Big(\ln(x)\Big) = x.$$

Ces deux relations sont illustrées dans la Figure 3.

D'après 4), $\ln(x)$ n'est défini que si $x > 0$.

Figure 3 – Construction de la fonction ln à partir de l'exponentielle.



Les notions suivantes permettent de résoudre le second exercice.

16) On constate graphiquement que la droite de pente $f'(x)$ qui passe par le point $M(x, f(x))$ est **tangente** à la courbe qui représente f. On comprend ainsi pourquoi, lorsque f est croissante, $f'(x) > 0$. De même, lorsque f est décroissante, $f'(x) < 0$. Si f admet en x un minimum ou un maximum alors $f'(x) = 0$. Ceci est illustré dans la Figure 4. Pour déterminer le tableau de variations d'une fonction f, il faut donc calculer $f'(x)$ et étudier son signe.

Les notions suivantes permettent de résoudre le troisième exercice.

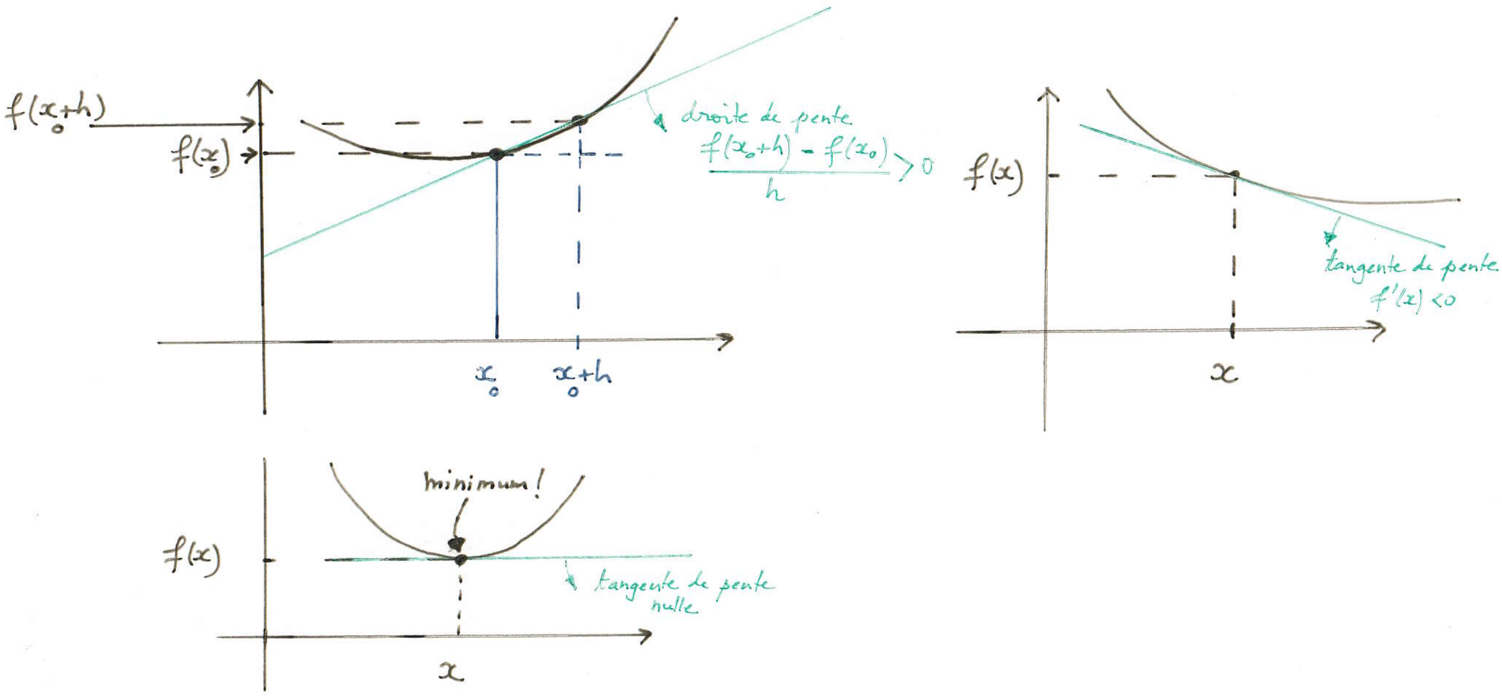
17) Soit f une fonction réelle. Si $\quad h(x) = f(-x) \quad$ alors $\quad h'(x) = -f'(-x)$.

Preuve : il suffit de poser $g(x) = -x$, d'écrire $h(x) = f\Big(g(x)\Big)$ puis d'utiliser la règle de composition (voir point 10)) et le fait que $g'(x) = -1$ (d'après 7)).

18) On appelle dérivée seconde de f, que l'on note f”, la dérivée de la dérivée de f. Cela signifie que, si on pose $g(x) = f'(x)$, alors $f”(x) = g'(x)$.

19) D'après 16), la dérivée seconde de f en x indique comment varie la pente de la tangente à la courbe qui représente f. Autrement dit, le signe de $f”(x)$ indique la courbure de cette dernière. Si $f”(x) > 0$, la courbe sera dite convexe et, si $f”(x) < 0$, on la dira concave. Si $f”(x)$ s'annule en x en changeant

Figure 4 – Interprétation graphique de la dérivée première.



de signe, cela signifie que la courbe change de courbure en $M(x, f(x))$. On dit qu'il s'agit d'un point d'inflexion. Ceci est illustré dans la Figure 5.

20) Soient deux fonctions affines distinctes $f : x \mapsto f(x) = ax + b$ et $g : x \mapsto g(x) = cx + d$. Les droites qui les représentent sont parallèles si et seulement si elles ont la même pente, c'est-à-dire si et seulement si $a = c$.

Preuve : si $a \neq c$, le point d'abscisse $x_0 = (d-b)/(a-c)$ et d'ordonnée $f(x_0)$ appartient aux deux droites puisque $g(x_0) = \dfrac{c(d-b)}{(a-c)} + d = \dfrac{ad-bc}{a-c} = \dfrac{a(d-b)}{a-c} + b = f(x_0)$. L'existence d'un point d'intersection est en contradiction avec le fait qu'elles sont parallèles. Réciproquement, si $a = c$, l'existence d'un point d'intersection d'abscisse x_0 impliquerait que $ax_0 + b = ax_0 + d$ soit $b = d$ ce qui conduit à $f(x) = g(x)$ or les deux fonctions sont distinctes.

Compléments

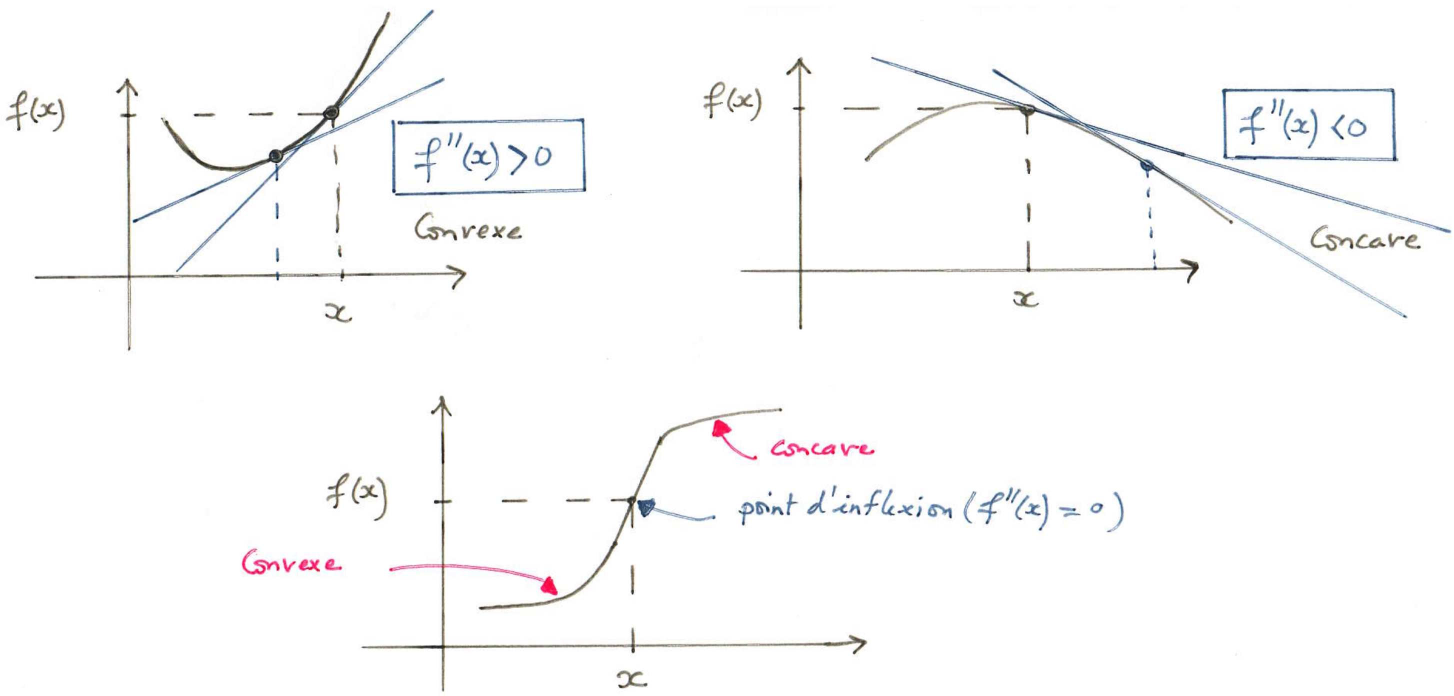
21) Formule utile : $\exp(x + y) = e^{x+y} = e^x \times e^y$.

22) Propriétés remarquables du logarithme népérien :

Si $x > 0$ et $y > 0$ alors $\ln(xy) = \ln(x) + \ln(y)$.

Pour n'importe quel nombre réel q, $\ln(x^q) = q \times \ln(x)$.

FIGURE 5 – Interprétation graphique de la dérivée seconde.



La dérivée de ln est la fonction inverse, c'est-à-dire $\ln'(x) = \frac{1}{x}$.

23) La fonction que l'on appelle simplement logarithme (log) est plus précisément une fonction logarithme de base 10 soit $\log(x) = \frac{\ln(x)}{\ln(10)}$.