HAC310X Mathématiques pour la chimie S3

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

22 novembre 2023

Chapitre 1

Equations différentielles

Une *équation différentielle* est une équation dont l'inconnue est une fonction, et qui donne une relation entre

- la valeur de cette fonction en un point
- la valeur de ses dérivées, dérivées secondes, etc... au même point
- la valeur de la variable en ce point

Dans les exemples suivants, on note y la fonction inconnue et t sa variable (réelle). Les équations différentielles qu'on va écrire sont donc des relations entre t, $y(t)$, $y'(t)$, $y''(t)$... Par exemple,

1. $y'(t) = y(t)^2 + e^t$
2. $y''(t) + y(t) = 0$
3. $y'(t) = t^2 - 1$
4. $y'(t) = 2y(t)$

On dit qu'une équation différentielle est du *premier ordre* si elle ne fait pas intervenir les dérivées d'ordre 2 ou plus de la fonction inconnue. Avec les notations introduites précédemment, celà signifie qu'on peut l'écrire comme une égalité liant t, $y(t)$ et $y'(t)$. Dans les exemples précédents, (1), (3), (4) sont du premier ordre, mains pas (2).

Pourquoi vouloir résoudre des équations différentielles ?
Il existe de nombreux contextes différents où il est intéressant de savoir résoudre une équation différentielle, par exemple en **chimie.** ! !

Considérons une réaction chimique où, dans une solution aqueuse, un réactif R se transforme pour donner un produit P : R $\longrightarrow$ P. On veut connaître la concentration de R au temps t (notée $[\mathrm{R}](t)$), connaissant la concentration initiale $[\mathrm{R}](0) = \mathrm{R}_0$. La chimie de la réaction permet de déterminer que la vitesse de cette réaction (ou vitesse de disparition de R) est donnée par

$$-\frac{d}{dt}[\mathrm{R}](t) = f\left([\mathrm{R}](t)\right),$$

où f est une fonction connue (donnée par la chimie). $[\mathrm{R}](t)$ est donc solution de l'équation différentielle

$$-y'(t) = f(y(t)),$$

avec condition initiale

$$y(0) = \mathrm{R}_0.$$

1.1 Equation différentielle linéaire du premier ordre

Une équation différentielle *linéaire du premier ordre* est une équation du type :

$$y' = a(x)y + b(x) \tag{1.1}$$

où a et b sont des fonctions définies sur un intervalle ouvert I de $\mathbb{R}$. Dans la suite on supposera que a et b sont des fonctions continues sur I.
Etant donnée une équation différentielle du premier ordre, on cherchera soit à en trouver toutes les solutions, soit à trouver, parmi ces solutions, celle qui vérifie une **condition initiale** spécifiant la valeur prise par la fonction en un point (par exemple, $y(0) = 1$).
On va commencer par résoudre le cas où a est une constante et $b = 0$. Puis a sera une fonction (et toujours $b = 0$).On terminera par le cas général où a et b sont deux fonctions.

1.1.1 $y' = ay$

Théorème 1.1.1 *Soit a un réel. Soit l'équation différentielle*

$$y' = ay \tag{1.2}$$

Les solutions de (1.2)*, sur $\mathbb{R}$, sont les fonctions y définies par :*

$$y(x) = ke^{ax}$$

où $k \in \mathbb{R}$ est une constante quelconque.

Ce résultat est fondamental. Il est tout aussi fondamental de comprendre d'où vient cette formule. On réécrit l'équation différentielle sous la forme

$$\frac{y'}{y} = a$$

que l'on intègre à gauche et à droite pour trouver :

$$\ln|y(x)| = ax + b$$

On compose par l'exponentielle des deux côtés pour obtenir :

$$|y(x)| = e^{ax+b}$$

Autrement dit $y(x) = \pm e^b e^{ax}$. En posant $k = \pm e^b$ on obtient les solutions (non nulles) cherchées.

Exemple 1 *Résoudre l'équation différentielle $3y' - 5y = 0$. On écrit cette équation sous la forme $y' = \frac{5}{3}y$. Ses solutions, sur $\mathbb{R}$, sont donc de la forme $y(x) = ke^{\frac{5}{3}x}$, où $k \in \mathbb{R}$.*

1.1.2 $y' = a(x)y$

Le théorème suivant affirme que, lorsque a est une fonction, résoudre l'équation différentielle

$$y' = a(x)y$$

revient à déterminer une primitive A de a (ce qui n'est pas toujours possible explicitement).

Théorème 1.1.2 *Soit $a : I \to \mathbb{R}$ une fonction continue. Soit $A : I \to$ une primitive de a. Soit l'équation différentielle :*

$$y' = a(x)y \tag{1.3}$$

Les solutions sur I de (1.3) sont les fonctions y définies par :

$$y(x) = ke^{A(x)}$$

où $k \in \mathbb{R}$ est une constante quelconque.

Démonstration.

$$\begin{aligned} y(x) \text{ solution de } (1.3) &\iff y'(x) - a(x)y(x) = 0 \\ &\iff e^{-A(x)}(y'(x) - ay(x)) = e^{-A(x)}0 = 0 \\ &\iff (y(x)e^{-A(x)})' = 0 \\ &\iff \text{ il existe } k \in \mathbb{R} \text{ tel que } y(x)e^{-A(x)} = k \\ &\iff \text{ il existe } k \in \mathbb{R} \text{ tel que } y(x) = ke^{A(x)}. \end{aligned}$$

□

Si $a(x) = a$ est une fonction constante, alors une primitive est par exemple $A(x) = ax$ et on retrouve les solutions du théorème 1.1.1

Exemple 2 *On souhaite résoudre l'équation différentielle $x^2y' = y$. On se place sur l'intervalle $I_+ =]0, +\infty[$ ou $I_- =]-\infty, 0[$. L'équation devient $y' = \frac{1}{x^2}y$. Donc $a(x) = \frac{1}{x^2}$, dont une primitive est $A(x) = -\frac{1}{x}$. Ainsi les solutions cherchées sont $y(x) = ke^{-\frac{1}{x}}$ où $k \in \mathbb{R}$.*

1.1.3 $y' = a(x)y + b(x)$

Il nous reste le cas général de l'équation différentielle linéaire d'ordre 1 avec second membre :

$$y' = a(x)y + b(x) \tag{1.4}$$

où $a : I \to \mathbb{R}$ et $b : I \to \mathbb{R}$ sont des fonctions continues. L'équation homogène associée est :

$$y' = a(x)y \tag{1.5}$$

Il n'y a pas de nouvelle formule à apprendre pour ce cas. Il suffit d'appliquer le principe de superposition : les solutions de (1.4) s'obtiennent en ajoutant à une solution particulière de (1.4) les solutions de (1.5). Ce qui donne

Proposition 1.1.3 *Si y_0 est une solution de* (1.4) *alors les solutions de* (1.4) *sont les fonctions $y : I \to \mathbb{R}$ définies par*

$$y(x) = y_0(x) + ke^{A(x)}$$

avec $k \in \mathbb{R}$ où $x \mapsto A(x)$ est une primitive de $x \mapsto a(x)$.

La recherche de la solution générale de (1.4) se réduit donc à la recherche d'une solution particulière. Parfois ceci se fait en remarquant une solution évidente. Par exemple, l'équation différentielle $y' = 2xy + 4x$ a pour solution particulière $y_0(x) = -2$; donc l'ensemble des solutions de cette équation sont les $y(x) = -2 + ke^{x^2}$, où $k \in \mathbb{R}$.

Recherche d'une solution particulière : méthode de variation de la constante
Le nom de cette méthode est paradoxal mais justifié ! C'est une méthode générale pour trouver une solution particulière en se ramenant à un calcul de primitive. La solution générale de

$$y' = a(x)y$$

est donnée par $y(x) = ke^{A(x)}$, avec $k \in \mathbb{R}$ une constante. La méthode de la variation de la constante consiste à chercher une solution particulière sous la forme

$$y_0(x) = k(x)e^{A(x)}$$

où k est maintenant une fonction à déterminer pour que y_0 soit une solution de $y' = a(x)y + b(x)$. Puisque $A' = a$, on a :

$$y_0'(x) = (k(x)e^{A(x)})' = a(x)k(x)e^{A(x)} + k'(x)e^{A(x)} = a(x)y_0(x) + k'(x)e^{A(x)}.$$

Ainsi

$$y_0'(x) - a(x)y_0(x) = k'(x)e^{A(x)}.$$

Donc y_0 est une solution de $y' = a(x)y + b(x)$ si et seulement si

$$k'(x)e^{A(x)} = b(x) \iff k'(x) = b(x)e^{-A(x)} \iff k(x) = \int b(x)e^{-A(x)}dx.$$

Ce qui donne une solution particulière $y_0(x) = (\int b(x)e^{-A(x)}dx)e^{A(x)}$ de $y' = a(x)y+b(x)$ sur I. La solution générale est donnée par

$$y(x) = y_0(x) + ke^{A(x)}, k \in \mathbb{R}.$$

Exemple 3 *Soit l'équation $y' + y = e^x + 1$. L'équation homogène est $y' = -y$ dont les solutions sont les $y(x) = ke^{-x}, k \in \mathbb{R}$. Cherchons une solution particulière avec la méthode de variation de la constante : on note $y_0(x) = k(x)e^{-x}$. On doit trouver $k(x)$ afin que y_0 vérifie l'équation différentielle $y' + y = e^x + 1$.*

$$\begin{aligned} y_0' + y_0 = e^x + 1 &\iff (k'(x)e^{-x} - k(x)e^{-x}) + k(x)e^{-x} = e^x + 1 \\ &\iff k'(x)e^{-x} = e^x + 1 \\ &\iff k'(x) = e^{2x} + e^x \\ &\iff k(x) = \tfrac{1}{2}e^{2x} + e^x + c \end{aligned}$$

On fixe $c = 0$ (n'importe quelle valeur convient) :

$$y_0(x) = k(x)e^{-x} = \left(\frac{1}{2}e^{2x} + e^x\right)e^{-x} = \frac{1}{2}e^x + 1.$$

Nous tenons notre solution particulière ! Les solutions générales de l'équation $y' + y = e^x + 1$ s'obtiennent en additionnant cette solution particulière aux solutions de l'équation homogène :

$$y(x) = \frac{1}{2}e^x + 1 + ke^{-x}, k \in \mathbb{R}.$$

1.2 Equation différentielle linéaire du second ordre à coefficients constants

Une équation différentielle linéaire du second ordre, à coefficients constants, est une équation de la forme

$$ay'' + by' + cy = g(x)$$

où $a, b, c \in \mathbb{R}, , a \neq 0$ et g est une fonction continue sur un intervalle ouvert I.
L'équation

$$ay'' + by' + cy = 0$$

est appelée *l'équation homogène* associée à $ay'' + by' + cy = g(x)$. La structure des solutions de l'équation est très simple.

Théorème 1.2.1 . *L'ensemble des solutions de l'équation homogène $ay'' + by' + cy = 0$ est un $\mathbb{R}$-espace vectoriel de dimension 2.*

Nous admettons ce résultat.

1.2.1 Équation homogène

On cherche une solution de $ay'' + by' + cy = 0$ sous la forme $y(x) = e^{rx}$ où $r \in \mathbb{C}$ est une constante à déterminer. On trouve

$$ay'' + by' + cy = 0 \iff (ar^2 + br + c)e^{rx} = 0 \iff ar^2 + br + c = 0.$$

L'équation $ar^2+br+c = 0$ est appelée *l'équation caractéristique* associée à $ay''+by'+cy = 0$.

Théorème 1.2.2 *Soit $\Delta = b^2 - 4ac$, le discriminant de l'équation caractéristique associée à $ay'' + by' + cy = 0$.*
1) Si $\Delta > 0$, l'équation caractéristique possède deux racines réelles distinctes $r_1 \neq r_2$ et les solutions de $ay'' + by' + cy = 0$ sont les

$$y(x) = \lambda e^{r_1 x} + \mu e^{r_2 x} \text{ où } \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

2) Si $\Delta = 0$, l'équation caractéristique possède une racine double r_0 et les solutions de $ay'' + by' + cy = 0$ sont les

$$y(x) = (\lambda + \mu x)e^{r_0 x} \text{ où } \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

3) Si $\Delta < 0$ l'équation caractéristique possède deux racines complexes conjuguées $r_1 = \alpha + \beta i,\ r_2 = \alpha - \beta i$ et les solutions de $ay'' + by' + cy = 0$ sont les

$$y(x) = e^{\alpha x}(\lambda \cos(\beta x) + \mu \sin(\beta x)) \text{ où } \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

Exemple 4 *1) Résoudre sur $\mathbb{R}$ l'équation $y'' - y' - 2y = 0$. L'équation caractéristique est $r^2 - r - 2 = 0$, qui s'écrit aussi $(r + 1)(r - 2) = 0$ ($\Delta > 0$). D'où, pour tout $x \in \mathbb{R},\ y(x) = \lambda e^{-x} + \mu e^{2x}, avec \lambda, \mu \in \mathbb{R}$.*

2) Résoudre sur $\mathbb{R}$ l'équation $y''-4y'+4y = 0$. L'équation caractéristique est $r^2-4r+4 = 0$, soit $(r - 2)^2 = 0$ ($\Delta = 0$). D'où, pour tout $x \in \mathbb{R},\ y(x) = (\lambda x + \mu)e^{2x}$, avec $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$.

3) Résoudre sur $\mathbb{R}$ l'équation $y''-2y'+5y = 0$. L'équation caractéristique est $r^2-2r+5 = 0$. Elle admet deux solutions complexes conjuguées : $r_1 = 1 + 2i$ et $r_2 = 1 - 2i$ ($\Delta < 0$). D'où, pour tout $x \in \mathbb{R},\ y(x) = e^x(\lambda \cos(2x) + \mu \sin(2x))$, avec $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$.