Initiation aux équations différentielles pour la physique/chimie

1 Avant de commencer : quelques rappels sur la dérivation

Avant de se lancer dans la notion d'équations différentielles, faisons un petit rappel sur la dérivation des fonctions. On ne s'attarde pas sur les ensembles de définitions et de dérivabilité, on se concentre uniquement sur les formules de dérivation.

1.1 Fonctions de références

On rappelle, sans être exhaustif, quelques dérivées usuelles qui nous seront utiles par la suite :

Fonction $f(x)$	Dérivée $f'(x)$
$constante$	0
x^n	nx^{n-1}
e^x	e^x
$\ln(x)$	$\dfrac{1}{x}$
$\dfrac{1}{x}$	$-\dfrac{1}{x^2}$

1.2 Opérations sur les fonctions

Rappelons aussi les règles de dérivation pour des combinaisons de fonctions :

Opération	Dérivée
$f(x)+g(x)$	$f'(x)+g'(x)$
$f(x)\times g(x)$	$f'(x)g(x)+f(x)g'(x)$
$\dfrac{f(x)}{g(x)}$	$\dfrac{f'(x)g(x)-f(x)g'(x)}{(g(x))^2}$

Notons que dans le dernier cas, si f est la fonction constante égale à 1 on obtient :

Fonction $f(x)$	Dérivée $f'(x)$
$\dfrac{1}{g(x)}$	$-\dfrac{g'(x)}{(g(x))^2}$

Il est important d'ajouter une **nouvelle formule**, la dérivée d'une **fonction composée** :

$$\text{Si } f(x) = u \circ v(x) = u(v(x)) \text{ alors } f'(x) = v'(x) \times u'(v(x))$$

On peut détailler quelques cas particuliers de la dernière règle précédente :

Fonction $f(x)$	Dérivée $f'(x)$
$e^{u(x)}$	$u'(x)\times e^{u(x)}$
$\ln(\lvert u(x)\rvert)$	$\dfrac{u'(x)}{u(x)}$
$\sqrt{u(x)}$	$\dfrac{u'(x)}{2\sqrt{u(x)}}$

1.3 Exemples

Q 1 Déterminer les dérivées des fonctions suivantes :

a. $f(x) = \dfrac{1}{5x^2-3x+7}$ **b.** $g(x) = \ln(x^2+1)$ **c.** $h(x) = e^{x^3-1}$ **d.** $k(x) = \sqrt{3x+5}$

2 Équations différentielles ? De quoi parle-t-on ?

On appelle **équation différentielle** une équation dont les particularités sont les suivantes :

- l'inconnue de cette équation est une fonction (et pas un nombre),
- elle met en relation la fonction et ses dérivées.

Remarque : cette équation impose implicitement que la fonction solution soit « suffisamment » dérivable.

La notion d'équation différentielle est centrale dans le monde des sciences, car d'innombrables problèmes se modélisent par de telles équations.

Vocabulaire :

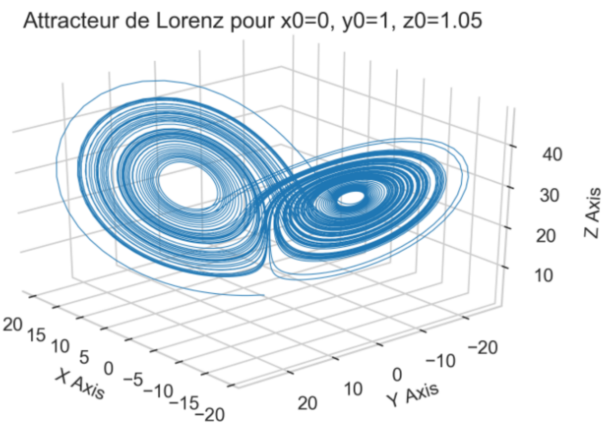
- On appelle **ordre** d'une équation différentielle la nombre maximal de dérivations successives envisagées,
- **Résoudre** une équation différentielle c'est déterminer toutes les fonctions qui satisfont la relation avec l'intervalle sur lequel cette relation est satisfaite.

Remarque : en général une équation différentielle est très difficile (voire impossible) à résoudre algébriquement, et dans le monde actuel on se contente dans ces cas-là à des résolutions numériques.
Exemple : (source : mémoire Muhlke Julie)

Les équations différentielles de Lorentz :

$$\begin{cases} x'(t) = \sigma(y(t) - x(t)) \\ y'(t) = rx(t) - y(t) - x(t)z(t) \\ z'(t) = x(t)y(t) - bz(t) \end{cases}$$

et une solution graphique :



Heureusement pour nous, les équations différentielles que nous rencontrerons seront très simples et on apprendra les techniques qui permettent de les résoudre…
Exemple : on considère l'équation différentielle d'ordre 2 :

$$(E) : \qquad (1 + x^2)y'' + xy' - y = 0$$

À noter :

- l'usage en mathématiques est que l'on note la fonction inconnue simplement par la lettre y, sans noter sa variable pour ne pas alourdir les notations. L'équation (E) s'écrirait avec nos notations « habituelles » :

$$(E) : \qquad (1 + x^2)f''(x) + xf'(x) - f(x) = 0$$

- Les physiciens qui traitent des fonctions avec plusieurs variables adoptent une notation un peu différente :

$$(E) : \qquad (1 + x^2)\frac{d^2 f}{dx^2}(x) + x\frac{df}{dx}(x) - f(x) = 0$$

Q 2 Montrer que la fonction f définie sur $\mathbb{R}$ par $f(x) = x + \sqrt{1 + x^2}$ est une solution sur $\mathbb{R}$ de l'équation (E).

3 Équations diff. d'ordre 1, linéaires à coefficients constants

Pour l'instant on ne va travailler qu'un type très particulier (et très simple) d'équations différentielles : *les équations différentielles linéaires à coefficients constants d'ordre 1*, c'est à dire les équations de la forme :

$$\boxed{(E) \qquad y'(t) + ay(t) = b(t)}$$

ou encore :

$$\boxed{(E) \qquad \frac{dy}{dt}(t) + ay(t) = b(t)}$$

où y est une fonction (que l'on cherche) de la variable t, b est une fonction définie sur un intervalle I, à valeurs dans $\mathbb{R}$ (ou $\mathbb{C}$) et a est un nombre réel (ou complexe) fixé (indépendant de la variable t).

Ainsi, **résoudre** l'équation (E) revient à chercher toutes les fonctions y définies sur $\mathbb{R}$, telles que :

$$\forall t \in \mathbb{R}, \qquad y'(t) + ay(t) = b(t)$$

L'équation **homogène associée à** (E) s'obtient en remplaçant le second membre par 0 :

$$(E_0) \qquad y' + ay = 0$$

Remarque : on a ici omis la variable t, mais c'est juste une commodité usuelle.

Propriété 1: les solutions de l'équation homogène

$$\boxed{(E_0) : \ y' + ay = 0}$$

sont les fonctions de la forme :

$$\boxed{y_h(t) = \lambda \mathrm{e}^{-at}} \qquad \text{où } \lambda \text{ est un nombre fixé}$$

1. Voyons une première méthode pour démontrer cette propriété :
   Soit f une fonction solution de (E_0). On peut toujours « forcer la factorisation » et écrire f sous la forme $f(t) = g(t)\mathrm{e}^{-at}$ avec $g(t) = f(t)\mathrm{e}^{at}$.

   Analyse : trouver les conditions nécessaires vérifiées par g pour que f soit bien solution de (E_0).

   S1

   Synthèse (réciproque) : vérifier que les fonctions f ainsi trouvées conviennent.

   S2

2. Donnons une autre démonstration (que les physiciens utilisent souvent), mais qui n'est valable que pour des solutions f qui ne s'annulent pas sur $\mathbb{R}$, en remplaçant (E_0) par : $\dfrac{y'}{y} = -a$.

S3

Propriété 2: solutions de l'équation générale :

$$(E):\ y'(t) + ay(t) = b(t)$$

Notons y_p une solution déjà connue de l'équation (E) (on parle de **solution particulière**). Alors l'ensemble des solutions de cette équation (E) est formé par les fonctions de la forme

$$y = y_p + y_h = y_p + \lambda \mathrm{e}^{-at}$$

où y_h est une solution (quelconque) de l'équation homogène associée à (E).

Démontrons cette propriété.

S4

Remarque : Ainsi, pour trouver l'ensemble des solutions de (E) il est nécessaire d'en trouver une solution particulière puis d'ajouter l'ensemble des solutions de l'équation homogène. Une telle solution particulière peut-être :

- soit évidente (une fonction constante par exemple). D'ailleurs c'est souvent le cas en physique lorsque le second membre est constant,
- soit trouvée par indication de l'énoncé

Q 3 Résoudre les équations différentielles suivantes :

a. $y' - 2y = 0$ **b.** $3y' = y$ **c.** $y' - 2y = 3$

Q 4 Résoudre les équations différentielles suivantes :

a. $\dfrac{df}{dt} + \sqrt{2} f = 0$ **b.** $\dfrac{df}{dt} - \dfrac{1}{2} f = 2$ **c.** $\dfrac{df}{dt}(t) + f(t) = t$

Q 5 **Avec conditions initiales (problème de Cauchy)** :
On vient de voir que les équations précédentes avaient toute une *famille* de solutions (il y a une constante indéterminée). En revanche, si l'on fixe en plus des *conditions initiales* (par exemple pour $t = 0$), cela détermine la valeur de λ et la solution devient unique (on dit que l'on a un problème de Cauchy). Par exemple, résoudre :

$$\begin{cases} \dfrac{df}{dt}(t) + f(t) = t \\ f(0) = 2 \end{cases}$$

Q 6 **Exemple en physique : circuit « R(L)C »**

En physique vous verrez par exemple que la tension u_C aux bornes d'un condensateur d'un circuit série type « RC » vérifie le problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \dfrac{du_C}{dt} + \dfrac{u_C}{RC} = \dfrac{E}{RC} \\ u_C(0) = 0 \end{cases}$$

Déterminer l'expression de u_C en fonction du temps.

4 Utilisation en chimie : cinétique de réaction

4.1 Ordre d'un réaction chimique : la théorie

En chimie, une réaction chimique est souvent modélisée par une équation différentielle. Il est souvent demandé de déterminer « l'ordre » de la réaction, c'est-à-dire la forme de l'équation différentielle qui modélise la réaction.

> Attention l'**ordre** de la réaction chimique n'a rien à voir avec l'*ordre* de l'équation différentielle. Dans les 3 cas qui suivent, l'équation différentielle mise en jeu est toujours d'ordre 1.

On va rencontrer 3 type d'ordres de réaction chimique (on note ici $[A]$ la fonction donnant la concentration d'une substance qui évolue en fonction du temps) :

Ordre de la réaction	**Ordre 0**	**Ordre 1**	**Ordre 2**
Chimie	$\dfrac{d[A]}{dt} = -k$	$\dfrac{d[A]}{dt} = -k[A]$	$\dfrac{d[A]}{dt} = -k[A]^2$
Mathématiques	$f'(t) = -k$	$f'(t) = -kf(t)$	$f'(t) = -kf(t)^2$

Voyons comment dans chaque cas on peut trouver la fonction solution de l'équation différentielle.

Pour les ordres 0 et 1, on reconnait des équations différentielles linéaires à coefficients constants (cf. section précédente). Pour l'ordre 2, l'équation n'est pas linéaire (à cause du carré), mais on va voir que l'on peut tout de même la résoudre facilement.

Ordre 0 : on reconnait une équation du type $y' + ay = b$ avec $a = 0$ et $b = -k$. Pour trouver les solutions, on peut donc soit utiliser la méthode vue précédemment soit directement primitiver chaque membre de l'égalité. On obtient :

$$\boxed{f(t) = -kt + C}$$

où $C = f(0)$ est une constante réelle.
Les solutions sont des **fonctions affines**.

Ordre 1 : la aussi on reconnait une équation du type $y' + ay = b$ avec $a = k$ et $b = 0$. On peut donc utiliser la méthode vue dans la section précédente pour donner (directement) les solutions.

$$\boxed{f(t) = Ce^{-kt}}$$

où $C = f(0)$ est une constante non nulle.
Les solutions sont des **fonctions exponentielles**.

Ordre 2 : attention car ici l'équation n'est plus linéaire. Si l'on se contente de chercher des solutions qui ne s'annulent pas on peut utiliser l'astuce de diviser l'équation par la fonction f^2. On obtient :

$$\frac{f'(t)}{f(t)^2} = -k \quad \text{puis en primitivant :} \quad -\frac{1}{f(t)} = -kt + C$$

où $C = -\dfrac{1}{f(0)}$ est une constante réelle. En isolant f, on trouve :

$$\boxed{f(t) = \frac{1}{kt - C}}$$

où $C = -\dfrac{1}{f(0)}$ est une constante réelle.
Les solutions sont des **fonctions rationnelles**.

Q 7 Déterminer les solutions des équations différentielles suivantes. Dans tous les cas on supposera que la fonction ne s'annule pas, qu'elle est positive et qu'elle vaut 1 à l'instant initial $t = 0$:

a. $f'(t) = -3$ **b.** $f'(t) = -2f(t)$ **c.** $f'(t) = -\dfrac{1}{5}f(t)^2$

4.2 Détermination pratique de l'ordre d'une réaction

Remarque pratique : pour chaque ordre de réaction chimique on peut faire apparaitre des fonctions affines en fonction du temps :

- **Ordre 0 :** la fonction $[A](t)$ est affine en fonction de t :

$$[A](t) = -kt + [A](0)$$

- **Ordre 1 :** la fonction $[A](t)$ est une exponentielle, donc $\ln([A](t))$ est affine en fonction de t :

$$\ln([A](t)) = -kt + \ln([A](0))$$

- **Ordre 2 :** la fonction $\dfrac{1}{[A](t)}$ est affine en fonction de t :

$$\frac{1}{[A](t)} = kt + \frac{1}{[A](0)}$$

Cette remarque nous permet de déterminer expérimentalement l'ordre d'une réaction chimique.

Méthode pratique pour déterminer l'ordre d'une réaction chimique

En pratique, on dispose de mesures expérimentales de la concentration $[A](t)$ en fonction du temps t et l'on cherche à déterminer l'ordre de la réaction chimique ainsi que la valeur du coefficient k.
L'idée est de **repérer graphiquement une droite**. On procède alors de la manière suivante :

- On trace le graphe de $[A](t)$ en fonction de t. Si la courbe est une droite, la réaction est d'ordre 0.
- Si la courbe n'est pas une droite, on trace le graphe de $\ln([A](t))$ en fonction de t. Si la courbe est une droite, la réaction est d'ordre 1.
- Si la courbe n'est toujours pas une droite, on trace le graphe de $\dfrac{1}{[A](t)}$ en fonction de t. Si la courbe est une droite, la réaction est d'ordre 2.

Dans tous les cas, la constante k est la pente de la droite obtenue.

Q 8 Voir les exos de la planche de physique-chimie.