

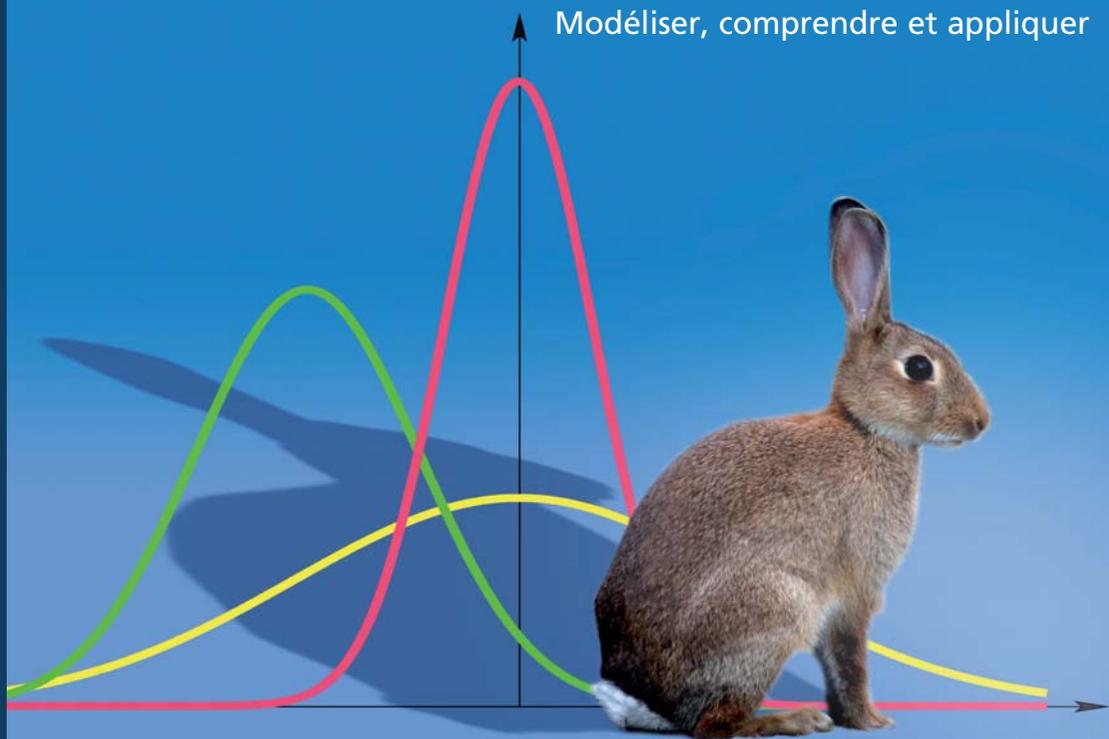
COLLECTION ENSEIGNEMENT SUP // // // Mathématiques

Gérard Biau, Jérôme Droniou et Marc Herzlich

L1-L3

Mathématiques et statistique pour les sciences de la nature

Modéliser, comprendre et appliquer



MATHÉMATIQUES
ET
STATISTIQUE
POUR LES SCIENCES
DE LA NATURE

Modéliser, comprendre et appliquer

Gérard Biau, Jérôme Droniou et Marc Herzlich

Collection dirigée par Daniel Guin



17, avenue du Hoggar
Parc d'activités de Courtabœuf, BP 112
91944 Les Ulis Cedex A, France

Illustration de couverture : Antoine Fournier (antoine@chimachima.net)

Imprimé en France

ISBN : 978-2-7598-0481-8

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

© 2010, **EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf,
91944 Les Ulis Cedex A

TABLE DES MATIÈRES

Avant-Propos	xi
I Bases	1
1 Fonctions d'une variable	3
1.1 Problème : évolution d'un pathogène	3
1.2 Généralités	4
1.2.1 Fonctions	4
1.2.2 Représentations graphiques	6
1.2.3 Variations	6
1.3 Quelques fonctions usuelles	8
1.3.1 Fonctions puissances	9
1.3.2 Logarithme	9
1.3.3 Exponentielle	11
1.4 Limites	14
1.4.1 Notion de limite	14
1.4.2 Règles de calcul de limites	16
1.5 Fonctions continues	19
1.5.1 Définition et propriétés	19
1.5.2 Valeurs intermédiaires	20
1.5.3 Extrema	21
1.5.4 Bijection réciproque	23
1.6 Dérivabilité	25
1.6.1 Définition et règles de calcul	25
1.6.2 Dérivée et sens de variation	27
1.6.3 Dérivée et extrema	28

1.7	Étude de fonctions	30
1.8	Évolution d'un pathogène : une solution	34
1.8.1	Vous avez dit modélisation ?	34
1.8.2	Premier exemple : β sur-linéaire	36
1.8.3	Second exemple : β sous-linéaire	38
1.9	Annexe	39
1.9.1	Notations usuelles	39
1.9.2	Manipulations d'inégalités	40
1.9.3	Intégrales et primitives	41
1.10	Exercices	43
2	Fonctions de plusieurs variables	49
2.1	Problème : étude thermodynamique d'un gaz	49
2.2	Définitions générales	50
2.2.1	Préliminaire : l'espace à n dimensions	50
2.2.2	Fonctions de plusieurs variables	52
2.2.3	Représentations graphiques, surfaces-graphe	54
2.2.4	Fonctions partielles	55
2.3	Dérivées partielles	57
2.3.1	Définition	57
2.3.2	Variations et extrema	59
2.3.3	Notation différentielle et formes différentielles	62
2.3.4	Dérivée directionnelle et fonctions composées	64
2.3.5	Dérivées d'ordre supérieur	66
2.4	Intégration le long d'un chemin	67
2.4.1	Intégrale d'une forme différentielle	68
2.4.2	Formule fondamentale du calcul différentiel	70
2.5	Formes exactes et fermées	72
2.6	Étude thermodynamique d'un gaz : une solution	74
2.7	Exercices	75
3	Probabilités	79
3.1	Problème : évaluation d'un risque de trisomie 21	79
3.2	Modélisation des phénomènes aléatoires	80
3.2.1	L'univers (des possibles)	80
3.2.2	Événements	81
3.2.3	Probabilité	82
3.2.4	Analyse combinatoire	85
3.2.5	Probabilités conditionnelles, indépendance d'événements	87

3.2.6	Formule de Bayes	90
3.2.7	Indépendance	91
3.3	Évaluation d'un risque de trisomie 21 : une solution	93
3.4	Variables aléatoires	94
3.4.1	Variables discrètes	97
3.4.2	Variables continues	99
3.5	Caractéristiques des variables aléatoires	103
3.5.1	Fonction de répartition	103
3.5.2	Espérance	105
3.5.3	Variance	109
3.5.4	Indépendance entre variables aléatoires	111
3.6	Quelques exemples de lois classiques	112
3.6.1	Loi de Bernoulli	112
3.6.2	Loi binomiale	113
3.6.3	Loi de Poisson	114
3.6.4	Loi exponentielle	115
3.6.5	Loi normale	116
3.6.6	Trois lois utiles en statistique	118
3.7	Exercices	122
4	Des probabilités aux statistiques	127
4.1	Problème : obésité chez les enfants	127
4.2	L'échantillonnage	129
4.2.1	Individus et population	129
4.2.2	L'échantillon aléatoire	130
4.3	Moyenne et variance empiriques	132
4.3.1	Moyenne empirique	132
4.3.2	Variance empirique	133
4.4	Distributions théorique et empirique	135
4.5	Fonction de répartition empirique	141
4.5.1	Définition	141
4.5.2	Quantiles et quantiles empiriques	144
4.6	Obésité chez les enfants : une solution	149
4.7	Annexe : loi des grands nombres et théorème central limite	152
4.7.1	Loi des grands nombres	152
4.7.2	Théorème central limite	155
4.8	Exercices	157

II	Statistique	161
5	Estimation ponctuelle et par intervalle	163
5.1	Problème : estimation d'un taux de germination	163
5.2	Estimation ponctuelle	164
5.2.1	Principes généraux	164
5.2.2	Moyenne et variance empiriques	165
5.3	Intervalles de confiance	169
5.3.1	Définition et principe de construction	169
5.3.2	Estimation par intervalle de la moyenne à variance connue	171
5.3.3	Estimation par intervalle de la moyenne à variance inconnue	175
5.3.4	Estimation par intervalle de la variance : le cas gaussien	178
5.4	Estimation d'un taux de germination : une solution	181
5.4.1	Estimation d'une proportion	181
5.4.2	Application au problème du pépiniériste	184
5.5	Estimation de la différence de deux moyennes	184
5.5.1	Échantillons indépendants	185
5.5.2	Échantillons appariés	190
5.6	Exercices	192
6	Tests d'hypothèses	197
6.1	Problème : croisement génétique	197
6.2	Notions générales sur les tests statistiques	199
6.3	Test de la moyenne dans un échantillon gaussien	203
6.4	Étude de la puissance d'un test de moyenne	213
6.5	Croisement génétique : une solution	216
6.6	Comparaison de deux moyennes	218
6.6.1	Échantillons indépendants	219
6.6.2	Échantillons appariés	224
6.7	Tests du χ^2	225
6.7.1	Test du χ^2 d'ajustement	226
6.7.2	Test du χ^2 d'indépendance	230
6.7.3	Test du χ^2 d'homogénéité	233
6.8	Exercices	236

7	Régression	243
7.1	Problème : taux de croissance d'une population	243
7.2	Régression linéaire simple	245
7.2.1	Le modèle linéaire	245
7.2.2	Ajustement	247
7.2.3	Généralisations	252
7.3	Qualité de l'ajustement linéaire	254
7.3.1	Coefficient de détermination	254
7.3.2	Corrélation	256
7.3.3	Corrélation et covariance	259
7.4	Intervalles de confiance, tests et prévision	261
7.4.1	Intervalles de confiance	261
7.4.2	Tests de signification des coefficients de régression	265
7.4.3	Prévision	266
7.5	Taux de croissance d'une population : une solution	269
7.6	Analyse de variance à un facteur	275
7.6.1	Données et modèle	275
7.6.2	Test de Fisher	276
7.6.3	Estimation des effets	281
7.6.4	Comparaisons multiples de moyennes	285
7.6.5	Quelques remarques terminales	287
7.7	Exercices	287
III	Systèmes dynamiques	291
8	Équations différentielles	293
8.1	Problème : modélisation d'une population de parasites	293
8.1.1	Motivation	293
8.1.2	Bilans	294
8.1.3	Qu'est-ce qu'une équation différentielle ?	297
8.2	Équations différentielles linéaires	298
8.2.1	Forme des équations différentielles linéaires	298
8.2.2	Résolution des équations différentielles linéaires	299
8.2.3	Comment trouver une solution particulière ?	301
8.3	Équations à variables séparées	303
8.3.1	Forme des équations différentielles à variables séparées	304
8.3.2	Résolution des équations à variables séparées	304
8.4	Un mot sur la condition initiale	307

8.5	Commentaire sur la résolution des équations différentielles en général	309
8.6	Modélisation d'une population de parasites : une solution . . .	309
8.6.1	Les œufs	310
8.6.2	Les larves	311
8.7	Exercices	313
9	Calcul matriciel et applications	317
9.1	Problème : croissance d'une population	317
9.2	Matrices	319
9.2.1	Addition de matrices	321
9.2.2	Multiplication de matrices	322
9.3	Systèmes linéaires	325
9.3.1	Deux équations et deux inconnues	325
9.3.2	Cas général	328
9.3.3	Matrice inverse	329
9.4	Applications linéaires	331
9.4.1	Définitions	331
9.4.2	Changement de repère	332
9.4.3	Changements de repère et applications linéaires . . .	336
9.5	Diagonalisation	337
9.5.1	Valeurs propres, vecteurs propres	338
9.5.2	Diagonalisation en pratique	340
9.6	Croissance d'une population : une solution	344
9.7	Annexe : la méthode du pivot	348
9.8	Exercices	357
10	Équations différentielles couplées et systèmes dynamiques	361
10.1	Problème : concentration d'un composé injecté dans le sang . .	361
10.1.1	Phénomène à temps discret ou à temps continu? . . .	361
10.1.2	Systèmes couplés d'équations différentielles	362
10.2	Systèmes d'équations différentielles linéaires du premier ordre	363
10.2.1	Existence et unicité des solutions	366
10.2.2	Résolution pratique	367
10.3	Concentration d'un composé injecté dans le sang : une solution	375
10.4	Sur l'allure des solutions lorsque $n = 2$	378
10.4.1	Informations qualitatives	380
10.4.2	Interprétation géométrique	380

10.5	Quelques exemples de dynamiques non linéaires en dimension 2	384
10.5.1	Problème : proies et prédateurs	384
10.5.2	Systèmes dynamiques	386
10.5.3	Portraits de phase	387
10.5.4	Courbes isoclines et points d'équilibre	390
10.5.5	Proies et prédateurs : une solution	394
10.5.6	Stabilité des équilibres	398
10.6	Exercices	401
IV	Solutions des exercices	407
11	Solutions de la partie I : Bases	409
11.1	Solutions des exercices du chapitre 1	409
11.2	Solutions des exercices du chapitre 2	419
11.3	Solutions des exercices du chapitre 3	422
11.4	Solutions des exercices du chapitre 4	432
12	Solutions de la partie II : Statistique	445
12.1	Solutions des exercices du chapitre 5	445
12.2	Solutions des exercices du chapitre 6	457
12.3	Solutions des exercices du chapitre 7	479
13	Solutions de la partie III : Systèmes dynamiques	491
13.1	Solutions des exercices du chapitre 8	491
13.2	Solutions des exercices du chapitre 9	499
13.3	Solutions des exercices du chapitre 10	510
	Bibliographie	525
	Index	527

Vj ku' r ci g' l p v g p v k p c m (' i g h ' d r e p m

AVANT-PROPOS

Pourquoi ce livre ?

Ce livre présente, en un seul volume, un choix de concepts et d'outils pouvant constituer le programme de mathématiques des trois premières années d'études universitaires en sciences de la nature ou de la vie.

Il est né de l'expérience que nous avons acquise dans l'enseignement des mathématiques à l'Université Montpellier 2 devant des étudiants de licences de biologie, chimie et sciences de la Terre. Dans le droit fil de cette expérience, nous avons souhaité écrire un ouvrage *de mathématiques* destiné en priorité à *des étudiants en sciences de la nature et de la vie* et, plus généralement, à tout lecteur curieux de découvrir une présentation moins abstraite, mais pas pour autant imprécise, des concepts mathématiques indispensables à la modélisation des phénomènes naturels.

L'ambition que nous nous sommes fixée est donc double :

- Que cet ouvrage ne soit pas un traité abstrait de mathématiques.
- Qu'il ne se résume pas à un recueil de techniques, où tout souci de compréhension profonde serait évacué au profit de la seule pratique.

Nous ne voulions pas non plus d'un intermédiaire maladroit qui sacrifierait tour à tour, selon les chapitres et les notions abordés, l'exigence de rigueur ou les objectifs pédagogiques. Nous avons donc fait le pari qu'il était possible d'écrire un livre d'un niveau mathématique homogène, nourri des applications et destiné à l'utilisateur (plutôt qu'au concepteur) des mathématiques.

Les trois maîtres mots de cet ouvrage sont : *modéliser*, *comprendre* et *appliquer*.

La *modélisation* est un élément essentiel de la démarche scientifique, qui permet de passer des résultats d'expériences ou d'un recueil d'observations à une

description organisée du monde. La nature est complexe et parvenir à un bon modèle est un travail délicat. Ce travail impose une réflexion profonde sur les phénomènes étudiés, sur les résultats souhaités et sur les hypothèses simplificatrices que le scientifique sera prêt à accepter. Même dans un ouvrage comme celui-ci, que nous avons voulu accessible aux non spécialistes, il nous a semblé essentiel de ne pas masquer ces difficultés. En tant que mathématiciens, nous considérons en effet que la démarche de modélisation fait partie intégrante de l'enseignement scientifique universitaire, y compris et surtout dans un cours de mathématiques ayant les ambitions décrites plus haut.

Le deuxième objectif de ce livre consiste à *faire comprendre* les concepts et les outils mathématiques introduits dans la première étape de modélisation. Il n'était pas question de produire un traité de mathématiques abstraites, mais nous pensons néanmoins qu'un usage efficace des mathématiques n'est possible que s'il s'accompagne d'une compréhension suffisamment profonde des concepts qui les sous-tendent. Sans cette dernière, l'esprit reste prisonnier de la technique et est incapable de s'en libérer lorsque le domaine d'application ou les circonstances l'exigent.

L'objectif final de l'ouvrage, enfin, réside dans l'*application* des concepts et des outils ou, en d'autres termes, dans la mise en action du modèle mathématique. Ce retour à l'origine des problèmes est évidemment indispensable. Il permet d'abord de tester la précision du modèle, d'en déterminer le domaine de validité et, une fois ces points établis, d'agir, de prévoir ou de prendre des décisions, justifiant ainsi tout le travail accompli.

Quel est son contenu ?

Les thèmes abordés dans le livre recouvrent l'essentiel des mathématiques enseignées aux étudiants de sciences de la nature et de la vie lors des trois premières années des études universitaires : bases de l'analyse des fonctions de une et plusieurs variables, probabilités élémentaires, concepts et outils statistiques, et introduction aux systèmes dynamiques. Ce contenu n'a évidemment rien de nouveau, l'originalité que nous réclavons résidant dans la volonté de rassembler *en un seul ouvrage* l'ensemble de ces notions mathématiques. Lorsqu'il était dispensé à Montpellier, cet enseignement était divisé en quatre cours répartis sur les cinq premiers semestres de la licence, chaque cours comptant une cinquantaine d'heures composées d'enseignement magistraux et de travaux dirigés.

La première partie du livre⁽¹⁾, intitulée « Bases », peut être pensée comme le bagage mathématique minimal que devraient posséder les étudiants à l'issue d'une première année d'études universitaires. Elle s'ouvre par un chapitre consacré à l'étude des fonctions d'une variable réelle, où l'on revient sur des connaissances déjà bien balisées au lycée. Lui succède un chapitre plus court dévolu aux fonctions de plusieurs variables, qui débute sur des considérations élémentaires (surfaces-graphes, lignes de niveau, dérivées partielles...) et se conclut par une introduction à des notions mathématiques plus élaborées utilisées en modélisation thermodynamique. Le calcul des probabilités et ses applications constituent le corps du troisième chapitre. Cette première partie se referme par un chapitre d'une nature plus descriptive, dédié aux relations délicates – et malheureusement pas toujours bien comprises – entre probabilités et statistique.

La « Statistique » est au cœur de la deuxième partie de l'ouvrage, qui porte d'ailleurs ce titre. Cette partie expose la démarche, les principaux concepts et les outils essentiels de l'approche inférentielle : estimation ponctuelle et par intervalle, tests paramétriques et non paramétriques, et enfin corrélation, régression et introduction à l'analyse de variance. La statistique inférentielle n'a d'autre objectif que de transporter des résultats numériques obtenus sur un échantillon à la population entière dont ce dernier est issu. Il s'agit d'un domaine essentiel des mathématiques appliquées, et nous avons souhaité en faire une présentation rigoureuse mais sans formalisme excessif, s'appuyant sur de nombreuses applications.

La troisième partie est consacrée aux « Systèmes Dynamiques », appellation que nous avons préférée à celle, plus réductrice, d'équations différentielles. Le fil directeur consiste ici à modéliser des phénomènes dépendant du temps de manière déterministe, c'est-à-dire ne laissant pas de place à l'aléatoire. Un premier chapitre présente quelques éléments d'étude des équations différentielles, pour la plupart déjà abordés dans le secondaire mais qu'il est bon de se remémorer (avec peut-être un éclairage nouveau), tant ces équations sont indispensables pour modéliser de nombreux phénomènes naturels. Le chapitre suivant introduit les bases du calcul matriciel, partant de considérations assez simples sur les systèmes linéaires pour aboutir au concept de diagonalisation, indispensable à l'analyse de systèmes dynamiques en temps discret (décrivant par exemple des phénomènes dont l'évolution est annuelle ou saisonnière). Le dernier chapitre de cette partie est un mariage entre équations différentielles et calcul matriciel, thèmes des deux développements précédents ; il a pour objet les systèmes d'équations différentielles, qui jouent eux aussi un rôle important dans la modélisation de nombreux phénomènes dynamiques complexes.

⁽¹⁾À l'exception des paragraphes 2.4 à 2.6 du chapitre consacré aux fonctions de plusieurs variables.

Enfin, la quatrième et dernière partie de l'ouvrage regroupe les solutions aux exercices proposés à la fin de chaque chapitre.

Comment le lire ?

La démarche pédagogique que nous avons choisie consiste à ouvrir chaque chapitre par la présentation d'une ou plusieurs situations concrètes se prêtant à une modélisation. Les concepts mathématiques pertinents se trouvant ainsi naturellement motivés, le reste du texte est alors consacré à leur étude. Le chapitre se referme enfin par un retour à la problématique ayant servi de motivation initiale.

De nombreux exercices permettent de compléter l'exposé et d'ouvrir vers davantage d'applications⁽²⁾.

Nous nous sommes efforcés d'adopter un mode de présentation adapté à notre public, remplaçant autant que possible la litanie classique « Définition – Proposition – Théorème » bien connue des mathématiciens par un style plus discursif. En particulier,

*Lorsqu'un concept ou outil nouveau est introduit pour la première fois, sa définition apparaît dans un cadre bleu, le **mot nouveau** étant mis en gras et bleu.*

Lorsque son importance ne justifie pas une telle mise en exergue, le concept est placé dans une phrase imprimée en bleu, mais il est toujours mis en gras lors de sa première apparition.

Les propriétés les plus importantes, énoncés de théorèmes ou de techniques à retenir, sont mises en valeur par un cadre gris.

Enfin, un index terminal reprend les termes les plus significatifs. Profitons de l'occasion pour rappeler qu'un texte mathématique doit toujours être lu plusieurs fois, et crayon en main ! À ce titre, les exercices font partie intégrante du texte, étant entendu que l'on n'apprend les mathématiques qu'en les pratiquant.

⁽²⁾Soulignons néanmoins un point important : cet ouvrage ne prétend aucunement présenter des descriptions réalistes de phénomènes naturels. Les modèles utilisés doivent être envisagés comme autant d'exemples *fictifs*, mais néanmoins bien souvent classiques et *similaires dans leur esprit* à ceux utilisés par les véritables spécialistes.

Remerciements

C'est Daniel Guin qui nous a poussés (non sans mal!) à écrire ce livre. Il aura finalement eu gain de cause, et qu'il soit donc remercié pour avoir su nous encourager sans nous décourager. Nos collègues Philippe Castillon, Thomas Hausberger, Pierre-Louis Montagard et Nicolas Saby (du côté mathématique), Jean-Baptiste Ferdy, Bernard Godelle et Agnès Mignot (du côté biologie) ont participé à Montpellier à la réflexion sur les contenus et à la mise en place des enseignements qui ont donné naissance à ce livre. Même s'ils n'ont pas contribué à son écriture, les nombreuses discussions que nous avons eues avec eux ont été très utiles dans la réalisation du projet. Pierre Jacob, qui a gentiment accepté de nous communiquer l'ensemble des notes qu'il avait patiemment écrites à l'occasion d'enseignements de même nature, fait l'objet de toute notre gratitude.

De nombreux autres collègues ont bien voulu prendre sur leur temps afin de nous faire partager leurs avis, remarques ou commentaires sur tout ou partie de l'ouvrage. Citons ainsi Olivier Bouaziz, Claire Coiffard, Robert Eymard, Aurélie Fischer, Alain Prignet, Philippe Saint Pierre et Clara Zelli. À nouveau, une mention spéciale doit être accordée à Jean-Baptiste Ferdy, avec qui nous avons eu de multiples occasions de discuter du contenu du livre, des meilleures manières de l'aborder, et qui nous a entretenu nombre de fois de son expérience d'enseignant et de chercheur en biologie intéressé par les méthodes mathématiques. Les étudiants montpelliérains de licences de biologie, de sciences de la Terre et de chimie biomoléculaire des années 2005 à 2009 ont vécu avec nous l'enseignement de la plus grande partie de ce manuel, nous permettant de corriger de nombreux défauts. Un grand merci en particulier à Sylvain Desruelles pour sa relecture des chapitres 8 à 10.

Enfin, le lecteur nous a fait nombre de critiques constructives, pour lesquelles nous lui sommes infiniment redevables.

Vj ku' r ci g' k p v g p v k q p c m { ' i g h v ' d r e p m

Première partie

Bases

Vj ku' r ci g'kpvgpvkqpcmf 'ighv'dncpm

FONCTIONS D'UNE VARIABLE

1.1. Problème : évolution d'un pathogène

On connaît, dans le monde des micro-pathogènes, quelques virus et bactéries extrêmement virulents, qui conduisent généralement à la mort de leur hôte. C'est le cas, par exemple, de la fièvre hémorragique Ebola, du virus de la variole ou encore de certaines formes d'anthrax. Ces pathologies, quoique fortement médiatisées, n'en demeurent pas moins exceptionnelles, et la grande majorité des agents infectieux induisent fort heureusement des maladies aux conséquences moins dramatiques.

La théorie de la sélection naturelle, énoncée par Darwin au XIX^e siècle, prédit que l'évolution d'une espèce se fait dans le sens d'une plus grande compétitivité. En d'autres termes, un individu sera d'autant plus favorisé qu'il engendrera davantage de descendants que ses compétiteurs. Transposée au cas des micro-pathogènes, cette « règle » affirme que si plusieurs souches d'une même bactérie ou d'un même virus sont en compétition, la souche favorisée par la sélection naturelle sera la plus apte à se développer et à diffuser au sein de la population. Mais dès lors, comment expliquer que la plupart des microbes soient aussi peu agressifs et virulents? Interrogé, le biologiste peut fournir un modèle exprimant (avec une formule mathématique) l'efficacité de transmission d'un agent pathogène en fonction de sa virulence intrinsèque. La sélection naturelle tend alors à maximiser cette efficacité, et là réside l'explication de la grande diversité du monde des micro-pathogènes.

L'*étude de fonctions* consiste précisément à mettre en place des techniques permettant d'étudier efficacement le comportement d'une quantité (ici, l'efficacité de transmission) en fonction d'une autre quantité (ici, la virulence du pathogène),

Exercice 2

1. Le composé A subit deux phénomènes : l'ajout en continu (à un débit $d(t)$) et la réaction transformant A (et B) en C . D'après les hypothèses, entre deux instants t et $t + \delta t$ proches, et en notant $q_A(t)$ la quantité de A présente à l'instant t ,

$$q_A(t + \delta t) - q_A(t) = d(t)\delta t - k_1 q_A(t)\delta t.$$

En divisant par δt et en le faisant tendre vers 0, on parvient à

$$q'_A(t) = d(t) - k_1 q_A(t).$$

On traite de même les deux autres produits intéressants C et E . Avec des notations évidentes,

$$\begin{aligned} q_C(t + \delta t) - q_C(t) &= k_1 q_A(t)\delta t - k_2 q_C(t)\delta t + k_3 q_E(t)\delta t \\ q_E(t + \delta t) - q_E(t) &= k_2 q_C(t)\delta t - k_3 q_E(t)\delta t, \end{aligned}$$

et finalement

$$q'_C(t) = -k_2 q_C(t) + k_3 q_E(t) + k_1 q_A(t), \quad q'_E(t) = k_2 q_C(t) - k_3 q_E(t).$$

On a donc une équation indépendante (celle sur q_A), qui peut être résolue directement, et un système de deux équations couplées portant sur q_C et q_E , dans lequel q_A doit être traité comme un second membre.

Le modèle en temps continu peut se justifier par le fait que les évolutions de A , C , etc. sont le résultat d'un cumul de très nombreux phénomènes rapides (les réactions à l'échelle moléculaire).

2. Avec le choix de valeurs numériques de l'énoncé, la première équation devient $q'_A(t) = -\frac{1}{10}q_A(t) + \frac{1}{10}$, qui se résout facilement en

$$q_A(t) = 1 + C_A e^{-\frac{1}{10}t}$$

(avec C_A une constante). Le système couplé est alors

$$q'_C(t) = -\frac{1}{10}q_C(t) + \frac{2}{10}q_E(t) + \frac{1}{10} + \frac{C_A}{10}e^{-\frac{1}{10}t}, \quad q'_E(t) = \frac{1}{10}q_C(t) - \frac{2}{10}q_E(t).$$

La matrice carrée pertinente est $\begin{pmatrix} -\frac{1}{10} & \frac{2}{10} \\ \frac{1}{10} & -\frac{2}{10} \end{pmatrix}$, de valeurs propres 0 et $-\frac{3}{10}$, donc diagonalisable, par exemple dans le repère formé des

vecteurs propres $\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Si l'on note U la matrice de passage vers ce repère (dont les colonnes sont données par ces deux vecteurs), les coefficients du vecteur $\begin{pmatrix} r_0(t) \\ r_1(t) \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} q_C(t) \\ q_E(t) \end{pmatrix}$ sont solutions de

$$\begin{aligned} r_0'(t) &= \frac{1}{30} + \frac{C_A}{30} e^{-\frac{1}{10}t} \\ r_1'(t) &= -\frac{3}{10}r_1(t) - \frac{1}{30} - \frac{C_A}{30} e^{-\frac{1}{10}t}, \end{aligned}$$

et on trouve

$$\begin{aligned} r_0(t) &= C_0 + \frac{1}{30}t - \frac{C_A}{3} e^{-\frac{1}{10}t} \\ r_1(t) &= C_1 e^{-\frac{3}{10}t} - \frac{1}{9} - \frac{C_A}{6} e^{-\frac{1}{10}t} \end{aligned}$$

(chercher par exemple une solution particulière de la seconde équation de la forme $t \mapsto E + F e^{-\frac{1}{10}t}$). Les constantes C_A , C_0 et C_1 se calculent en fonction des conditions initiales : on a $0 = q_A(0) = 1 + C_A$, donc $C_A = -1$ et

$$q_A(t) = 1 - e^{-\frac{1}{10}t}.$$

Par ailleurs, $q_C(0) = q_E(0) = 0$, ce qui implique $r_0(0) = r_1(0) = 0$. En conséquence, $C_0 - \frac{C_A}{3} = 0$ et $C_1 - \frac{1}{9} - \frac{C_A}{6} = 0$, soit finalement $C_0 = -\frac{1}{3}$ et $C_1 = -\frac{1}{18}$. Un calcul direct de $\begin{pmatrix} q_C(t) \\ q_E(t) \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} r_0(t) \\ r_1(t) \end{pmatrix}$ mène alors à

$$\begin{aligned} q_C(t) &= \frac{1}{15}t - \frac{5}{9} + \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{10}t} + \frac{1}{18}e^{-\frac{3}{10}t} \\ q_E(t) &= \frac{1}{30}t - \frac{4}{9} + \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{10}t} - \frac{1}{18}e^{-\frac{3}{10}t}. \end{aligned}$$

3. La quantité de composé A reste toujours inférieure à 1 (le débit constant, ici), ce qui est souhaitable si A est toxique. En revanche, les quantités de C et E deviennent aussi grandes que l'on veut en attendant assez longtemps. Une méthode de ce type permet donc