ISSN: 2319-0124
josif 2023
15ª JORNADA CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA
12º SIMPÓSIO DE PÓS-GRADUAÇÃO
DO IFSULDEMINAS
REALIZAÇÃO INSTITUTO FEDERAL Sul de Minas Gerais
APOIO FAPEMIG CNPq

Um Estudo Qualitativo da EDO de uma Reação Química

Nestor R. de A. NETO[1]; Sthevan G. de ALMEIDA[2]

RESUMO

As equações diferenciais contém derivadas de uma ou mais funções em relação às variáveis independentes, podendo ser classificada em relação ao tipo, ordem e linearidade. Com frequência descrevemos o comportamento de fenômenos reais em termos matemáticos, sendo essa descrição denominada modelo matemático. Sistemas dinâmicos são uma área na matemática que envolve o estudo do comportamento e da evolução de sistemas ao longo do tempo, podem ser representados por equações diferenciais e seu comportamento pode ser analisado em termos de estabilidade, bifurcação, entre outros conceitos. Este trabalho foi centrado no estudo do comportamento qualitativo da região de estabilidade de uma equação diferencial presente na reação química com base na teoria qualitativa das EDO desenvolvida por Poincaré, interpretando o comportamento global do resultado e a descrição da solução ao longo do tempo.

Palavras-chave: Ponto de Equilíbrio; Estabilidade e Sistemas Dinâmicos.

1. INTRODUÇÃO

O estudo das EDO até a primeira metade do século XIX era realizado utilizando métodos analíticos, que envolviam a procura de soluções explícitas através da integração. Poincaré foi um dos principais matemáticos a introduzir a teoria qualitativa das EDO na segunda metade do século XIX, segundo (FIRES, 2018) ele estabeleceu muitos dos aspectos que permitiram estudar propriedades assintóticas das soluções de uma equação diferencial, como estabilidade e periodicidade, sem que seja necessário resolver explicitamente a equação diferencial. Portanto, o conhecimento dessa ferramenta matemática é de suma importância, visto que, esta pode ser utilizada para resolver e antecipar problemas diversificados.

Reação química é toda e qualquer interação entre substâncias intituladas reagentes, com suas moléculas se colidindo e se rearranjando entre si, em busca da conformação de menor energia, transformando a matéria, obtendo o que chamamos de produto. Neste trabalho vamos usar o método qualitativo desenvolvido por Poincaré nas equações diferenciais, que estão presentes nos livros das EDO e é familiar à qualquer discente de ensino superior, em alguns elementos de uma reação química, através da proporção estequiométrica entre os reagentes e produtos de uma reação, é possível prever o quanto de produto será obtido, em relação ao tempo.

3. MATERIAL E MÉTODOS

[1] Professor de Matemática (recém formado pelo IFSULDEMINAS). E-mail: nestorrodrigues61@gmail.com
[2] Discente de Engenharia de Alimentos. IFSULDEMINAS- Campus Inconfidentes. E-mail: sthevan.gama@alunos.ifsuldeminas.edu.br

O procedimento de estudo é caracterizado como revisão bibliográfica, serão utilizados os conteúdos abordados nos livros das EDO: (ZILL, 2016) e (BOYCE; DIPRIMA, 2006) para averiguar vários elementos de uma reação química e efetuar a previsão da quantidade de reagentes presente quando $t \to \infty$.

Uma reação química de segunda ordem envolve a colisão de uma molécula de uma substância P com uma molécula de uma substância Q para produzir uma molécula de uma nova substância X, ou seja,

$$P + Q \to X$$

Suponha que $p,\ q \in \mathfrak{R}^*$, onde $p \neq q$, são as concentrações iniciais de P e Q, respectivamente, e seja x(t) a concentração de X no instante t. Então, p - x(t) e q - x(t) são as concentrações de P e Q no instante t e a taxa segundo a qual ocorre a reação é dada pela equação:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(p - x)(q - x)$$

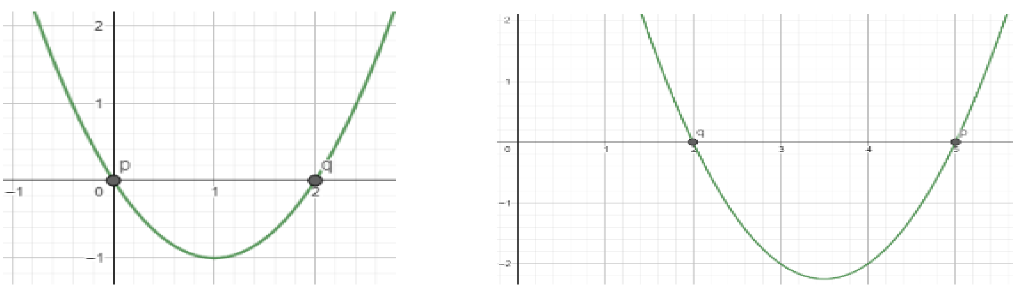
onde α é uma constante positiva.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Poincaré desenvolveu a teoria qualitativa das EDO, ela estuda o comportamento local e global das soluções de uma EDO a partir dos pontos de equilíbrio, classificando-os e analisando o comportamento futuro das soluções. Segundo (ZILL, 2016), dizemos que o valor x^* é um ponto de equilíbrio da EDO $x' = f(x)$ quando $f(x^*) = 0$, ou seja, raiz de f. Suponha que $x(t)$ seja uma solução não constante e que x^* seja um ponto fixo da equação diferencial autônoma, existem três tipo de comportamento que $x(t)$ pode apresentar perto do ponto de equilíbrio: assintoticamente estável, assintoticamente instável e semi-estável.

$$\alpha(p - x)(q - x) = 0$$

Os pontos críticos são p e q, estudando o comportamento desses pontos, temos duas situações diferentes quando $p > q$ e $p < q$:



$p < q$ $\qquad\qquad$ $p > q$

Fonte: GeoGebra

Para analisar o comportamento do ponto fixo e classificá lo, estudamos o sinal da função $f(x)$. Quando $p < q$ vemos que a função é positiva em $]\infty, p[\ \cup\ ]q, \infty[$ e negativa em $[p < x < q]$, logo podemos classificar o ponto fixo p como estável, pois todas as soluções tendem a solução de equilíbrio e o ponto crítico q como instável, pois todas as soluções afastam-se da solução de equilíbrio conforme t aumenta. Para $p > q$ observamos que a função é positiva em $]-\infty, q[\ \cup\ ]p, \infty[$ e negativa em $[q < x < p]$, logo podemos classificar o ponto fixo q como estável e o ponto crítico p como instável.

A seguir trouxe um exemplo prático proposto no livro de (ZILL, 2016):

Exemplo. Dois produtos químicos A e B são combinados para formar um produto químico C. A taxa, ou velocidade, da reação é proporcional ao produto das quantidades instantâneas de A e B não convertidas no produto químico C. Inicialmente, existem 40 gramas de A e 50 gramas de B, e para cada grama de B, 2 gramas de A são usados. É observado que 10 gramas de C são formados em 5 minutos. Qual é a quantidade limite de C depois de um longo período de tempo?

Com as condições estabelecidas pelo enunciado, no qual em t = 0 temos p = 40, q = 50 e a cada 1 grama de C temos 2/3 de A e 1/3 de B, podemos escrever o seguinte PVI:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} \approx \left(40 - \dfrac{2}{3}x\right)\left(50 - \dfrac{x}{3}\right), \\ x(0) = 0, \\ x(5) = 10. \end{cases}$$

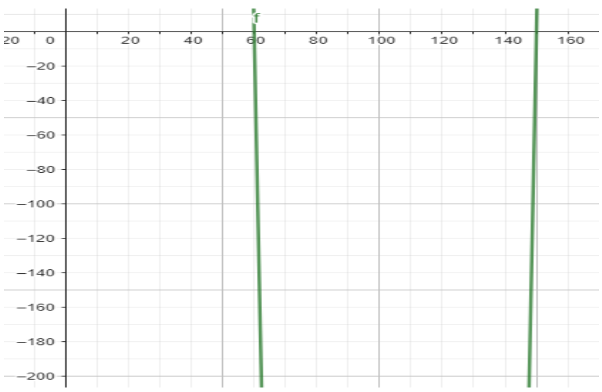
fatorando o PVI e aplicando uma constante α positiva , temos que p = 150 e q = 60, ou seja,

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \alpha(150 - x)(60 - x), \\ x(0) = 0, \\ x(5) = 10. \end{cases}$$

Sabemos que para encontrar a solução de equilíbrio de uma EDO, igualamos a zero, encontramos os pontos críticos e fazemos o estudo de sinal da função.

$$\alpha(150 - x)(60 - x) = 0$$

observamos que a função representada é uma função quadrática, portanto possui dois pontos de equilíbrio: 150 e 60. Agora fazemos o estudo de sinal da função e classificamos os pontos fixos:



Vemos que a função é positiva em $]-\infty, 60[\ \cup\ ]150, \infty[$ e negativa em $[60 < x < 150]$, logo podemos classificar o ponto fixo $x^* = 60$ como estável pois todas as soluções tendem à ele e o ponto crítico $x^* = 150$ como instável pois as soluções se afastam dele. Portanto, temos como resultado 60, ou seja, o produto resultará em 60 gramas e essa informação do pode ser obtida sem resolver a equação diferencial, através dessa análise qualitativa, logo x será p ou q.

5. CONCLUSÃO

O conhecimento dessa ferramenta matemática é de suma importância, visto que, esta pode ser utilizada para resolver e antecipar problemas diversificados. Como acontece nesse caso, após a análise qualitativa da EDO chegamos a conclusão de que, conforme o tempo t passa, a reação química tende a estabilizar sempre no $min\ (p,\ q)$, ou seja,

$$\lim_{t \to \infty} x(t) = \min\,(\mathrm{p, q})$$

sendo assim, p e q serão assíntotas horizontais na função x(t). Podemos também fazer uma análise quantitativa da EDO para chegar neste resultado mas o cálculo torna-se complicado pois teremos que descobrir a solução da EDO, aplicar o PVI e resolver o limite da função quando $t \to \infty$.

6. REFERÊNCIAS

FIRES, F. T. Estudo de Bifurcações para uma Família de Equações Diferenciais Ordinárias com mais de um parâmetro: Uma Introdução à Estabilidade e aos Sistemas Dinâmicos. TCC- Curso de Licenciatura em Matemática, Instituto Federal de Educação e Tecnologia de São Paulo, 2018.

LOUZADA, Ana J. S.; ALVES, Luciana A. Equações Diferenciais com Aplicações na Química. REMEF, 2022. Disponível em:https://seer.ufu.br/index.php/matematicaeestatisticaemfoco/article/view/63350. Acesso em 02 de Agosto de 2023.

NETO, Nestor R. A. Um Estudo sobre Bifurcações em Sistemas Dinâmicos Unidimensionais. TCC- Curso de Licenciatura em Matemática, Instituto Federal de Educação e Tecnologia do Sul de Minas - Campus Inconfidentes, 2023.

ZILL, D. Equações Diferenciais com Aplicações em Modelagem. 3 ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016.