

## Modelos de Equações Diferenciais Ordinárias aplicados às Reações de 1º e 2º Ordens.

Marcelo Silva Oliveira<sup>1</sup>, Caline Ferreira Santos<sup>2</sup>, Nemésio Matos de Oliveira Neto<sup>3</sup>, Edson Ramos de Jesus Almeida<sup>4</sup>.

1. Estudante de IC da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB; [\\*marcelo.math@hotmail.com](mailto:marcelo.math@hotmail.com)
2. Estudante de IC da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB;
3. Professor doutor do Depto.de Química e Exatas da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB;
4. Professor mestre do Depto.de Química e Exatas da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB.

Palavras Chave: Modelagem Matemática, Reações Químicas, EDO's

### Introdução

Nesse trabalho desenvolvemos um estudo sobre Reações Químicas Homogêneas via Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) de primeira e segunda ordens. Uma vez que as EDOs estudadas são passíveis de serem resolvidas analiticamente, utilizamos técnicas de resolução de equações diferenciais ordinárias para obter as soluções das mesmas. Em seguida, realizamos uma análise qualitativa das soluções sem resolver as EDOs. Para tal utilizamos conceitos como pontos críticos, estabilidade, retratos de fases, etc. Em tal análise qualitativa, no caso de EDOs não lineares, analisamos o comportamento das soluções (mesmo sem resolver as EDOs) próximas dos seus pontos críticos, classificando-as quanto aos seus comportamentos e estabilidades.

### Resultados e Discussão

Começamos nossos estudos pelas reações de primeira ordem,  $A \rightarrow P$ . As equações diferenciais que representam as velocidades de consumo do reagente A e de formação do produto P são:  $[A]' = -k[A]$  e  $[P]' = k[A]$ . Onde, k é uma constante química que depende, entre outros fatores, da temperatura, pressão e umidade. A união dessas equações forma um sistema de equações diferenciais lineares homogêneas com coeficientes constantes de primeira ordem. Os coeficientes constantes geram uma matriz quadrada 2x2, a partir da qual, obtemos os autovalores 0 e  $-k$  associados, respectivamente, aos autovetores linearmente independentes  $\xi^{(1)} = (0, 1)$  e  $\xi^{(2)} = (1, -1)$ . Ao analisar a solução geral do sistema,  $X(t) = C_1 * \xi^{(1)} + C_2 * \xi^{(2)} * e^{-k*t}$ , verificamos que alguns dos valores das constantes  $C_1$  e  $C_2$  não correspondem à realidade, pois determinam concentrações negativas, o que é um absurdo. Além disso, alterações em seus valores e na constante química k modificam pouco o comportamento dos retratos de fases e dos gráficos das concentrações versus tempo, entretanto, a mudança nos sinais dessas constantes alteram completamente o comportamento das representações gráficas.

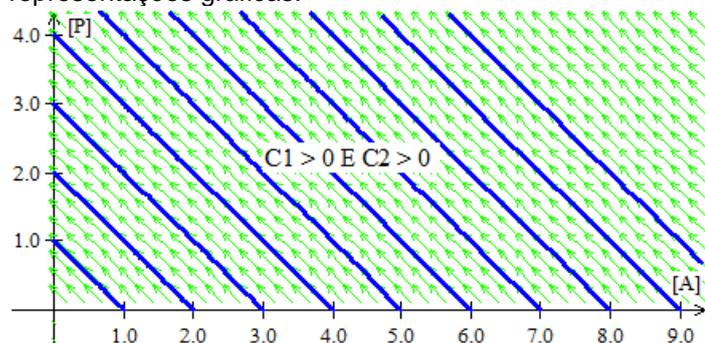


Figura 1. Retrato de fase  $A \rightarrow P$ ,  $k = 1$ ,  $|C_1| = |C_2|$ .

Em seguida, passamos ao estudo das reações de segunda ordem,  $A + B \rightarrow P$ . Nesse caso, o sistema é formado pelas equações:  $[A]' = -k[A][B]$  e  $[B]' = -k[A][B]$ , entretanto, por ser um sistema de equações não lineares, devemos primeiramente aproximá-lo por um sistema quase linear. Sendo assim, estudamos o sistema próximo

aos seus pontos críticos:  $(0, 0)$ ,  $(A_0, 0)$ ,  $(0, B_0)$ , obtemos assim, três soluções gerais para o sistema inicial.

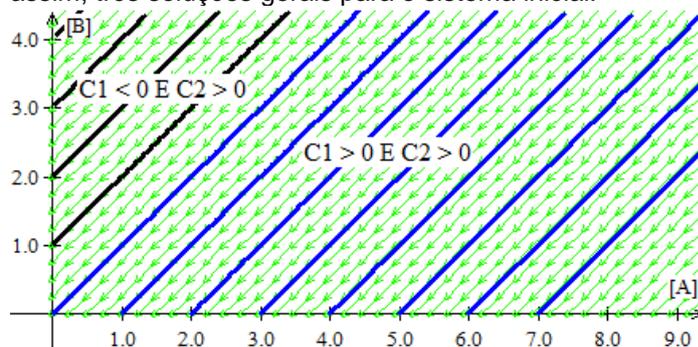


Figura 2. Retrato de fase  $A + B$ ,  $k = 1$ ,  $|C_1| = |C_2|$ .

Por fim, encontramos os autovalores 0 e  $-(k_1 + k_2)$  associados, respectivamente, aos autovetores linearmente independentes,  $\xi^{(1)} = (1, k_1 / k_2)$  e  $\xi^{(2)} = (1, -1)$ , da matriz quadrada 2x2 dos coeficientes do sistema formado pelas equações:  $[A]' = k_2[P] - k_1[A]$  e  $[P]' = k_1[A] - k_2[P]$ , da reação reversível  $A \rightleftharpoons P$ .

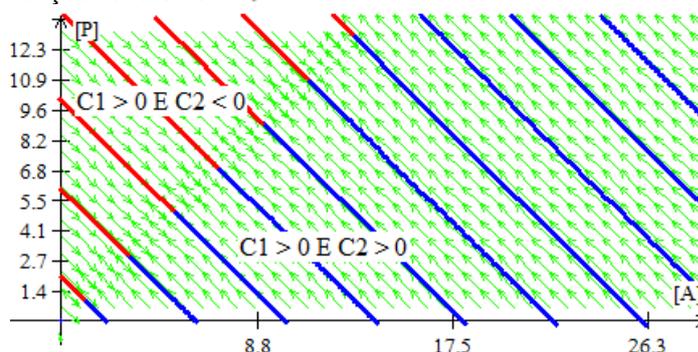


Figura 3. Retrato de fase  $A \rightleftharpoons P$ ,  $k_1 = k_2 = 1$ ,  $|C_1| = |C_2|$ .

### Conclusões

Nosso trabalho ainda esta em fase de desenvolvimento, por isso, discorreremos acerca das nossas considerações e perspectivas. Assim, salientamos que a análise qualitativa de (sistemas de) EDO através de conceitos como estabilidade, pontos críticos, dentre outros, é uma ferramenta poderosa para obtermos informações do comportamento das soluções dos sistemas, sem mesmo conhecê-los. Tal análise, no caso de EDOs lineares, é feita diretamente, analisando-se os autovalores das matrizes associadas a cada sistema. Por outro lado, no caso de sistemas não lineares, foi preciso encontrar um sistema quase linear associado, para só então calcular os autovalores associados ao sistema de EDOs. Em ambos os casos, os sinais dos autovalores determinam o comportamento das soluções dos sistemas de EDOs (isto é, a dinâmica das concentrações) próxima aos pontos críticos. Por fim, esperamos implementar uma análise quantitativa via integração numérica utilizando o método de Runge-Kutta de 4ª Ordem, com o intuito de aprofundarmos nossas análises de sistemas que reagem quimicamente.

### Agradecimentos

Agradecemos a Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.