EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

06/07/21

$A \xrightarrow{k} B$ reação química

A, B substâncias

$k > 0$ taxa da reação (constante)

$[A], [B]$: concentração de A, B resp (mols / litro)

$$[A] + [B] = \text{constante}$$

Derivando em relação ao tempo:

$$\frac{d}{dt}[A] + \frac{d}{dt}[B] = 0$$

$$r := -\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt}$$ taxa de desaparecimento de $[A]$ e criação de B

$[A](t), [B](t)$ funções do tempo

$$\left.\begin{aligned} [A](0) &= [A]_0 \\ [B](0) &= [B]_0 \end{aligned}\right\}$$ concentrações iniciais ($[B]_0 = 0$)

$$\boxed{r = k[A]}$$

$$\underset{\text{1.ª derivada}}{\nearrow}\ \frac{d[A]}{dt} = \underbrace{-k[A]}_{\substack{\uparrow \\ \text{função linear de } [A]}}$$

Equação diferencial 1.ª ordem

Incógnita $[A](t)$ é uma função

Resolvamos esta equação:

$$\frac{d[A]}{[A]} = -kt$$

$$\int \frac{dx}{x} = \ln|x| + c$$

$$\int k\,dt = kt + c$$

$$\int \frac{d[A]}{[A]} = \int -k\,dt$$

$$\ln[A] = -kt + c$$

$$e^{\ln[A]} = e^{(-kt+c)}$$

$$[A] = e^{-kt}\, \underbrace{e^{c}}_{\tilde{c}\,>\,0}$$

$$[A] = \tilde{c}\, e^{-kt} \qquad \tilde{c} > 0$$

$t=0$: $[A]_0 = \tilde{c}\, e^{0} = \tilde{c}$

$$\therefore\ [A] = [A]_0\, e^{-kt}$$

$$[A] + [B] = [A]_0 + \cancel{[B]_0}$$

Diagrama: (?)

$[B]_0 = 0$

$$\therefore [B] = [A]_0 \left(1 - e^{-kt}\right)$$

$(e^x)' = e^x$

$(e^{kx})' = k e^{kx}$

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \qquad k_1, k_2 > 0$$

$$(*) \begin{cases} \dfrac{d[A]}{dt} = -k_1 [A] \\ \dfrac{d[B]}{dt} = k_1 [A] - k_2 [B] \end{cases}$$

Sistema de eqs. diferenciais lineares de 1.ª ordem

$$\frac{d[C]}{dt} = k_2 [B]$$

$$[A]_{(t)} + [B]_{(t)} + [C]_{(t)} = [A]_0 + [B]_0 + [C]_0$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} [A] \\ [B] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 \\ k_1 & -k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [A] \\ [B] \end{pmatrix}$$

Adotamos uma abordagem heurística: tentar

$$(**) \quad [A] = x e^{\lambda t} \qquad [B] = y e^{\lambda t}$$

$c_1, c_2, \lambda = ?$ (a determinar)

Substituindo em $(*)$:

$$x\lambda \cancel{e^{\lambda t}} = -k_1 x \cdot \cancel{e^{\lambda t}}$$

$$y\lambda \cancel{e^{\lambda t}} = k_1 x \cancel{e^{\lambda t}} - k_2 y \cancel{e^{\lambda t}}$$

$$-k_1 \cdot x = \lambda x$$

$$k_1 x - k_2 y = \lambda y$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -k_1 & 0 \\ k_1 & -k_2 \end{pmatrix}}_{=A} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}_{\text{autovetor de } A} = \underbrace{\lambda}_{\text{autovalor de } A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 \\ k_1 & -k_2 \end{pmatrix}$$

matriz triangular: os autovalores são os elementos diagonais

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

$$= \begin{vmatrix} -k_1 - \lambda & 0 \\ k_1 & -k_2 - \lambda \end{vmatrix} = (k_1 + \lambda)(k_2 + \lambda)$$

∴ Os autovalores de A são $-k_1$ e $-k_2$.

Cálculo dos autovetores:

$\boxed{\lambda = -k_1}$ $\quad N(A - \lambda I) = N(A + k_1 I)$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ k_1 & -k_2+k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$k_1 \cdot x + (k_1 - k_2) y = 0 \qquad \begin{matrix} x = k_2 - k_1 \\ y = k_1 \end{matrix}$$

$\begin{pmatrix} k_2 - k_1 \\ k_1 \end{pmatrix}$ é um autovetor associado a $-k_1$

Sai de (**) que:

$$\boxed{\begin{pmatrix} [A] \\ [B] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_2 - k_1 \\ k_1 \end{pmatrix} e^{-k_1 t} \text{ é uma solução de } (*)}$$

$$\boxed{\lambda = -k_2} \qquad N(A + k_2 I)$$

$$\begin{pmatrix} -k_1+k_2 & 0 \\ k_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(-k_1+k_2)x = 0$$

$$\underbrace{k_1}_{>0} x = 0 \Rightarrow x = 0$$

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ é um autovetor associado a $-k_2$

$$\boxed{\begin{pmatrix}[A]\\ [B]\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} e^{-k_2 t} \quad \text{é uma solução de } (*)}$$

Superposição de soluções:

A solução geral do sistema é uma combinação linear das duas soluções encontradas:

$$(+) \quad c_1 \begin{pmatrix}k_2 - k_1\\ k_1\end{pmatrix} e^{-k_1 t} + c_2 \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} e^{-k_2 t} = \begin{pmatrix}[A]\\ [B]\end{pmatrix}$$

CASO $k_1 \neq k_2$

Especificamos condições iniciais sobre os reagentes $[A]_0$, $[B]_0 = [C]_0 = 0$, e obtemos os valores de c_1 e c_2:

$t = 0$:

$$c_1 \begin{pmatrix}k_2 - k_1\\ k_1\end{pmatrix} e^0 + c_2 \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} e^0 = \begin{pmatrix}[A]_0\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} c_1 (k_2 - k_1) = [A]_0 \\ c_1 k_1 + c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \quad c_1 = \frac{[A]_0}{k_2 - k_1} \qquad c_2 = \frac{-[A]_0 k_1}{k_2 - k_1}$$

De (+):

$$[A](t) = [A]_0 e^{-k_1 t}$$

$$[B](t) = \frac{k_1}{k_2-k_1}[A]_0 e^{-k_1 t} - \frac{[A]_0 k_1}{k_2-k_1} e^{-k_2 t}$$

$$= \frac{k_1}{k_2-k_1}[A]_0 \left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right).$$

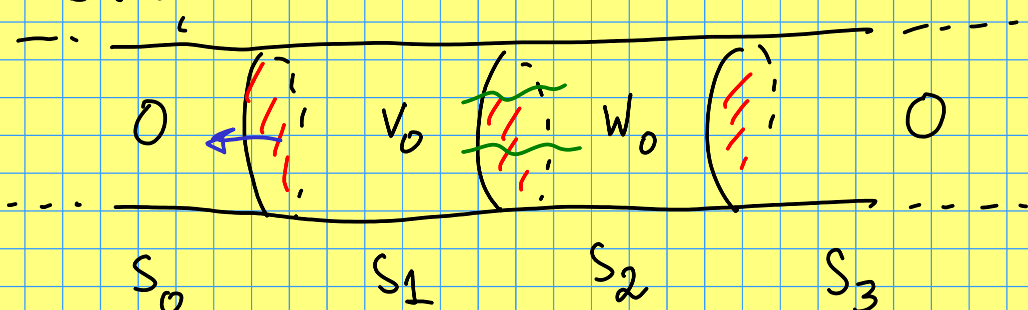
$$[A](t) + [B](t) + [C](t) = [A]_0$$

$$[C](t) = [A]_0 \left(1 - e^{-k_1 t} - \frac{k_1}{k_2-k_1}\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)\right)$$

—||—

Problema de difusão

Situação inicial



A taxa de difusão entre dois segmentos adjacentes é igual à diferença entre (proporcional) as concentrações.

$$\frac{dv}{dt} = (0 - v) + (w - v)$$

$$\frac{dw}{dt} = (v - w) + (0 - w)$$

$$\frac{dv}{dt} = -2v + w \qquad u = \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}$$

$$\frac{dw}{dt} = v - 2w \qquad \frac{du}{dt} = \underbrace{\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}}_{=A} u$$

Cálculo dos autovalores de A:

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} -2-\lambda & 1 \\ 1 & -2-\lambda \end{vmatrix}$$

$$= (2+\lambda)^2 - 1 = 4 + 4\lambda + \lambda^2 - 1 = \lambda^2 + 4\lambda + 3$$

Autovalores: $-1, -3$

Cálculo dos autovetores de A:

$\boxed{\lambda = -1}$ $\qquad N(A + I) = ?$ $\qquad$ Autovetor

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad x = y \qquad \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\boxed{\lambda = -3}$ $\qquad N(A + 3I) = ?$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad y = -x \qquad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

<u>Solução geral</u>

$$(*) \quad u(t) = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-t} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-3t}$$

$t=0$:

$$\begin{pmatrix} v_0 \\ w_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 + c_2 \\ c_1 - c_2 \end{pmatrix} \qquad c_1 = \frac{1}{2}(v_0 + w_0) \qquad c_2 = \frac{1}{2}(v_0 - w_0)$$

(*) $\Downarrow$

$$v(t) = \frac{1}{2}(v_0 + w_0)\, e^{-t} + \frac{1}{2}(v_0 - w_0)\, e^{-3t}$$

$$w(t) = \frac{1}{2}(v_0 + w_0)\, e^{-t} - \frac{1}{2}(v_0 - w_0)\, e^{-3t}$$

$$\frac{v(t)}{w(t)}$$

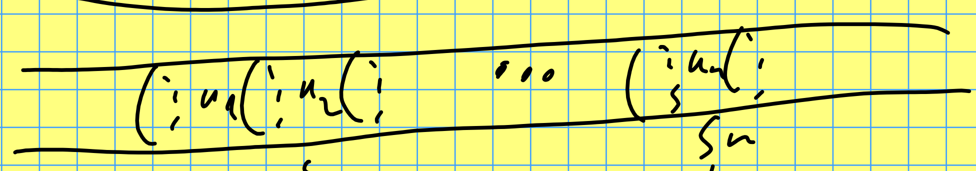
$$\lim_{t\to\infty} \frac{v(t)}{w(t)} = \lim_{t\to\infty} \frac{c_1 e^{-t} + c_2 e^{-3t}}{c_1 e^{-t} - c_2 e^{-3t}} \cdot \frac{e^{t}}{e^{t}}$$

$$= \lim_{t\to\infty} \frac{c_1 + c_2 \cancel{e^{-2t}}^{\to 0}}{c_1 - c_2 \cancel{e^{-2t}}^{\to 0}} \qquad c_1 > 0$$

$$= 1$$

Distribuição uniforme em s_1, s_2

Generalização



n segmentos

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$$

matriz tridiagonal

Aproximação discreta para a equação do calor

$n \to \infty$ $$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$u(t,x)$: temperatura.

t : tempo

x : posição

$f(x)$

$$f'(x) \sim \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$ 1.a diferença

$$f''(x) \sim \frac{\big(f(x+2h) - f(x+h)\big) - \big(f(x+h) - f(x)\big)}{h}$$

$$= \frac{1\,f(x+2h) - 2\,f(x+h) + 1\,f(x)}{h}$$ 2.a diferença