Antonio Gámiz Delgado
Ejercicio 1. Consideramos el siguiente sistema de reacciones químicas:

$$A + B \longrightarrow C$$

donde la velocidad de reacción está estudiada a modo de ejemplo en el vídeo 2.

(a) Vamos a suponer que estamos en un recipiente de volumen constante (lo que equivale en términos de concentraciones a considerar un volumen total de un litro) y partimos de una concentración inicial de 0.8 moles por litro de A y 0.6 de moles por litro de B. Si inicialmente no tenemos nada de producto, determina la cantidad tras 20 segundos y tras mucho tiempo.

Tomamos primero:

- $x(t)$ = cantidad restante de A en el instante t.
- $y(t)$ = cantidad restante de B en el instante t.
- $z(t)$ = cantidad restante de C en el instante t.

Luego $x(0) = 0.8$, $y(0) = 0.6$ y $z(0) = 0$. Recordemos que ecuación de la velocidad de reacción es:

$$V = K[A]^\alpha [B]^\beta \Rightarrow z'(t) = x(t)y(t)^2$$

donde hemos usado los datos del vídeo 2. Ahoar tenemos que calcular mediante reglas de 3, las expresiones de $x(t)$ e $y(t)$.

$$\left.\begin{array}{ccc} A & \longrightarrow & C \\ 0.8 - x(t) & \longrightarrow & z(t) \end{array}\right\} \Rightarrow x(t) = 0.8 - z(t)$$

$$\left.\begin{array}{ccc} B & \longrightarrow & C \\ 0.6 - y(t) & \longrightarrow & z(t) \end{array}\right\} \Rightarrow y(t) = 0.6 - z(t)$$

Ya tenemos nuestra ecuación de velocidad. Igualandola ahora a una función $g(z)$, podemos estudiarla:

$$z'(t) = (0.8 - z(t))(0.6 - z(t))^2 = g(z(t))$$

Como vemos, es un polinomio de grado 3 con 3 raíces pero una de ellas doble. Las raíces son $\alpha_1 = 0.6$ y $\alpha_2 = 0.8$. Tenemos el PVI:

$$\left\{\begin{array}{l} z' = g(z) \\ z(0) = 0 < \alpha_1 = 0.6 \end{array}\right.$$

Como $g \in \mathcal{C}^1$, entonces g es lipschitziana luego el sistema tiene una única solución. Para ver la cantidad de producto tras 20 segundos segundos, simplemente hay que integrar esa ecuación desde $t = 0$ a $t = 20$. Usando un integrador numérico obtenemos que la cantidad de producto es aproximadamente 0.4963 moles.

Para ver la cantidad de producto en $t \longrightarrow +\infty$, tenemos que ver que $z(t)$ tenga límite.

Primero vemos que $z(t) < \alpha_1$ para todo $t \in (\omega_-, \omega_+)$. Tomo $\bar{t} \in (\omega_-, \omega_+)$ con $z(\bar{t}) = \alpha_1$. Pero como α_1 es raíz de $g(z)$, entonces sería la solución constante del sistema $z(t) = \alpha_1$ $\forall t \in (\omega_-, \omega_+)$. Luego tenemos una contradicción y se tiene lo que queríamos ya que $z(0) = 0 < \alpha_1$.

Ahora tenemos que ver que $z'(t) > 0$ $\forall t \in (\omega_-, \omega_+)$. Es fácil de ver ya que $z'(t) = g(z(t)) > 0$ $\forall z \in (-\infty, \alpha_1)$.

Luego hemos visto que $\omega_+ = +\infty$ ya que $z(t)$ es estrictamente creciente y $z(l) < \alpha_1$ $\forall t \in (\omega_-, \omega_+)$. Por tanto, existe $\lim_{t\to+\infty} z(t) = L$. Aplicando ahora el lema visto en teoría, sabemos que existe $t_n \longrightarrow +\infty$ tal que $z'(t_n) \longrightarrow 0$, entonces $z'(t_n) = g(z_n(t_n)) \longrightarrow 0$. Como $z(t_n) \longrightarrow L$ se tiene que $g(z(t_n)) \longrightarrow g(L)$, luego $g(L) = 0$ con $L \leq \alpha_1$. Por tanto, $L = \alpha_1 = 0.6$. Luego tras mucho tiempo, se producen 0.6 moles de producto.

(b) Supongamos que por la naturaleza de la reacción, hace que no se modifique la concentración de B y se diluya a una concentración ambiente 0.2. Partiendo de una concentración de A de 0.8 mol por litro, ¿cómo sería ahora la ecuación diferencial? En este caso calcula la concentración de C en cada momento. ¿En qué momento se acabará el reactivo A?

En este caso tenemos que $y(t) = 0.2$ para todo t. De forma análog al aprtado anterior vemos la expresión de la ecuación diferencial:

$$z'(t) = 0.04(0.8 - z(t)) = 0.032 - 0.04z(t) = g(z(t)), \quad z(0) = 0$$

Esta ecuación es sencilla de resolver, su solución es:

$$z(t) = 0.8\left(1 - e^{-\frac{t}{25}}\right)$$

donde se ha usado la condición inicial para determinar el valor de la constante. Ya tenemos la concentración inical de C en cada momentos.

Esta función g cumple las mismas condiciones que la g del apartado anterior, luego $\lim_{t\to+\infty} z(t) = \alpha_1 = 0.8$ y $z(t) < \alpha_1 = 0.8$ $\forall t \in [0, +\infty)$. Como $x(t) = 0.8 - z(t) \longrightarrow 0$, A se acabará en el infinito, es decir, su concentración de irá diluyendo poco a poco pero no se acabará en tiempo finito.

Ejercicio 2. Sea la siguiente ecuación de ondas:

$$\begin{cases} u_{tt} = u_{xx} + 1, & (t, x) \in [0, \infty) \times [0, 1] \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0, & t \in [0, \infty) \end{cases}$$

(a) Busca una solución independiente de t.

Si no depende de t, entonces se tiene que dar $u_t = 0$, luego:

$$u_{xx} = -1 \Rightarrow u_x = -x + C_1 \Rightarrow u(x) = -\frac{x^2}{2} + C_1 x + C_2$$

Para determinar las contantes simplemente hay que usar las condiciones iniciales, obteniendo:

$$u(x) = \frac{x}{2}(1 - x)$$

(b) Dado $\phi, \psi : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$, demuestra un principio de unicidad de solución de clase 2 para los datos iniciales:

$$\begin{cases} u(0,x) = \phi(x), & x \in [0,1] \\ u_t(0,x) = \psi(x), & x \in [0,1] \end{cases}$$

Por lo menos $\phi \in \mathcal{C}^2[0,1]$ y $\psi \in \mathcal{C}^1[0,1]$. Como $u(t,0) = u(t,1) = 0$ para todo t, entonces se tiene que dar $\phi(0) = \phi(1) = 0$. De igual forma, se da $u_t(t,0) = u_t(t,1) = 0$ para todo t, $\psi(0) = \psi(1) = 0$. Ahora usando que $u_{xx}(0,x) = \phi(x) = u_{tt}(0,x) - 1$ y que $u_{tt}(t,0) = u_{tt}(t,1) = 0$, obtenemos otra condición $\phi''(0) = \phi''(1) = -1$.

Para la unicidad suponemos que existen u_1, u_2 soluciones distintas, luego $v = u_1 - u_2$ también será solución del sistema:

$$\begin{cases} v_{tt} = v_{xx}, & \forall (t,x) \in [0,+\infty) \times [0,1] \\ v(t,0) = v(t,1) = 0, & \forall t \in [t,+\infty) \\ v(0,x) = v_t(0,x) = 0, & \forall x \in [0,1] \end{cases}$$

Como $v_{tt} = v_{xx}$, también se tendrá $v_t v_{tt} - v_t v_{xx} = 0$, e integrando esa expresión:

$$0 = \int_0^1 v_{tt} v_t dx - \int_0^1 v_{xx} v_t dx = \int_0^1 v_{tt} v_t + v_x v_{tx} dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^1 v_t^2 + v_x^2 dx$$

donde en la segunda igualdad hemos usado integración por partes y hemos anulado los términos. Si llamamos ahora a $E(t) = \frac{1}{2} \int_0^1 v_t^2 + v_x^2 dx$, se tiene que $E'(t) = 0$ para todo t, luego debe de ser constante. Pero como $E(0) = 0$, entonces la función es constantemente igual a 0 y se tiene que dar $u_1 = u_2$.

(c) Demuestra que si $\phi, \psi : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$, son de clase 2 y $\phi''(0) = 0$ o $\phi''(1) = 0$, el problema anterior no tiene solución.

- $\phi''(0) = 0$. Como $u(0,x) = \phi(x)$, entonces $u_{xx} = \phi''(x)$. En $x = 0$, eso vale 0, luego usando que $u_{tt} = u_{xx} + 1$ se tiene que $u_{tt}(0,0) = 1$. Pero $u(t,0) = 0$ para todo t, contradicción.
- $\psi''(1) = 0$. Razonamiento análogo al anterior pero tomando $x = 1$.

(d) Busca $\phi, \psi : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$, funciones particulares de clase 2 con $\psi''(0) = 0 = \psi''(1)$ de forma que el problema anterior tenga solución.

En el apartado (a) hemos encontrado la solución, luego podemos usarla.

$$u(0,x) = \frac{x}{2}(1-x) = \phi(x), \quad u_t(t,x) = 0 \Rightarrow 0 = \psi(x) \quad \forall x \in [0,1]$$

Luego se tiene $\phi \in \mathcal{C}^2[0,1]$ y $\psi \in \mathcal{C}^1[0,1]$. Además se cumple que:

$$\psi(0) = \psi(1) = 0, \quad \phi(0) = \phi(1) = 0, \quad \phi''(0) = \phi''(1) = 0, \psi''(0) = \psi''(1) = 0$$

Luego el problema tiene una única solución y es la del apartado (a).