Índice general

Capítulo 1

Ley de acción de masas

Ahora dejamos los puentes y cambiamos a otro tipo de modelos totalmente diferentes. Vamos a hablar de la ley de acción de masas, pero primero vamos a repasar un poco algunas nociones sobre reacciones químicas. Tenemos una serie de productos $A_1, \cdots, A_n$, $B_1, \cdots, B_n$ y una serie de coeficientes que nos indican la concentración de cada producto: $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$, $\beta_1, \cdots, \beta_n$. A estos coeficientes se les llama *coeficientes estequiométricos*. Estos elementos nos dan una reacción química, que expresaremos como:

$$\alpha_1 A_1 + \cdots + \alpha_n A_n \longrightarrow \beta_1 B_1 + \cdots + \beta_n B_n$$

Ejemplo 1.1. La reacción química de la quema de hidrógeno:

$$2H_2 + 0_2 \longrightarrow 2H_2 0$$

Otra diferente:

$$ClH + NaOH \longrightarrow ClNa + H_2 0$$

Esto es una cuestión molecular y trabajar con ellas es bastante complicado. Para solventar ese problema, usamos los *moles*. Un *mol* es la cantidad de una sustancia que contiene tantos átomos como su peso atómico. También usaremos la *concentración de un producto*, $[N]$, que es el igual al número de moles que hay del producto. En la reacción anterior obtendríamos dos moles de agua, combinando dos moles de hidrógeno y un mol de oxígeno. Podemos hablar de concentración de *reactivos* y *productos*: $[A] = \{$ número de moles de reactivo $\}$, $[B] = \{$ número de moles de producto $\}$

Por otro lado, está la denominada *velocidad de reacción*, que es la variación de la concentración a lo largo del tiempo. La teoría nos dice que:

$$\frac{d}{dt}[B] = k[A_1] \cdots [A_n]$$

Ejemplo 1.2. Sean X, Y y Z tre compuestos químicos que se combinan en un producto final F según la reacción:

$$2X + 3Y + 5Z \longrightarrow 5F$$

La velocidad de reacción (moléculas más o menos iguales) se puede suponer proporcional al producto de concentraciones de productos X, Y, Z, según un coeficiente β (velocidad de reacción). Suponemos que $\beta = 0.01$. Si partimos inicalmente de 5 moles de X, 7 moles de Y y 10 moles de Z, plantear un modelo que permita calcular la concentración de cada sustancia en cada instante. ¿Qué pasará tras mucho tiempo?

Básicamente hay que aplicar una regla de 3:

$$\left.\begin{array}{ccc} 2X & \longrightarrow & 5F \\ 5X & \longrightarrow & ? \end{array}\right\} \Rightarrow \text{ se producirían 12.5F}$$

$$\left.\begin{array}{ccc} 3Y & \longrightarrow & 5F \\ 7Y & \longrightarrow & ? = \end{array}\right\} \Rightarrow \text{ se producirían 11.6F}$$

$$\left.\begin{array}{ccc} 5Z & \longrightarrow & 5F \\ 10Z & \longrightarrow & ? = 10 \end{array}\right\} \Rightarrow \text{ se producirían 10F}$$

De aquí, deduzco que se van a producir 10 moles de F, ya que es el mínimo de las 3 reglas que hemos hecho. Ahora tenemos que ver cuanta cantidad queda de los reactivas X e Y al crear 10 moles de F.

$$\left.\begin{array}{ccc} 2X & \longrightarrow & 5F \\ ? & \longrightarrow & 10F \end{array}\right\} \Rightarrow \text{ se gastan 4X}$$

$$\left.\begin{array}{ccc} 3Y & \longrightarrow & 5F \\ ? & \longrightarrow & 10F \end{array}\right\} \Rightarrow \text{ se gastan 6Y}$$

Luego sobran 1 de X, 1 de Y y 0 de Z, y se habrán creado 10 moles de F. Ahora vamos a denotar por $x(t), y(t), z(t), F(t)$ a la concentración de X, Y, Z, F en el instante t respectivamente. En el instante $t = 0$, tendremos las concentraciones iniciales, y en el instante $t = 1$, tendremos las finales (el resultado de las cuentas que hemos hecho antes), es decir:

	$t=0$	$t=1$
$x(t)$	4	1
$y(t)$	7	1
$z(t)$	10	1
$F(t)$	0	1

Si nos fijamos, $5 - x(t), 7 - y(t), 10 - z(t)$ son los restantes de los productos X, Y, Z en el instante t. Es decir, tenemos que la velocidad de reacción de F es:

$$F'(t) = \beta x(t) y(t) z(t)$$

Haciendo otra regla de 3:

$$\left.\begin{array}{ccc} 2X & \longrightarrow & 5F \\ 5 - x(t) & \longrightarrow & F(t) \end{array}\right\} \Rightarrow F(t) = \frac{5(5 - x(t))}{2} \Rightarrow x(t) = 5 - \frac{2F(t)}{5}$$

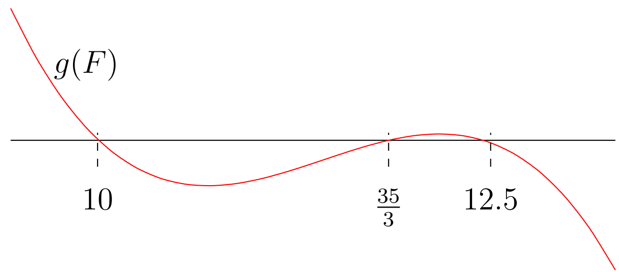
De forma análoga, obtenemos las expresiones de $y(t)$ y $z(t)$:

$$y(t) = 7 - \frac{3F(t)}{5}, \quad z(t) = 10 - F(t)$$

Es decir, la expresión final de la velocidad de reacción sería:

$$F'(t) = 0.01 \left(5 - \frac{2F(t)}{5}\right) \left(7 - \frac{3F(t)}{5}\right) (10 - F(t)), \quad F(0) = 0$$

Si llamamos $g(F) = 0.01 \left(5 - \frac{2F}{5}\right) \left(7 - \frac{3F}{5}\right) (10 - F)$, que tiene raíces $F = 10, 35/3, 12.5$.



Ahora vamos a abstraer un poco el problema para no tener que trabajar con todos los números particulares. Supongamos que tenemos el problema de valores iniciales:

$$\begin{cases} x' = g(x) \\ x(0) = x_0, \quad x_0 < \alpha_1 \end{cases}$$

donde $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, $g(\alpha_1) = 0$, $g'(\alpha_1) < 0$ (para que sea compatible con el dibujo) (**duda**), $g(x) > 0$ si $x \in (-\infty, \alpha_1)$ y α_1 es la primera raíz de g.

Como sabemos, el anterior problema de valores iniciales tiene una solución maximal $x : (w_-, w_+) \longrightarrow \mathbb{R}$, que además es única. Probemos ahora, una serie de propiedades.

- $x(t) < \alpha_1, \text{ si } t \in (w_-, w_+)$

  Tomamos $t^* \in (w_-, w_+)$ con $x(t^*) = \alpha_1$, entonces x sería solución del problema de valores iniciales:

  $$\begin{cases} x' = g(x) \\ x(t^*) = \alpha_1 \end{cases}$$

  cuya solución es la constante, $x(t) = \alpha_1 \ \forall t \in (w_-, w_+)$. (**duda: no entiendo esta demostracion x'd**)

- $x'(t) > 0 \ \forall t \in (w_-, w_+)$

  Usando el punto anterior es fácil, ya que $x'(t) = g(x(t)) > 0$ porque $g(x)$ es positivo para todo x en $(-\infty, \alpha_1)$

- Necesariamente se tiene que $w_+ = +\infty$.

  Si $t \in [0, w_+)$, entonces $x_0 \leq x(t) < \alpha_2$. Ahora podemos usar la teoría de prolongación de soluciones, que nos dice que si tenemos una solución acotada, podemos prolongarla. x además de estar acotada, está lejos del borde.

- $\lim\limits_{t \to +\infty} x(t) = \alpha_1$

  Como $x(t)$ es creciente y acotada, entonces el límite existe, y valdrá $L \in \mathbb{R}$. Evidentemente, $L \leq \alpha_1$. Lo único que tenemos que ver es que $L = \alpha_1$. Para ello, vamos a recordar un resultado general:

Lema 1.3. *Sea* $x : (w_{-}, +\infty) \longrightarrow \mathbb{R} \in \mathcal{C}^1$ *con* $\lim\limits_{t\to+\infty} x(t) = L \in \mathbb{R}$. *Entonces existe una sucesión* $t_n \in (w_{-}, +\infty)$ *tal que* $t_n \longrightarrow +\infty$, *con* $x'(t_n) \longrightarrow m0$.

Demostración. Considerando la diferencia $x(n+1) - x(n)$ y aplicando el teorema del valor medio, nos queda que:

$$x(n+1) - x(n) = x'(t_n)(n+1-n) = x'(t_n)$$

Como $x(n+1) \longrightarrow L \leftarrow x(n)$, $x'(t_n) \longrightarrow 0$. □

Luego al existir el límite anterior, existe también $t_n \longrightarrow +\infty$ tal que $x'(t_n) \longrightarrow 0$, es decir, $g(x(t_n)) \longrightarrow 0$. Pero $g(x(t_n)) \longrightarrow g(L)$, luego $L = \alpha_1$, que es la raíz.

Como α_1 era la primera raíz de g, es decir, $\alpha_1 = 10$, hemos visto que $F(t) \longrightarrow 10$. Pero ojo, simplemente tiende, nunca llegamos a crear los 10 moles enteros, es una asíntota que no se alcanza en tiempo finito. Además $F(t) < 10$ $\forall t \in (0, +\infty)$.

Usando la cota sobre $F(t)$ y recordando la expresión de $x(t)$, llegamos a que:

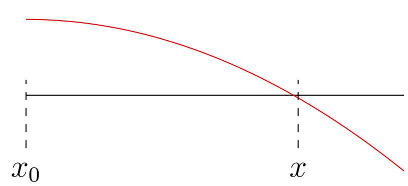
$$x(t) = 5 - \frac{2F(t)}{5} > 5 - 4 = 1 \Rightarrow x(t) \longrightarrow 1$$

Igual con la $y(t)$ y $z(t)$:

$$y(t) = 7 - \frac{3F(t)}{5} > 7 - 6 = 1 \Rightarrow y(t) \longrightarrow 1$$

$$z(t) = 10 - F(t) \Rightarrow z(t) \longrightarrow 0$$

Volvemos otra vez a la parte abstracta. Sea $g \in \mathcal{C}^2$ de la forma:



cumpliendo $g'(\alpha) = \delta < 0$. Entonces vamos a tener que (lo que he visto antes):

$$\lim_{t\to+\infty} x(t) = \alpha$$

Ahora vamos a decir un poquito más. Vamos a probar que:

$$\lim_{t\to+\infty} \frac{x(t) - \alpha}{e^{\delta t}} = -L \in (-\infty, 0)$$

Eso quiere decir que la convergencia al valor α es exponencial, es decir, los residuos $(x(t), y(t), z(t)$no sólo tienden a 10, sino que además lo hacen exponencialmente.

Demostración. Calculemos el siguiente límite:

$$\lim_{t\to+\infty}\frac{x'(t)}{x(t)-\alpha}=\lim_{g(x(t))\to+\infty}x(t)-\alpha=\lim_{x\to\alpha}\frac{g(x)}{x-\alpha}=\delta$$

Eso nos dice que si tenemos $\beta(t)=\frac{x'(t)}{x(t)-\alpha}$, entonces $\beta(t)\longrightarrow\delta$. Por supuesto, β es continua y se verifica la ecuación diferencial:

$$x'(t)=\beta(t)(x(t)-\alpha)$$

Usando que $x(t)=\alpha$ es una solución particular de esa ecuación y $x(t)=ce^{-\int_0^t\beta(t)dt}$ es una solución de la homogénea, podemos escribir la solución general:

$$x(t)=\alpha-ce^{-\int_0^t\beta(t)dt}$$

donde hemos añadido la solución de la homogénea directamente restando porque sabemos que se tiene que cumplir $x(t)<\alpha$. Diviendo todo por $e^{\delta t}$:

$$\frac{x(t)-\alpha}{e^{\delta t}}=\frac{-ce^{-\int_0^t\beta(t)dt}}{e^{\delta t}}=-ce^{-\int_0^t\beta(t)dt-\delta t}=-ce^{-\int_0^t(\beta(s)-\delta)ds}$$

Ahora ya lo único que queda por ver es que $\beta(s)-\delta$ sea integrable en $(0,+\infty)$. Para eso:

$$\beta(t)-\delta=\frac{x'(t)}{x(t)-\alpha}-\delta=\frac{g(x(t))-\delta(x(t)-\alpha)}{x(t)-\alpha}=\frac{g(x)-g(\alpha)-g'(\alpha)(x-\alpha)}{x-\alpha}\leq O(x-\alpha)$$

donde para la acotación por algo de orden $x-\alpha$ hemos usado que $g\in\mathcal{C}^2$, luego:

$$\beta(t)-\delta\leq O(x(t)-\alpha)$$

¿Y por qué $x(t)$ es integrable? Debido a que:

$$x(t)-\alpha=\frac{x(t)-\alpha}{g(x(t))}g(x(t))$$

y ambos términos están acotados (ya que $g(x(t))=x'(t)$ y $x'(t)$ es integrable). □

Este es el único modelo que vamos a desarrollar con este nivel de detalle, los siguientes serán más escuetos.