Ejercicios de química y ecuación de ondas

David Cabezas Berrido

1. Ejercicio de química

Consideramos la siguiente reacción química: $A + B \to C$

Ecuación de velocidad de reacción: $v = k[A]^\alpha [B]^\beta$. En este caso tenemos $k = 1$, $\alpha = 1$, $\beta = 2$.

Vamos a denotar como $a(t)$ a la concentración del reactivo A en el instante t. Análogamente, denotaremos $b(t)$ y $c(t)$ a las concentraciones de los reactivos B y C respectivamente, en el instante t. Las concentraciones se miden en moles por litro (mol/L).

Suponemos que estamos en un recipiente de volumen constante 1 litro, por lo que las concentraciones de cada reactivo (a, b y c) equivalen al número de moles.

a) Partimos de 0.8 mol/L de A, 0.6 mol/L de B y nada de producto (C), esto se traduce en que $a(0) = 0.8$, $b(0) = 0.6$ y $c(0) = 0$.

Primero se nos pide determinar la ecuación diferencial para la cantidad de producto (c) y usar un integrador numérico de ecuaciones diferenciales para calcular la cantidad de producto tras 20 segundos ($c(20)$) y tras mucho tiempo $\left(\lim_{t\to+\infty} c(t)\right)$.

Intuitivamente:
En la reacción, se gastan un mol de A y un mol de B para producir un mol de C. Hay concentración de A suficiente para producir 0.8 moles de C y concentración de B para producir 0.6 moles de C. Por tanto B es el reactivo limitante, que se agotará por completo, produciéndose 0.6 moles de C y sobrando 0.2 moles de A. Veamos esto de forma analítica.

Partimos de la ecuación de velocidad media de reacción, que estudia la variación de concentración de reactivo en un incremento de tiempo.

$$-\frac{a(t) - a(t_0)}{t - t_0} = -\frac{b(t) - b(t_0)}{t - t_0} = \frac{c(t) - c(t_0)}{t - t_0} \tag{1}$$

Haciendo el incremento de tiempo tender a 0, obtenemos la derivada. Por tanto $-a'(t) = -b'(t) = c'(t)$. Y es a esta cantidad a la que llamaremos $v(t) = c'(t)$, que sabemos que cumple $v(t) = a(t)b(t)^2$.

Por otra parte, tomando en (1) $t_0 = 0$ y simplificando, obtenemos

$$-\left(a(t) - 0.8\right) = -(b(t) - 0.6) = c(t) - 0 \quad \Longrightarrow \quad a(t) = 0.8 - c(t), \quad b(t) = 0.6 - c(t) \tag{2}$$

y sustituyendo en la ecuación de la velocidad de reacción, obtenemos la ecuación diferencial que modela la cantidad de producto

$$c'(t) = \big(0.8 - c(t)\big)\big(0.6 - c(t)\big)^2 \; ; \qquad c(0) = 0 \tag{3}$$

Para estimar $c(20)$, usaré el método de Runge-Kutta de orden 4, tomando 100000 puntos en el intervalo $[0, 20]$. Obtengo

$$c(20) \approx 0.4956 \quad \text{moles}$$

Podemos calcular analíticamente $\lim_{t\to+\infty} c(t)$.

La ecuación diferencial (3) es $c' = f(c) = \big(0.8 - c\big)\big(0.6 - c\big)^2$, es autónoma y claramente tiene a $c = 0.8$ y $c = 0.6$ como puntos de quilibrio. Podemos estudiar su comportamiento en el infinito bajo la condición inicial $c(0) = 0$.

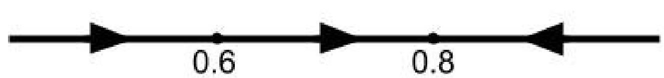
f es de esta forma

(a) Gráfica de f

(b) Zoom de la gráfica

Figura 1: $f(c) = \big(0.8 - c\big)\big(0.6 - c\big)^2$

Estudiando el signo de f (polinomio de grado 3 con coeficiente líder negativo), obtenemos el diagrama de fases:



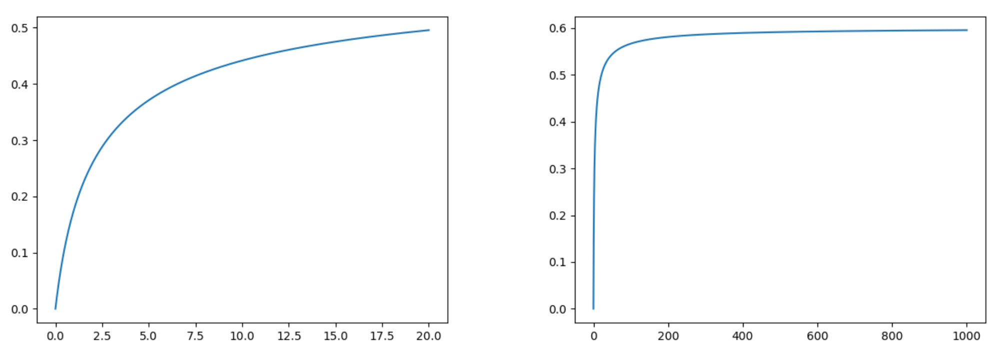
(a) Instancia correspondiente al 0

Figura 2: Diagrama de fases y puntos de equilibrio de f

Como partimos de $c(0) = 0$, estamos en la región de atracción del punto de equilibrio $c = 0.6$, por tanto podemos concluir que

$$\lim_{t \to +\infty} c(t) = 0.6$$

Corroboramos nuestra afirmación utilizando el método de Runge-Kutta de orden 4, tomando 1000000 de puntos en los intervalos $[0, 1000]$ y $[0, 10000]$ obtenemos $c(1000) \approx 0.59544$, $c(10000) \approx 0.59951$.



(a) Entre 0 y 20

(b) Entre 0 y 1000

Figura 3: Aproximación de c por Runge-Kutta

b) Ahora B está presente en una concentración ambiente constante $0.2\ mol/L$, por lo que B no se agota. Por tanto ahora A es el reactivo limitante, luego se alcanzará una concentración de $0.8\ mol/L$ del producto.

Tenemos que $b(t) = 0.2\ mol/L$ constante, pero la ecuación (2) sigue relacionando las concentraciones de los compuestos A y C correctamente: $a(t) = 0.8 - c(t)$.

De forma que la ecuación diferencial de la velocidad de reacción queda ahora

$$c'(t) = v(t) = a(t)b(t)^2 = \big(0.8 - c(t)\big)0.2^2\ ; \qquad c(0) = 0 \tag{4}$$

Resolvemos por variables separadas

$$-\log(0.8 - c) = \int \frac{dc}{0.8 - c} = 0.2^2 t + q \implies c(t) = 0.8 - q' e^{-0.04t}$$

Imponiendo $c(0) = 0$ ajustamos la constante de integración, obteniendo la concentración de C en cada instante

$$c(t) = 0.8 - 0.8e^{-0.04t}$$

Tras mucho tiempo ($c \to +\infty$), se alcanzará una concentración de $0.8\ mol/L$ de C como intuíamos.
De (2) despejamos la concentración de A

$$a(t) = 0.8 - c(t) = 0.8e^{-0.04t}$$

y podemos comprobar que esta concentración disminuye cada vez más, pero el reactivo A no se llega a agotarse en tiempo finito.

2. Ejercicio de ecuación de ondas

Consideramos la ecuación

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

a) Buscamos una solución independiente de t, llamémosla $f(x)$.

Tenemos $f_{tt} = 0$ y $f_{xx} = f''$, por tanto la equación diferencial queda $f''(x) = -1 \quad \forall x \in [0,1]$. Por tanto f será una parábola con coeficiente líder $\frac{-1}{2}$.

$$f(x) = \frac{-1}{2}x^2 + ax + b \qquad \forall x \in [0,1] \tag{2}$$

Imponemos las condiciones $f(0) = 0$ y $f(1) = 0$ para obtener $b = 0$ y $\frac{-1}{2} + a = 0$, luego sustituyendo en (2) obtenemos que

$$f(x) = \frac{-1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x \qquad \forall x \in [0,1] \tag{3}$$

es una solución independiente de t.

b) $\phi, \psi : [0,1] \to \mathbb{R}$. Queremos probar unicidad de solución de clase 2 para la ecuación (1) con los datos iniciales

$$\begin{cases} u(0,x) = \phi(x) & \forall x \in [0,1], \\ u_t(0,x) = \psi(x) & \forall x \in [0,1], \end{cases} \tag{4}$$

Sean $u, v \in C^2([0,+\infty) \times [0,1])$ soluciones de (1) cumpliendo (4). Probaré que $w = u - v \in C^2([0,+\infty) \times [0,1])$ es constante 0, con lo que tendremos $u = v$ y por tanto unicidad.

De que u y v satisfacen (1) deducimos

$$w_{tt} - w_{xx} = u_{tt} - v_{tt} - u_{xx} + v_{xx} = 1 - 1 = 0$$

y

$$w(t,0) = u(t,0) - v(t,0) = 0 - 0 = 0$$
$$w(t,1) = u(t,1) - v(t,1) = 0 - 0 = 0$$

Mientras que de u y v cumpliendo (4) obtenemos

$$w(0,x) = u(0,x) - v(0,x) = \phi(x) - \phi(x) = 0$$

$$w_t(0,x) = u_t(0,x) - v_t(0,x) = \psi(x) - \psi(x) = 0$$

Tomando en el **Teorema 4.1** tanto φ como ψ la función constante 0 (que trivialmente cumple todas las hipótesis del teorema) obtenemos que el problema

$$\begin{cases} u_{tt} - u_{xx} = 0, & \text{en } [0,+\infty) \times [0,1] \\ u(0,x) = 0, & \text{en } [0,1] \\ u_t(0,x) = 0, & \text{en } [0,1] \\ u(t,0) = u(t,1) = 0, & \text{en } [0,+\infty) \end{cases} \tag{5}$$

tiene solución única (de clase 2).

Hemos comprobado que w es solución del problema y trivialmente la solución constante 0 también lo es, por tanto deberá suceder $w = 0$ y $u = v$ como queríamos.

c) Ahora debemos probar que si $\phi, \psi : [0,1] \to \mathbb{R}$ son clase 2 y ocurre $\phi''(0) = 0$ o $\phi''(1) = 0$, no existe solución de (1) cumpliendo las condiciones (4).

Llegaremos a un absurdo suponiendo que $u \in C^2([0,+\infty) \times [0,1])$ cumple (1,4).

De la segunda condición de (1) obtenemos derivando respecto a t dos veces que $u_{tt}(t,0) = u_{tt}(t,1) = 0$ $\forall t \in [0,+\infty)$, por tanto $u_{tt}(0,0) = u_{tt}(0,1) = 0$.

Ahora sustituimos en la ecuación para obtener que $u_{xx}(0,0) = u_{xx}(0,1) = -1$.

Por otra parte, derivando respecto de x dos veces en la primera igualdad de (4) obtenemos $u_{xx}(0,x) = \phi''(x) \quad \forall x \in [0,1]$, por lo que $-1 = u_{xx}(0,0) = \phi''(0)$, $-1 = u_{xx}(0,1) = \phi''(1)$. Contradiciendo la hipótesis.

d) Tenemos que encontrar $\phi, \psi : [0,1] \to \mathbb{R}$ de clase 2 con $\psi''(0) = \psi''(1) = 0$ para las cuales el problema (1,4) tenga solución.

Sabemos que la función

$$f(x) = \frac{-1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x \quad \forall x \in [0,1]$$

satisface (1).

Basta tomar ϕ y ψ de clase 2 de forma que f cumpla las condiciones (4) para esas ϕ y ψ y además $\psi''(0) = \psi''(1) = 0$. Esto se consigue fácilmente tomando $\phi(x) = f(x)$ y $\psi(x) = 0$ para todo x en $[0,1]$. Claramente son de clase 2 y f resuelve el problema con esas condiciones iniciales.