

INSTITUTO FEDERAL DE  
EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
GOIÁS

**IVANA MARIA FERNANDES MACHADO**

**MATEMÁTICA APLICADA: O USO DAS EQUAÇÕES  
DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS EM MODELOS  
MATEMÁTICOS DE SISTEMAS FÍSICOS E BIO-QUÍMICOS.**

**ANÁPOLIS, FEVEREIRO**

**2016**

**IVANA MARIA FERNANDES MACHADO**

**MATEMÁTICA APLICADA: O USO DAS EQUAÇÕES  
DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS NA MODELAGEM  
MATEMÁTICA DE SISTEMAS FÍSICOS E BIO-QUÍMICOS.**

Trabalho de Conclusão do Curso de Licenciatura em  
Química apresentado à Coordenação de  
Química do Instituto Federal de Educação,  
Ciência e Tecnologia de Goiás.

Orientador: Prof. Msc. Tháris Silva Souza.

Co-Orientador: Prof. Dr. Júlio César Saavedra Vasquez.

**ANÁPOLIS, FEVEREIRO**

**2016**

IVANA MARIA FERNANDES MACHADO

**MATEMÁTICA APLICADA: O USO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS  
ORDINÁRIAS EM MODELOS MATEMÁTICOS DE SISTEMAS FÍSICOS E BIO-  
QUÍMICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
Departamento de Química do Instituto Federal de Goiás  
– IFG – Campus Anápolis, como parte das exigências  
do curso de Licenciatura em Química para obtenção do  
título de licenciado em Química.

Área de concentração: Matemática Aplicada à Química.

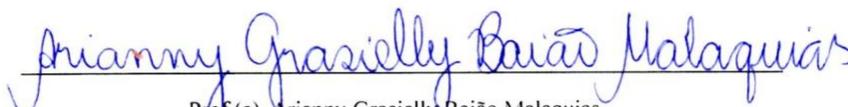
Aprovada em 25 de fevereiro de 2015



Prof. Orientador: Tháris Souza Silva  
IFG – Campus Anápolis



Prof.(a). Lilian Tatiane Ferreira de Melo Camargo  
IFG – Campus Anápolis



Prof.(a). Arianny Grasielly Baião Malaquias  
IFG – Campus Anápolis

Anápolis - Goiás - Brasil  
Fevereiro - 2016

## FICHA CATALOGRÁFICA

M149 Machado, Ivana Maria Fernandes  
Matemática aplicada: o uso das equações diferenciais ordinárias em modelos matemáticos de sistemas físicos e bio-químicos. / Ivana Maria Fernandes Machado. -- Anápolis: IFG, 2016.  
58 p. : il.  
Inclui CD- Rom.

Orientador: Prof. Me. Thársis Silva Souza

Trabalho de Conclusão do Curso de Licenciatura Plena em Química, Instituto Federal de Goiás, Campus Anápolis, 2016.

1. Matemática aplicada. 2. Sistemas químicos. 3. Equações diferenciais ordinárias - EDO.

I. Título

CDD 540.7

Código 003.2016

Ficha catalográfica elaborada pelo bibliotecário Helio Lino Delfino,  
CRB-1/3031.

Biblioteca Clarice Lispector, Campus Anápolis  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás

## DEDICATÓRIA

Ao meu querido Pai que me apoiou, amou e deu coragem em todos os momentos. A quem amo sem que palavras possam descrever.

Á minha melhor amiga, minha Mãe, que me inspira todos os dias a ser e fazer o *meu* melhor.

Á meus queridos irmãos, de sangue ou coração, que foram meus companheiros, conselheiros e amigos. Que me deram motivos para me esforçar cada dia mais.

Ao Pedro pela amizade que transcende os laços de sangue, e que também ama a Química. Ao meu pequeno Josias por me fazer uma pessoa melhor com seu belo sorriso e à Aline minha querida companheira de quarto.

Aos professores que me acompanharam em cada etapa da vida, e àqueles que me ensinaram mesmo sem o dever formal.

Ao meu querido Lucas, que com carinho e paciência me acompanha. E a quem amo de coração.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a meu Deus e pai Jeová pela saúde, cuidado, oportunidade, sobretudo pelo amor.

Agradeço a minha família que se esforçou em fazer dessa uma caminhada feliz e de sucesso.

Agradeço ao Instituto Federal de Goiás pela oportunidade, a todo seu corpo docente que acompanhou com dedicação essa minha caminhada e aos técnicos administrativos que com presteza e agilidade tanto colaboraram.

Agradeço o auxílio financeiro concedido pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Nível Superior- CAPES, pelo projeto PIBID, que apoiou essa conclusão do curso. E aos meus queridos orientadores, supervisores e colegas.

Agradeço em especial ao meu orientador pela paciência, dedicação, atenção e confiança desde as matérias que com ele cursei até a conclusão desse trabalho.

Agradeço a Giovanna S. Spagnol, que me fez desacelerar e aproveitar cada pedacinho do curso de uma maneira muito mais feliz, e a quem tenho um imenso carinho.

Agradeço ao companheirismo e apoio de queridos colegas.

- Se enxerguei mais longe [...] é porque me apoiei em ombros de gigantes. Sir. Isaac Newton (1642- 1727) (BOYER, 1974).

## RESUMO

A modelagem de muitos problemas do mundo real, utilizando as equações diferenciais ordinárias (EDO), é uma ferramenta importante que tem grande potencial e pode descrever inúmeros fenômenos. Seguindo este contexto, o presente trabalho objetiva abordar aplicações de modelos matemáticos que usam as EDO em sistemas químicos em algumas condições específicas. A metodologia usada envolveu estudo de literatura padrão na área, tanto de EDO como de sistemas químicos, com o objetivo de tornar clara a relação matemática-Química do sistema, fomentando material útil para um ensino menos superficial de cálculo em cursos de Química. Os resultados indicam que o meio matemático utilizado é de grande emprego em sistemas químicos na determinação de fatores complexos.

Palavras-chave: Matemática Aplicada, Sistemas Químicos, Equações diferenciais Ordinárias (E.D.O.).

## Sumário

<b>1. INTRODUÇÃO.</b> .....	<b>09</b>
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.</b> .....	<b>11</b>
2.1. Aplicação Matemática nos Cursos de Licenciatura Em Química.....	11
2.2. Introdução as Equações Diferenciais Ordinárias. ....	12
2.3. Equações Diferenciais de Primeira Ordem. ....	15
2.4. Equações Diferenciais de Segunda Ordem. ....	18
2.5. Equações Diferenciais de Ordens mais Altas. ....	24
2.6. Introdução a Análise Qualitativa das Equações Diferencias. ....	26
<b>3. APLICAÇÕES DE EDO EM FENÔMENOS QUÍMICOS, FÍSICOS E BIOLÓGICOS.</b> .....	<b>30</b>
3.1. APLICAÇÕES EDO DE PRIMEIRA ORDEM. ....	30
3.1.1. Exemplo-1 Concentrações em uma mistura. ....	30
3.1.2. Exemplo-2 Concentração de resíduos químicos em um açude.....	32
3.1.3. Exemplo-3 Cinética Química: Lei de velocidade. ....	34
3.1.4. Exemplo-4 Decaimento radioativo: Carbono 14. ....	37
3.2. APLICAÇÃO PARA EDO DE SEGUNDA ORDEM. ....	39
3.2.1. Exemplo- Pendulo.....	39
3.3. APLICAÇÃO PARA EDO ‘QUALITATIVA’. ....	44
3.3.1. Exemplo- Catalise enzimática. ....	44
3.4. CONTEXTUALIZAÇÃO E FINALIZAÇÃO .....	51
3.4.1. Aplicação de sistemas harmônicos simples no ensino da mecânica quântica pela Equação de Schrödinger. ....	51
3.4.2. A equação de Michaelis-Menten. ....	52
<b>CONCLUSÕES.</b> .....	<b>54</b>
<b>REFERÊNCIAS.</b> .....	<b>55</b>

## 1. INTRODUÇÃO

O que é mais importante ensinar a um químico, decorar uma equação pronta ou dominar o aparato matemático que a originou? Independente das muitas discussões que traz esse tema no âmbito educacional algo é uníssono entre os pesquisadores do ensino de Química, a aprendizagem significativa e motivadora é um desafio. (CARVALHO, 2011; FERNANDES, 2014; FERNANDES e SALDANHA, 2014).

Entre as muitas dificuldades no processo de ensino-aprendizagem pesquisastes mencionado que a abstração da disciplina de cálculo se mostra um grande desafio, e maior ainda é a sua aplicação em outras disciplinas. FERNANDES, 2014; FERNANDES e SALDANHA, 2014).

Conforme Bassanezi (2002), as ciências naturais, como a Química, tem o desenvolvimento de muitos conceitos respaldados pelo formalismo matemático. Para esse mesmo autor a modelagem matemática é o processo de atacar um fenômeno real por teorias matemáticas resultando em um modelo que o descreve. A modelagem envolvida neste processo é caracterizada pela multidisciplinaridade, tornando tênue a distância entre a matemática e outras ciências como a Química, a Física e a Biologia.

Em cursos superiores de Química a matemática aplicada a sistemas químicos permite métodos mais contextualizados ao curso e por sua vez a diminuição da distância entre a ciência central do curso, a Química, e a matemática envolvida na validação de seus sistemas. (BASSANEZI, 2002; FERNANDES, 2014; FERNANDES e SALDANHA, 2014)

O estudo da interação entre a matéria e a energia, a ciência Química, depende de conhecer as propriedades físico-Químicas de muitos componentes. Com base nas variações sofridas por esses padrões físico-químicos se torna possível determinar por que tipo de fenômenos, Físico ou Químico, e em que proporção ocorrem. (ATKINS e DE PAULA, 2012).

Essas propriedades podem ser relacionadas como equações segundo as variações, ou taxas, em que ocorrem durante um determinado tempo. O formalismo matemático que as descrevem são ferramentas do cálculo, essas taxas de variação são derivadas. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Quando as tendências de um sistema são regidas por relações em que os coeficientes envolvem taxas como variáveis o aparato matemático envolvido é um pouco mais

rebuscado. Em muitos casos compreender as teorias envolvendo as equações diferenciais ordinárias, EDO, se torna imprescindível. (LUZ e CORRÊA, 2001).

Historicamente o desenvolvimento matemático esteve extremamente interessado em desbravar essa área. Entre os nomes de peso relacionados ao início desse desenvolvimento estão Isaac Newton (1642- 1727) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716) durante o século XVII. Os problemas por eles desbravados foram além da álgebra, às aplicações de Newton generalizando as ideias de Galileu Galilei (1564-1642) vieram a ser chamadas de “princípios do movimento de Newton” e Leibniz por sua vez formulou junto a Christian Huygens (1629-1695) a noção de energia cinética. (BOYER, 1974).

Uma parte da matemática aplicada se interessa em compreender o comportamento de uma equação diferencial. Segundo Boyer (1974), com tal objetivo durante os séculos XIX e XX muitos matemáticos detiveram suas pesquisas a investigações teóricas de existência e unicidade e estudos de equações diferenciais mais complexas. Algumas equações resistiram ainda, e graças aos séculos da computação (sec. XX e XXI), muitos métodos complexos de aproximação e integração numérica foram desenvolvidos. Muitos problemas ainda perduram e fazem das equações diferenciais um tema fértil. (LUZ e CORRÊA, 2001).

O desenvolvimento da área de modelagem de sistemas com uso de equações diferenciais ordinárias é importantíssimo para compreensão de fenômenos físicos, biológicos e químicos. E ainda se mostra um campo produtivo para pesquisa. (MURRAY, 1993)

Esta pesquisa tem por objetivo exemplificar aplicações do uso de EDO em sistemas químicos, que em geral matematicamente são apenas superficialmente trabalhados no ensino superior. Os sistemas aqui propostos advêm de um estudo da literatura padrão na área, com o objetivo de tornar clara a relação matemática-Química do sistema, fomentando material útil ao ensino de cálculo em cursos de Química. (ABREU e LOPES-CASTILHO, 2012; PEIXOTO, 1978).

O texto abrange uma revisão teórica do tema de EDO, e aplicações fundamentadas nas teorias Químicas pertinentes aos diferentes sistemas químicos analisados.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Apresentam-se aqui alguns elementos básicos imprescindíveis para compreender as demais partes deste trabalho. Contém alguns detalhamentos teóricos relevantes quanto às características individuais das EDO com os principais teoremas a elas relacionados e às leis naturais aplicadas às ciências Químicas.

### 2.1. APLICAÇÃO MATEMÁTICA NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

Em pesquisas recentes se observa que os cursos de Química enfrentam uma grande barreira no progresso de seus alunos em várias disciplinas que envolvem aplicações matemáticas. Por exemplo, a pesquisa de Fernandes e Saldanha (2014) detectou que 67,8% dos alunos entrevistados têm dificuldade com aplicações matemáticas no curso sendo ainda que 70,97% afirmam que Cálculo é a disciplina mais dificultosa.

Para Santos e Borges (1993, p. 4-5) isso ocorre pela defasagem no ensino de matemática básica, o que é refletido nos resultados no ensino superior. E para Nery, Liegel e Fernandez (2007, p.588) a forma como são abordadas as matérias de cálculo trazem ainda mais dificuldades. O autor justifica que isso se dá devido ao caráter inter-disciplinar da Química, que é composta com uma gama de conteúdos inter-relacionados a outras disciplinas. Entretanto, infelizmente dificilmente os alunos compreendem de maneira significativa essa interdependência.

O estudo da Química exige que os discentes possuam habilidades de domínio das ferramentas matemáticas. Segundo Moraes e Teixeira Junior (2014) muitas vezes os discentes são alvo de um ensino mecânico e sobrecarregado de conteúdos informativos que eles não conseguem relacionar de maneira significativa ao contexto de disciplinas específicas do curso.

Nesse ponto os autores concluem que esse desafio exige uma evidente necessidade de repensar a postura do docente, as ementas das disciplinas e até mesmo os livros didáticos adotados, além da função desempenhada pelos conteúdos. (MORAIS E TEIXEIRA JUNIOR, p. 205, 2014).

Quanto a essa necessária modificação muitos docentes acreditam o fato de docentes matemáticos e químicos do mesmo curso de graduação trabalham em separado contribui em muito para essas dificuldades. Na pesquisa de Moraes e Teixeira Junior (2014)

fica clara a necessidade de aumentar a contextualização, e nisto a matemática aplicada é uma grande aliada. Entretanto os docentes matemáticos do curso alegam não dominarem os conteúdos Químicos para vencer essa barreira em contra partida os Químicos recebem alunos que não conseguem relacionar as duas disciplinas.

Uma alternativa mencionada por um dos entrevistados seriam trabalhar em matérias optativas e cursos de extensão de maneira contextualizada com o apoio dos docentes das duas áreas.

Devido à grande aplicabilidade das E.D.O. nas disciplinas químicas este trabalho traz uma série de aplicações possíveis para os conteúdos previstos em ementas de cursos de Licenciatura em Química. Apesar de E.D.O. nem sempre ocuparem lugar nessas ementas o contato do aluno ocorrerá, mesmo que sem a devida percepção deste, nas disciplinas Físico-Químicas e Bioquímicas. Os exemplos mais complexos poderiam fazer parte de matérias optativas e cursos de extensão.

## **2.2. INTRODUÇÃO AS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS**

Muitos fenômenos químicos, físicos e biológicos possuem resultados modelados por equações e funções, por exemplo, na Física as funções de primeiro e segundo grau modelando o espaço, velocidade e aceleração em função do tempo no Movimento Uniformemente Variado (MVU); na Química as equações polinomiais modelando a concentração de reagentes de uma reação. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

O objeto de estudo nas ciências naturais são fenômenos, que não raro, apresentam tendências regidas por relações de variáveis de estado com parâmetros estabelecidos. Muitos fenômenos são modelados com equações envolvendo coeficientes que correspondem principalmente a taxas de variação e acabam por exigir um pouco mais das funções matemáticas que os exemplos anteriores. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Do mesmo modo para Bassanezi (2004), durante o processo de modelagem as quantidades, ou variáveis de estado, podem ser obtidas como equações das variações. Quando estas variações são instantâneas, e as oscilações do fenômeno se dão continuamente as equações matemáticas são chamadas por Equações Diferenciais e quando são constituídas de uma gama de pontos das variações, utilizando cálculo de médias, são definidas como Equações de Diferenças. A compreensão do comportamento de ambas possibilita seu uso em modelagens prevendo eventos do fenômeno modelado.

Para Boyce e Diprima (2002) os chamados princípios ou leis são muitas vezes modelados como proporções, ou relações, que envolvem a taxa segundo a ocorrência. Essas relações, no sentido de igualdade, são equações. E a partir do conceito de derivada em sua principal utilização, como à taxa de variação, há a possibilidade de modelar diversas situações físicas e Químicas com um tipo especial de equações as Equações Diferenciais Ordinárias (EDO).

As equações diferenciais podem ainda ser classificadas segundo suas variáveis. Segundo a descrição de Boyce e Diprima (2002), essa classificação diz respeito à quantidade de variáveis envolvidas. Quando uma única variável está relacionada à derivação se designa como Equação Diferencial Ordinária, ao passo que o envolvimento de duas ou mais variáveis com a derivação resulta nas chamadas Equações Diferenciais Parciais.

O mesmo autor ainda acresce a essas designações o ordenamento segundo o número de funções desconhecidas. Na ocorrência de envolvimento da determinação de uma única função o uso de uma única equação é suficiente, enquanto o envolvimento da determinação de mais de uma função faz-se necessário um sistema de equações. E possível ainda à descrição segundo o termo ordem dependendo da maior ordem de diferenciação apresentada.

E mencionada ainda nesta mesma obra que há referência a Equações como Lineares ou Não-Lineares designação que exprime a condição de uma função linear de variáveis do tipo:  $y, y', \dots, y(n)$  e não linear para funções de variáveis como  $yy'$ .

Segundo a definição de Beltrão (2009) para o termo “cálculo”, na visão matemática, são as ferramentas de análise das variações ocorridas em fenômenos com alguma natureza física, ou palpável. Sendo que o desenvolvimento do cálculo esteve intimamente relacionado ao avanço de pesquisas das chamadas ciências naturais, especialmente a Física. Os nomes relacionados ao início do desenvolvimento do cálculo são Isaac Newton (1642-1727) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716). [Boyer (1974)].

Muitas vezes no estudo de equações, de forma mais básica, são propostos problemas onde se faz necessário definir um ou mais valores reais que satisfaça a relação entre as incógnitas da equação. Não muito longe disso no estudo de uma equação diferencial o objetivo é definir uma função tal que ela, e suas derivadas, satisfaçam as relações da equação original, tal como afirma Machado (1988, p. 153),

De maneira geral, uma *equação diferencial* é uma pergunta do tipo: “Qual a função cuja derivada satisfaz a seguinte relação?” Ou seja, uma equação diferencial é uma equação (no sentido de igualdade envolvendo uma incógnita) onde a incógnita é uma função, sendo que as informações disponíveis para a determinação da função desconhecida envolvem sua derivada.

Para possibilitar a análise de uma equação diferencial é importante compreender suas tendências. As tendências das E.D. são análises qualitativas por comparações de possibilidades perante a proximidade ou não proximidade há um ponto de equilíbrio, ou ponto crítico, do sistema. Em busca da exatidão se constroem sistemas mais complexos e robustos que são mais exigentes do aparato matemático. A análise de tendências é muito útil, pois há uma dificuldade em analisar com maior exatidão explicita sistemas de construção mais simples, devido às aproximações necessárias. Boyce e Diprina (2002) destacam que há “sempre há uma troca entre precisão e simplicidade” (Boyce e Diprina, 2002, p. 10). Ainda é possível dizer que a coexistência entre estas é algo muito raro e difícil, portanto é necessário contrabalançar as perdas e a utilidade qualitativa do modelo.

Nesse sentido os campos de direções são muito úteis, pois possibilitam analisar as tendências de uma equação diferencial de maneira bem clara. Campos de direção são meios de analisar uma tendência sem achar uma solução determinada. Usando da definição de derivada, encontrada em Boyce e DIPRIMA (2002):

**Definição 1-** *Se  $y = y(x)$  é uma função derivável em um intervalo aberto  $I = (a, b)$  e seja  $x_0 \in I$ , então  $y'(x_0)$  que apresenta a inclinação da reta tangente  $t$  ao gráfico de  $y = y(x)$ , no ponto  $(x_0, y'(x_0))$ .*

Sendo assim quando não é obtida a solução da diferencial há como recurso usar um diagrama auxiliador. O campo de direções da equação diferencial é um gráfico da função  $g$  de forma que para cada ponto  $Q = (x, y)$  do domínio,  $g$  apresenta uma direção de qualquer solução  $y$  que passe pelo ponto  $Q = (x, y)$ . Direção essa representada por um segmento de reta cujo coeficiente angular é o valor da função  $g$  naquele ponto  $Q = (x, y)$  e cuja origem do segmento é o ponto  $Q = (x, y)$ .<sup>[7]</sup>

## **DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS**

Como mencionado às equações diferenciais ordinárias podem ser classificadas segundo a ordem da sua mais alta diferencial. Elas têm a forma geral:

$$y^{(n)} = f(t, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}). \quad (01)$$

Reside nessa formulação o questionamento quanto às garantias de haver solução ou mesmo a quantidade de possíveis soluções. A fórmula geral não propicia tal garantia, mas há teoremas que fomentam tal necessidade. Em especial para a modelagem estes teoremas tem valor imprescindível, pois permite a generalização dos princípios, ou leis, modelados. Entretanto obter explicitamente essas soluções é extremamente raro no âmbito das E. D. O., e depende exclusivamente das características de cada equação. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

O estudo de E.D.O. pode ser organizado segundo a ordem da equação desde as mais baixas em direção às de ordens superior ou mesmo segundo as dimensões da função solução. Ou seja, levando em conta a ordem da derivada  $y^{(n)}$  envolvida na E.D.O. e a dimensão da variável  $y$ , que pode estar em  $\mathbb{R}$  ou no  $\mathbb{R}^n$ . (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Porquanto segue um estudo mais aprofundado das E.D.O. segundo seus graus.

### 2.3. Equações Diferenciais Lineares de Primeira Ordem

A forma geral de uma E.D.O. de primeira ordem é dada por,

$$f(x, y, y') = 0. \quad (02)$$

Onde a solução é qualquer função  $y = \phi(t)$  que satisfaça essa equação em todo  $t$  num dado intervalo. Encontrar um método geral para resolvê-las, entretanto não é tão simples. Essas mesmas podem ser dispostas em subclasses que exigem métodos próprios.

Se a função  $f$ , respeitando a equação (02), depender linearmente da variável dependente  $y$  pode ser chamada de **equação linear de primeira ordem**. Que pode ser descrita pela equação geral;

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = g(t) \quad (03)$$

Sendo que  $p$  e  $g$  são funções da variável independente  $t$ , quando  $g(t)$  é nula nomeia-se como **equação linear homogênea**. Quando  $p$  e  $g$  são constantes pode-se utilizar um método chamado de **integração direta** desde que  $a \neq 0$  e  $y \neq b/a$  (BOYCE e DIPRIMA, 2002). Reescrevendo assim a equação (03) como;

$$\frac{dy}{dt} = -ay + b \quad (04)$$

$$\frac{dy/dt}{\left[y - \left(\frac{b}{a}\right)\right]} = -a \quad (05)$$

Após a integração;

$$\ln \left[ y - \left( \frac{b}{a} \right) \right] = -at + c \quad (06)$$

Obtendo a solução geral para a equação (04)

$$y = (b/a) + ce^{-at} \quad (07)$$

Esse é um método muito útil. Por exemplo, a função que modela o movimento de um objeto em queda segue uma estrutura semelhante. Mas esse método não é geral para uma equação como (03), para essa há um método derivado de Leibniz. Esse método se baseia em multiplicar uma função  $\mu(t)$  que será o **fator integrante**. Ao descobri-lo se torna possível responder a função cuja derivada satisfaz a relação da E.D.O. modelada.

O teorema fundamental a seguir, encontrado em BOYCE e DIPRIMA (2002) denota algo importante para as E.D.O., à existência e unicidade, e se aplica especificamente as equações lineares.

**Teorema 1- (Existência e Unicidade)** *Sejam  $p$  e  $g$  funções contínuas definida num intervalo aberto  $I$   $a < t < b$  contendo o ponto  $t = t_0$ , então existe uma única função  $y = \phi(t)$  que satisfaz a equação diferencial;*

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = g(t). \quad (03)$$

*Para cada  $y(t_0) = y_0$  onde  $y_0$  problema de valor inicial (P.V.I.).*

Esse teorema diz que uma E.D.O. dada pela Eq. (03) e uma condição inicial  $y(t_0) = y_0$ , existe uma única função  $\phi(t)$  tal que  $\frac{d\phi(t)}{dt} + p(t)\phi(t) = g(t)$  e inicial  $\phi(t_0) = y_0$  será a única solução.

Um método de encontrar soluções de E.D.O. de primeira ordem, já mencionado, consiste na multiplicação de um fator  $\mu(t)$ , chamado de **fator integrante** na equação (03).

Neste caso,

$$\frac{dy}{dt} \mu(t) + p(t)y \mu(t) = g(t)\mu(t) \quad (08)$$

Com isso busca-se uma função  $\mu(t)$  tal que a primeira parte da equação (08) possa ser  $[\mu(t)y]'$ , ou seja,

$$\frac{dy}{dt} \mu(t) + p(t)y \mu(t) = [\mu(t)y]' = \frac{d\mu(t)}{dt} y + \mu(t) \frac{dy}{dt}. \quad (09)$$

Essa equação propiciará a equação;

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = p(t) \mu(t), \quad (10)$$

Que por integração direta gera,

$$\mu(t) = c \cdot e^{\int p(t)dt} \quad (11)$$

Onde a constante  $c$  da Eq. (10) pode ser desconsiderada por ser a mesma que aparece em ambos os lados da igualdade da Eq (08).

Nestas condições a Eq (08) fica da forma,

$$[\mu(t) \cdot y'] = g(t) \cdot \mu(t) \quad (12)$$

Que pode ser facilmente integrada, e em seguida isolar a função  $y$ . A seguir um exemplo que demonstra a utiliza este método.

Considerando o P.V.I.  $y' + 2y = t$ ;  $y_0 = 1$ ;

i. Multiplicação por um fator integrante  $\mu(t)$ ,

$$y' \mu(t) + 2y\mu(t) = t\mu(t) \quad (13)$$

ii. Conforme a Eq. 02,

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = 2 \mu(t) \quad (14)$$

$$\int \frac{d}{dt} \ln \mu(t) = \int 2 dt \quad (15)$$

iii. Por esse processo isola-se o fator integrante,

$$\mu(t) = e^{2t+c} \quad (16)$$

iv. Substituindo-o conforme a Eq. 12, que permite isolar  $y$ ,

$$e^{2t} \cdot y' = te^{2t} \quad (17)$$

$$\int y' = \int te^{-2t} dt \quad (18)$$

$$y = -\frac{1}{4}e^{-2t}(2t + 1) + c \quad (19)$$

v. Substituindo a condição inicial,  $y_0 = 1$ , se obtém a constante  $c$ ,

$$1 = -\frac{1}{4}e^{-2 \cdot 0}(2 \cdot 0 + 1) + c,$$

$$1 = 1 + c$$

$$c = 0, \quad (20)$$

Chegando assim a solução da E.D.O. dada,

$$y = -\frac{1}{4}e^{-2t}(2t + 1). \quad (21)$$

Esse tópico trouxe uma revisão dos conceitos básicos e mais necessários de E.D.O. de primeira ordem. O método do fator integrante mencionado e o teorema de existência e unicidade são pontos importantes que permitiram compreender os aspectos mais complexos, e gerais, das E.D.O. de ordens mais altas.

#### 2.4. Equações Diferenciais Lineares de Segunda Ordem

A forma geral de uma E.D.O. de segunda ordem é dada,

$$\frac{d^2y}{dt^2} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right), \quad (22)$$

Quando  $f$  é uma função similar a equação (03) está é designada **linear**. Sendo este o caso de  $f$  ser linear em  $y$  e  $y'$  e ter que  $g$ ,  $p$  e  $q$  como funções contínuas da variável  $t$  e independentes de  $y$ . Deste modo temos a equação (23);

$$f\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right) = g(t) - p(t)\frac{dy}{dt} - q(t)y, \quad (23)$$

Muitas vezes também encontrada na forma,

$$P(t)y'' + Q(t)y' + R(t)y = G(t), \quad (22)$$

com um par de condições iniciais tais como:

$$y(t_0)=y_0; y'(t_0)=y'_0, \quad (24)$$

onde são dados valores numéricos a  $y_0$  e  $y'_0$ , tem-se um problema de valor inicial.

Similar ao **Teorema 1** de unicidade e existência pra E.D.O. de primeira ordem o teorema a seguir relaciona o resultado teórico fundamental para P.V.I. das E.D.O. lineares de segunda ordem.

O problema de valor inicial para uma E.D.O. de segunda ordem é tal que:

- Resolva:  $a_2(x) \frac{d^2}{dx^2} + a_1(x) \frac{d^1}{dx^1} + a_0(x)y = f(x)$
- Satisfazendo:  $y(t_0)=y_0$  e  $y'(t_0)=y'_0$

Sendo que o resultado é igual para equações não-homogêneas e homogêneas e pode ser encontrado em BOYCE e DIPRIMA (2002) e a prova pode ser observada em CODDINTON (1961).

**Teorema 2- (Existência e Unicidade de soluções)** *Sejam  $p$ ,  $q$  e  $g$  funções contínuas definida num aberto  $I$ . Então existe uma única função  $y=\phi(t)$  que satisfaz esse problema, e a solução existe em todo o intervalo  $I$ ;*

$$y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (25)$$

para o problema de valor inicial (P.V.I.)  $y(t_0)=y_0$  e  $y'(t_0)=y'_0$ .

Esse teorema traz três pontos essenciais:

- 1] O problema de valor inicial *tem* uma solução; ou seja, *existe* uma solução;
- 2] Esta solução é única;
- 3] A solução  $\phi$  está definida *em todo o intervalo  $I$* , neste todos os coeficientes são contínuos e, ao menos, duas vezes diferenciáveis.

- **Soluções de Equações Diferenciais Lineares de Segunda Ordem.**

Para que a E.D.O. de segunda ordem seja dita *homogênea* função  $g(t)$  tem de valer zero para todo  $t$ . Sendo porquanto esta equação muito conhecida como o termo não-homogêneo. Para as equações lineares vale o princípio da superposição, sendo assim no caso de se ter várias soluções a combinação linear entre elas também é uma solução. Em relação à solução das homogêneas têm-se as seguintes definições e teoremas.

Sejam as funções A, B e C constantes tal que,

$$ay'' + by' + cy = 0 \quad (26)$$

lhe é atribuída a terminologia *autônoma*, uma vez que independe da variável  $t$ .

Serão agora analisadas as soluções, e métodos, para essas características das E.D.O. de segunda ordem;

• **Solução Geral para as E. D. O. Lineares Homogêneas.**

**Teorema 3- (Princípio da Superposição):** Se  $y_1$  e  $y_2$  são soluções da equação diferencial,

$$a_2(x) \frac{d^2}{dx^2} + a_1(x) \frac{d^1}{dx^1} + a_0(x)y = 0, \quad (27)$$

então a combinação linear  $c_1y_1 + c_2y_2$  é solução para quaisquer valores das constantes  $c_1$  e  $c_2$ . (BOYCE E DIPRIMA, 2002).

Quando duas funções são LD e LI e o Wronskiano da seguinte maneira;

**Definição 2:**

(i) Duas funções  $\varphi_1, \varphi_2: (\alpha, \beta) \rightarrow R$  são linearmente dependentes (L.D) se existe uma constante  $k$  tal que  $\varphi_2(x) = k \varphi_1(x), \forall x \in (\alpha, \beta)$ .

(ii) Duas funções  $\varphi_1, \varphi_2: (\alpha, \beta) \rightarrow R$  são linearmente independentes (L.I) se a condição  $\alpha_1\varphi_1(x) + \alpha_2\varphi_2(x) = 0 \forall x \in (\alpha, \beta)$  a implicar que  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ .

**Definição 3:**

Dadas duas funções diferenciáveis  $\varphi_1, \varphi_2: (\alpha, \beta) \rightarrow R$ , o determinante

$$W[\varphi_1, \varphi_2] = \begin{vmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 \\ \varphi_1' & \varphi_2' \end{vmatrix} \quad (28)$$

é chamado o Wronskiano das funções  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$ .

O **Teorema 3** demonstra portanto que por base de apenas um par de soluções de  $y''(x) + py'(x) + q(x)y = 0$ , é possível elaborar uma família de soluções duplamente infinitas.

**Teorema 4: (Solução Geral)**(encontrado em LUZ e CORRÊA, 2001)

Se  $y_1$  e  $y_2$  são duas soluções particulares da equação linear homogênea

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = 0, \quad (29)$$

num intervalo  $(\alpha, \beta)$ , e se num ponto  $x_0 \in (\alpha, \beta)$ , o Wronskiano das duas soluções é diferente de zero, então o Wronskiano será diferente de zero em qualquer outro ponto no intervalo  $(\alpha, \beta)$  e as soluções serão linearmente independentes no intervalo.

**Teorema 5.**(encontrado em LUZ e CORREA, 2001) Sejam  $\varphi_1$  e  $\varphi_2: (\alpha, \beta)$  duas soluções L.I de  $y'' + p(x)y' + q(x)y = 0$ . Então qualquer solução  $\varphi$  para a equação é da forma

$$\varphi = \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2 \quad (30)$$

com  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  constantes escolhidas convenientemente.

**Observação:** Pelos teoremas da existência e unicidade e o da superposição conclui-se que toda E.D.O. de segunda ordem homogêneas tem duas soluções linearmente independentes (L.I.).

• **Soluções para as E. D. O. Lineares Homogêneas com Coeficientes Constantes.**

Nas E.D.O. lineares homogêneas as mais simples são as com coeficientes constantes (a,b,c) tal qual:

$$ay'' + by' + cy = 0 ; \quad (26)$$

Uma base de soluções é um par de funções soluções  $y_1$  e  $y_2$ , que são linearmente independentes em I. Quanto às soluções há o teorema a seguir encontrado em Luz e Correia, 2001.

**Teorema 6.** Se  $y_1$  e  $y_2$  são soluções de  $ay'' + by' + cy = 0$ , linearmente independentes em I então, toda solução  $y = \phi(x)$  é uma combinação linear de  $y_1$  e  $y_2$ , isto é

$$y = \phi(x) = C_1y_1 + C_2y_2. \quad (31)$$

**Prova:** O objetivo é mostrar que a equação (31) e a forma geral de qualquer solução de  $y''(x) + py'(x) + q(x)y = \theta$ . Seja  $y = \phi(x)$  uma solução de  $y''(x) + py'(x) + q(x)y = \theta$  e seja  $x = x_0$  um ponto do intervalo I para o qual  $W(y_1, y_2)(x_0) \neq 0$ ; Suponha-se ainda que

$$\psi(x_0) = \psi_0 ; \psi'(x_0) = \psi'_0. \quad (32)$$

Procure-se provar então que existem constantes  $C_1$  e  $C_2$  tais que a solução  $y = \phi(x) = C_1y_1 + C_2y_2$  satisfaz as mesmas condições iniciais  $\psi(x_0) = \psi_0 ; \psi'(x_0) = \psi'_0$  de  $\psi$  e assim,  $\psi \equiv \phi$  pelo Teorema 2 (T. E. U). Para que isto aconteça deve-se ter:

$$C_1y_1(x_0) + C_2y_2(x_0) = \psi_0 \quad (33)$$

$$C_1y_1'(x_0) + C_2y_2'(x_0) = \psi'_0 \quad (34)$$

Esse sistema nas incógnitas  $C_1$  e  $C_2$  tem solução desde que

$$\begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ \frac{dy_1}{dx} & \frac{dy_2}{dx} \end{vmatrix} (x_0) = W(y_1, y_2)(x_0) \neq 0 \quad (35)$$

Saindo de que a E.D.O. de primeira ordem  $y'(x) - y(x) = 0$  tem solução  $y = e^{at}$  e supondo que uma solução similar tal que  $y = e^{rt}$  com  $r \in \mathbb{R}$ , segundo encontrado em BOYCE e DIPRIMA (2002), sendo  $r$  o padrão a ser definido. Tem-se que  $y' = re^{rt}$  e  $y'' = r^2e^{rt}$ . Substituindo em (26) obtém-se;

$$(ar^2 + br + c)e^{rt} = 0 \quad (36)$$

Sendo que  $e^{rt} \neq 0$ , com  $ar^2 + br + c = 0$  chamada de **equação característica**. Que por ser uma equação polinomial de segunda ordem tem duas raízes que podem dependendo do valor do discriminante  $\Delta = b^2 - 4ac$ , as raízes do polinômio característico, e o modelo de combinação linear de equações para solução, podem ser:

- Reais distintas se  $\Delta = b^2 - 4ac > 0$ ; com solução:

$$y_{(t)} = C_1 e^{r_1 t} + C_2 e^{r_2 t}; \quad (37)$$

- Reais iguais se  $\Delta = b^2 - 4ac = 0$ ; com solução:

$$y_{(t)} = \phi(x) = e^{rt}; \quad (38)$$

- Complexas conjugadas se  $\Delta = b^2 - 4ac < 0$ :

$$y_{(t)} = \phi(x) = e^{\alpha t} [c_1 \cos(\beta t) + c_2 \sin(\beta t)], \text{ onde } r = \alpha \pm i\beta. \quad (39)$$

**Observação:** Existem ainda outros casos particulares não autônomos em que é possível obter soluções explícitas, entretanto para as aplicações à frente a parte homogênea é sempre autônoma.

### • Solução Geral da E. D. O Linear Não-Homogênea com Coeficientes Constantes.

Partindo da definição de uma E.D.O. homogênea é possível observar que as não-homogêneas tem um comportamento definido segundo suas partes. Um por sua parte homogênea e outro pela parte a torna não homogênea, do coeficiente de não homogeneidade.

Quanto a isso é possível encontrar o seguinte teorema encontrado em Boyce e DIPRIMA (2002),

**Teorema 7:** Se  $Y_1$  e  $Y_2$  são duas soluções da equação não-homogênea

$$L[y] = y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (40)$$

então sua diferença entre  $Y_1$  e  $Y_2$  é uma solução da equação homogênea associada, com  $g(t) = 0$ . Se além disso,  $y_1$  e  $y_2$  formam um conjunto de soluções para a equação associada, então

$$c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) = Y_1(t) - Y_2(t), \quad (41)$$

Onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes determinadas.

Então se tem que a solução geral da equação não homogênea segue o teorema a seguir; disponível na mesma obra anteriormente mencionada;

$$L[y] = y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (40)$$

**Teorema 8:** *A solução geral da referida equação pode ser escrita tal que,*

$$y = \phi(t) = c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) + Y(t), \quad (42)$$

Onde  $Y_1$  e  $Y_2$  formam um conjunto fundamental de soluções da equação homogênea associada,  $c_1$  e  $c_2$  são constantes arbitrárias e  $Y$  é alguma solução específica da equação não homogênea. (BOYCE e DIPRIMA, 2002)

Das proposições destes teoremas entende-se que para solucionar a equação não homogênea,

$$L[y] = y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (40)$$

faz-se necessário encontrar a solução de  $c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t)$  que é chamada de solução complementar e denotada por  $y_c(t)$ . Também se necessita encontrar uma única solução  $Y(t)$  da equação não-homogênea, que é por sua vez chamada de solução particular. E por último se deve somar estes resultados.

As proposições para encontrar a solução complementar são as mesmas para uma equação homogênea, como as do tópico anterior. Dois métodos são necessários compreender para encontrar a solução particular, são estes o método dos coeficientes indeterminados e o método da variação dos parâmetros. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

O **método dos coeficientes indeterminados** consiste na proposição de uma hipótese inicial sobre a forma da solução particular, mas com coeficientes não especificados. A hipótese é substituída na equação,

$$L[y] = y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (40)$$

e se busca determinar os coeficientes. Se houver sucesso tem-se uma solução da equação (40), e se denota que se pode usar essa solução particular. Do contrário se tem de formular uma nova hipótese, pois o insucesso não demonstra a inexistência de solução para a equação. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Este método é extremamente útil devido a sua simplicidade, entretanto é limitado. Depende de a equação homogênea associada ter termos constantes e o termo não-homogêneo vai pertencer a uma classe restrita de funções, geralmente polinômios, funções exponenciais, senos e co-senos. (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Já o **método de variação dos parâmetros**, que é derivado dos estudos de cálculo de variações de Lagrange (1736-1813), complementa bem o método anterior. Sua maior vantagem é a generalidade, entretanto muitas das integrais necessárias envolvendo o coeficiente não-homogêneo trazem grandes dificuldades. Quanto a esse método se tem enunciado o seguinte teorema, encontrado em Boyce e Diprima, 2002.

**Teorema 9-** *Se as funções  $p$ ,  $q$  e  $g$  são contínuas em um intervalo aberto  $I$  e suas funções  $y_1$  e  $y_2$  são soluções linearmente independentes da equação homogênea,*

$$y'' + p(t)y' + q(t)y = 0 \quad (29)$$

*associada à equação não- homogênea*

$$y'' + p(t)y' + q(t)y = g(t) \quad (43)$$

*então uma solução particular da equação não- homogênea é*

$$Y(t) = -y_1 \int \frac{y_2 g(s)}{W(y_1, y_2)(s)} d(s) + qy_2 \int \frac{y_1 g(s)}{W(y_1, y_2)(s)} d(s) \quad (44)$$

*onde  $t_0$  é qualquer ponto em  $I$  escolhido convenientemente,*

*A solução geral é*

$$y = c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) + Y(t), \quad (45)$$

*conforme o teorema 8.*

Esse subtema trouxe elementos básicos imprescindíveis para a compreensão do tema de E.D.O.. como o princípio da superposição, os métodos de solução mencionados para encontrar as soluções da parte homogênea e os de coeficientes indeterminados e método de variação do parâmetros para as não-homogêneas.

## 2.4 Equações Diferenciais Lineares de Ordem Mais Altas

As equações diferenciais lineares de ordem mais altas (ordem  $n$ ) têm, segundo Boyce e Diprima (2002), a metodologia e a estrutura teórica compatível diretamente com a de segunda ordem. Todos os elementos de desenvolvimento de equações diferenciais de segunda ordem como: princípio da superposição; métodos para encontrar as soluções da parte homogênea; método dos coeficientes indeterminados; método de variação dos parâmetros. Tudo vale para as equações diferenciais de ordem mais alta, variando o número de soluções independentes de acordo com a ordem da equação.

A forma geral de uma equação desse tipo é;

$$p_0(t) \frac{d^n y}{dt^n} + p_1(t) \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + p_{n-1}(t) \frac{dy}{dt} + p_n(t)y = g(t) \quad (46)$$

É mais difícil perceber diretamente eventos naturais que podem ser expressos em ordens superiores a dois devido, principalmente a dificuldade geométrica de “enxergar” as derivadas de ordem maior que dois. Há eventos naturais que são expressos em ordens superiores a dois e os estudar permite uma melhor compreensão das tendências, pois quando expressos em E.D.O. mais simples, aqueles com soluções explícitas, dificilmente possibilitariam.

Como mencionado anteriormente, em casos que não é obtida a solução da diferencial é possível recorrer a um diagrama auxiliador. Cada um dos segmento dereta tem em seu coeficiente angular o valor da função naquele ponto. Um gráfico como esse quando tem uma malha relativamente fina pode permitir uma boa visão da tendência de comportamento da função, uma visão qualitativa.

## 2.5 Introdução a Análise Qualitativa das Equações Diferencias

Equações diferenciais ordinárias, como as anteriores, são funções envolvendo derivadas com uma ou mais variáveis. Com isso todas as características aplicadas às derivadas são aplicadas as E.D.O..

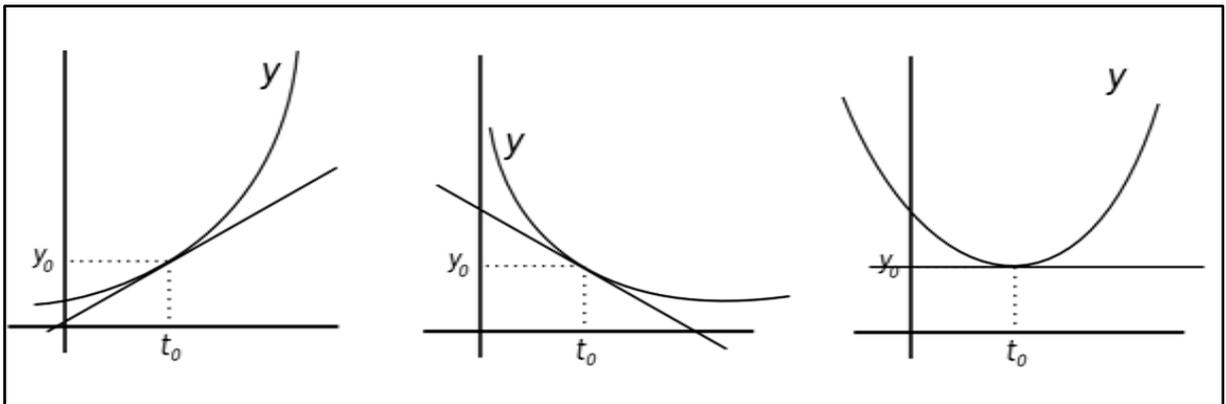
Se  $y = y(x)$  é uma função  $Y: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$ , seja  $t_0 \in \mathcal{R}$  no domínio da função  $y$ . Diretamente da derivada como taxa de variação se tem que:

- a. Se  $\frac{dy}{dt}(t_0) > 0$ ,  $y$  é crescente em  $t_0$ .

- b. Se  $\frac{dy}{dt}(t_0) < 0$ ,  $y$  é decrescente em  $t_0$ .
- c. Se  $\frac{dy}{dt}(t_0) = 0$ ,  $y$  não é decrescente nem é crescente em  $t_0$ .

Geometricamente, pensando em  $\frac{dy}{dt}(t_0)$  como a taxa de variação, ou seja, como o coeficiente angular da reta que passa no ponto  $(t_0, y_0)$  e é tangente a  $y$  em  $t_0$  se tem que;

**Figura 1:** Gráfico- Da função  $y(t)$ , e retas que a tangencia nos pontos  $(t_0, y_0)$



Com isso dada uma equação diferencial qualquer pode-se buscar as características da variável onde a função cresce, decresce ou está em equilíbrio. Como no exemplo a seguir:

$$\frac{dy}{dt} = 4 - 2y \quad (47)$$

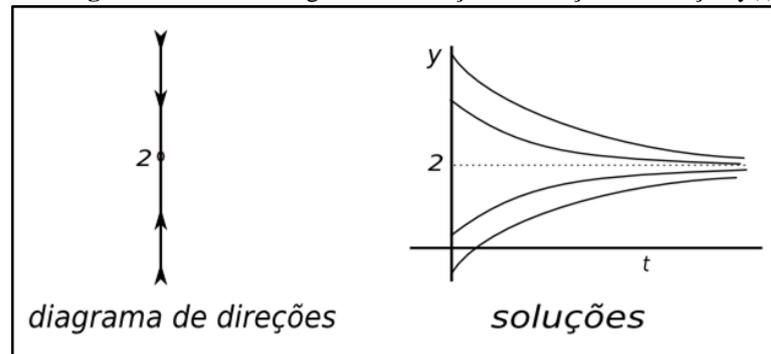
Analisando o sinal dessa equação se tem;

- a. Se  $y > 2$ , então  $\frac{dy}{dt} < 0$  a função  $y$  decresce.
- b. Se  $y < 2$ , então  $\frac{dy}{dt} > 0$  a função  $y$  cresce.

Se  $y = 2$ , então  $\frac{dy}{dt} = 0$ , sendo assim  $y = 2$ , e está é uma solução de equilíbrio.

Geometricamente se tem;

**Figura 2:** Gráfico-Diagrama de direções e soluções da função  $y(t)$ .



Isso denota que toda solução em que  $y(0) < 2$  tende a crescer para atingir o valor 2 e toda solução começando em  $y(0) > 2$  tende a decrescer para atingir o valor 2. Se  $y(0) = 2$  se tem a solução trivial constante ou solução de equilíbrio.

Muitos fenômenos ocorrem com a existência de muitos fatores interagindo entre si. Esses casos, não raro, são modelados com E.D.O.. com varias variáveis.

Formando um sistema de equações, como mencionado no capítulo 2 e seção 2.1.

Observando um sistema de equações de duas variáveis e duas equações, para análise das taxas de crescimento e descimento de soluções, tal que;

$$\frac{dx}{dt} = x - y \quad (48)$$

$$\frac{dy}{dt} = x + y \quad (49)$$

Para compreender seu comportamento se deve analisar as variações no ambiente do plano  $(x, y)$  como varáveis.

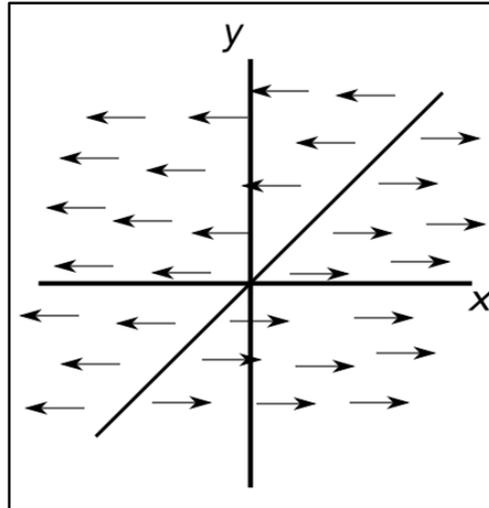
**1º caso:** Analisando  $\frac{dx}{dt}$ ;

$$\frac{dx}{dt} = 0 \rightarrow x - y = 0 \rightarrow x = y \quad (50)$$

$$\frac{dx}{dt} > 0 \rightarrow x - y > 0 \rightarrow x > y \quad (51)$$

$$\frac{dx}{dt} < 0 \rightarrow x - y < 0 \rightarrow x < y \quad (52)$$

e geometricamente;

**Figura 3:**Diagrama de Direção  $dx/dt$ .

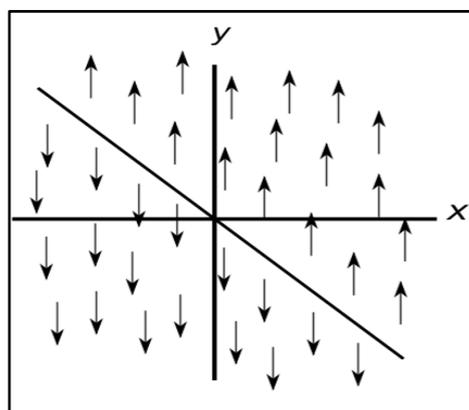
**2º caso:** Analisando  $\frac{dy}{dt}$ ;

$$\frac{dy}{dt} = 0 \rightarrow x + y = 0 \rightarrow y = -x \quad (53)$$

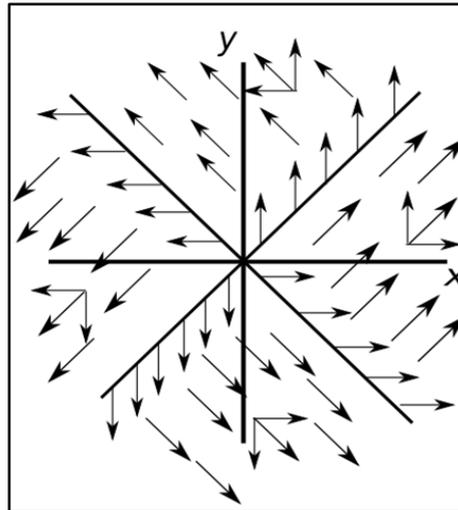
$$\frac{dy}{dt} > 0 \rightarrow x + y > 0 \rightarrow y > -x \quad (54)$$

$$\frac{dy}{dt} < 0 \rightarrow x + y < 0 \rightarrow y < -x \quad (55)$$

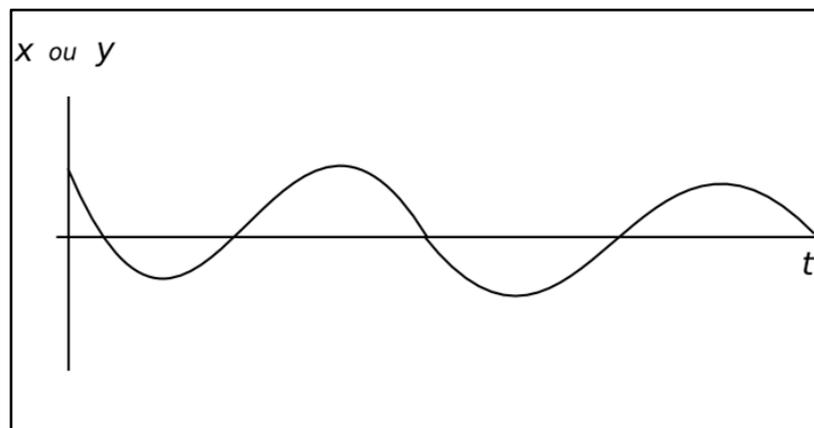
e geometricamente;

**Figura 4:**Diagrama de Direção  $dy/dt$ .

Unindo-os se tem geometricamente o “campo de vetor”;

**Figura 5** :Diagrama de Direção.

É esperado então que a solução  $y(t)$  ou  $x(t)$  faça trajetórias circulares, da forma da figura abaixo.

**Figura 6**: Gráfico- soluções em trajetórias circulares.

De fato não se atinge a clareza das soluções  $x(t)$  e  $y(t)$  por esta análise de direções, mas há uma noção de como deve se comportar cada uma das soluções pelo comportamento qualitativo.

O campo da análise qualitativa das equações diferenciais é muito vasto, mas aqui se limita a exemplificação dessas análise que demonstram o caminho para o exemplo de catálise enzimática.

### 3. APLICAÇÕES DE E.D.O.. EM FENÔMENOS QUÍMICOS, FÍSICOS E BIOLÓGICOS.

A modelagem, segundo já definido, exige a formulação de um modelo matemático que descreva um evento da melhor forma possível com o uso das ferramentas matemáticas disponíveis. Ao trabalho de análise que se origina num modelo matemático em direção ao evento que este descreve define-se como ‘Aplicação Matemática’. Dizendo então que “uma situação do mundo real que pode ser atacada por meio da matemática é chamada uma aplicação matemática” (APPLICATIONS, 2002, p. 5).

Muitos são os exemplos de aplicação matemática nas áreas físico-Químicas e bioquímicas. Compreender satisfatoriamente estes fenômenos e suas variáveis exige dominar a modelagem envolvida. Os exemplos a seguir são a reunião de alguns modelos matemáticos já conhecidos, que usam as E.D.O. em sua formulação, e algumas aplicações físico-Químicas e bioquímicas possíveis.

#### 3.1. APLICAÇÕES DE E.D.O. DE PRIMEIRA ORDEM

Neste tópico incluem exemplos de aplicações das E.D.O. de primeira ordem e algumas considerações analíticas.

##### 3.2.1 Exemplo 01- Concentração em uma Misturas<sup>1</sup>

Um tanque contém 100 galões (cerca de 455 litros) de água e 50 onças (cerca de 1,42 kg) de sal. Água contendo uma concentração de sal de  $\frac{1}{4} (1 + \frac{1}{2} \sin t)$  oz/gal entra no tanque a uma taxa de 2 galões por minuto e a mistura no tanque sai á mesma taxa. Denotando por  $x$  a massa de sal (em onças) na vasilha, e o tempo (em minutos) por  $t$ .

A razão (instantânea) da variação de  $x$  com relação a  $t$ ,  $\frac{dx}{dt}$ , é igual a razão da variação da quantidade de sal que entra na vasilha com relação ao tempo, menos a razão da variação da quantidade de sal que sai.

$$\frac{dx}{dt} = \{2 [\frac{1}{4} (1 + \frac{1}{2} \sin t)]\} - \left[2 \left(\frac{x}{100}\right)\right] \quad (56)$$

$$\frac{dx}{dt} = \left\{ \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \sin t \right) \right] - \left( \frac{x}{50} \right) \right\} \quad (57)$$

<sup>1</sup> Esse exemplo hipotético segue a linha de exemplos semelhantes aos propostos em Boyce e DIPRIMA, 2002.

Essa é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem. Inclui uma variável diferenciada,  $x$ , e uma variável de diferenciação,  $t$ .

Pelo método do **fator integrante**,  $\mu(t)$ , é possível encontrar uma quantidade de sal para qualquer instante  $t$ , encontrando assim o fator integrante:

$$\frac{dx}{dt} \cdot \mu(t) + \left[ 2 \left( \frac{x}{100} \right) \right] \mu(t) = \{ 2 [ \frac{1}{4} ( 1 + \frac{1}{2} \text{sen } t ) ] \} \mu(t) \quad (58)$$

onde conforme a Eq 10,

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = \left[ 2 \left( \frac{x}{100} \right) \right] \mu(t), \quad (59)$$

então,

$$\mu(t) = e^{t/50}. \quad (60)$$

Substituindo-o conforme a Eq. 12, que permite isolar  $x$ ,

$$e^{t/50} \cdot \frac{dx}{dt} = \{ 2 [ \frac{1}{4} ( 1 + \frac{1}{2} \text{sen } t ) ] \} e^{t/50}, \quad (61)$$

$$\int e^{t/50} \cdot \frac{dx}{dt} = \int \{ 2 [ \frac{1}{4} ( 1 + \frac{1}{2} \text{sen } t ) ] \} e^{t/50} dt ,$$

$$x = 25 - \frac{625}{2501} \cos t + \frac{25}{5002} \sin t + c \cdot e^{-t/50}. \quad (62)$$

Substituindo a condição inicial,  $x_0 = 50$ , obtém-se a constante  $c$ ,

$$50 = 25 - \frac{625}{2501} \cos 0 + \frac{25}{5002} \sin 0 + c \cdot e^{-0/50}, \quad (63)$$

$$c = \frac{63150}{2501}. \quad (64)$$

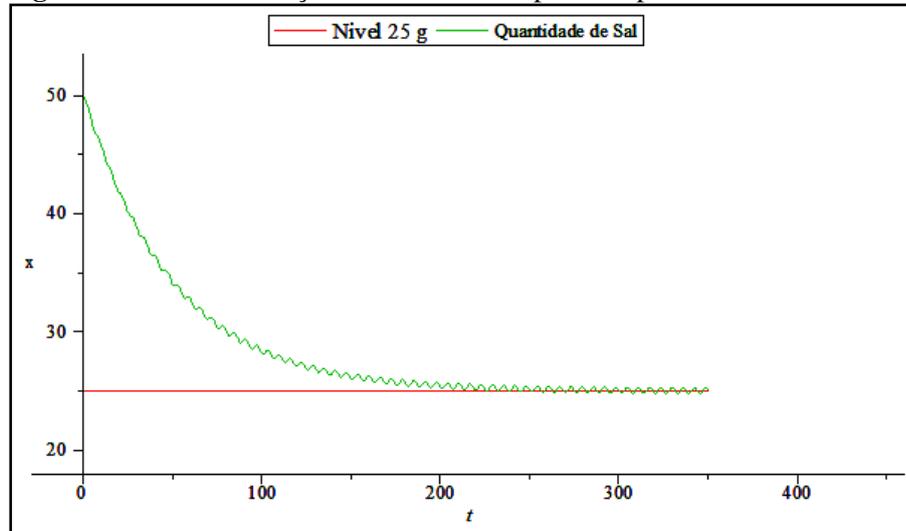
Encontrando assim a relação,

$$x = \frac{63150}{2501} e^{-t/50} + 25 - \frac{625}{2501} \cos t + \frac{25}{5002} \sin t. \quad (65)$$

É possível observar que esta equação reflete características do ponto de vista físico, que são descritos pelo modelo, em  $t(0)$  tem-se que a massa de sal,  $x$ , é igual a 50 oz.

A Figura-7 é um gráfico de solução da E.D.O. que demonstra o comportamento limite da solução. Observa-se que há oscilação em torno de um nível constante de 25 oz com uma amplitude de oscilação de  $\frac{25\sqrt{2501}}{5002} \cong 0,24995$ .

**Figura 7:** Gráfico- Variação da massa de sal pelo tempo.



As concentrações em misturas, como neste exemplo, que envolvem a solubilização de um dado composto sólido, um sal, em um solvente, água, foram mensuradas considerando uma propriedade física constante, no caso o volume. Nesse exemplo, ao trabalhar como uma E.D.O. linear se despreza possíveis interações intermoleculares que o possam variar.

### 3.2.2 Exemplo 02- Concentração de Resíduos Químicos em um Açude

Do mesmo modo uma hipotética solução de água com resíduos químicos que contamina um açude de água potável foi trabalhada em condição ideal, ou seja, sem levar em conta volumes parciais ou outras interações intermoleculares. Esse exemplo hipotético segue a linha de exemplos semelhantes aos propostos em Boyce e Diprima, 2002.

Tomou-se assim um dado açude contendo inicialmente 10 milhões de galões de água potável. O açude recebe um fluxo indesejável de resíduos químicos contaminantes de origem industrial a uma taxa de 5 milhões de galões por ano e a mistura sai a uma mesma taxa. A concentração  $\gamma(t)$  de resíduos químicos na água que está entrando varia periodicamente com o tempo de acordo com a fórmula  $\gamma(t) = 2 + \text{sen } 2t$  g/ 32al.

Supondo que estes resíduos permanecem inertes no meio e que suas interações intermoleculares não influenciem no volume total. Sendo assim visto o fluxo de entrada e

saída de água ser iguais o volume total do açude permanece constante em  $10^7$  galões. Usando a notação  $t$  para o tempo, medido em anos, e a quantidade de resíduos por  $\phi(t)$ , medido em gramas, tem-se,

$$\frac{d\phi}{dt} = \text{taxa de entrada} - \text{taxa de saída} \quad (66)$$

Sendo que “taxa de entrada” e “taxa de saída” referem-se respectivamente as taxas pelas quais ocorrem o acréscimo e decréscimo de resíduos no açude.

$$\text{Taxa de entrada} = [(5 \cdot 10^6) \text{gal/ano}(2 + \text{sen } 2t) \text{g/gal}] \quad (67)$$

$$\begin{aligned} \text{Taxa de saída} &= [(5 \cdot 10^6) \text{gal/ano}[\phi(t)/10^7] \text{g/gal}] \quad (68) \\ &= [\phi(t)/2] \text{gal/ano} \end{aligned}$$

Tem-se então a E.D.O.. que modela o sistema em  $\text{g/ano}$ ,

$$\frac{d\phi}{dt} = [(5 \cdot 10^6)(2 + \text{sen } 2t)] - [\phi(t)/2] \text{gal/ano} \quad (69)$$

Se a variável dependente for trabalhada como:

$$\phi(t) = \varphi \cdot 10^6 \quad (70)$$

Então,

$$\frac{d\varphi}{dt} + 1/2 \varphi(t) = 10 + 5 \text{sen } 2t \quad (71)$$

Inicialmente não havia contaminantes,sendo assim a condição inicial  $\varphi(0)=0$ .

O fator integrante,  $\mathbb{I}(t)$ , que será encontrado é  $e^{t/2}$ . A equação resultante com o uso deste é:

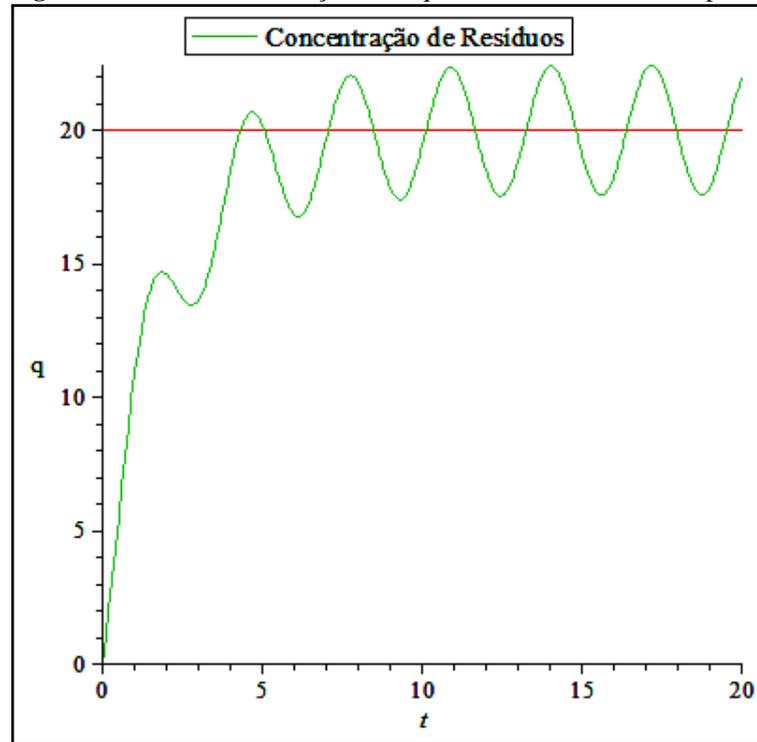
$$\varphi(t) = 20 - \frac{40}{17} \cos 2t + \frac{10}{17} \text{sen } 2t + ce^{-t/2}. \quad (72)$$

A condição inicial que fomenta encontrar a constante  $c = -300/17$ . A solução do P.V.I. portanto é:

$$\varphi(t) = 20 - \frac{40}{17} \cos 2t + \frac{10}{17} \text{sen } 2t - \frac{300}{17} e^{-t/2}. \quad (73)$$

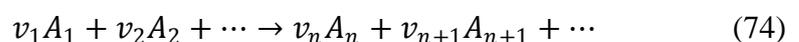
A Figura 8- traz o gráfico da solução do P.V.I., onde em valores de  $t$  pequenos a parte exponencial é importante o que diminui com o crescimento de  $t$ , mostra ainda que a partir de certa etapa a solução consiste numa oscilação resultante das parcelas  $\text{sen}2t$  e  $\text{cós} 2t$  presentes.

**Figura 8:** Gráfico- Variação da quantidade de resíduos pelo tempo.



### 3.2.3 Exemplo 4- Cinética Química.

Um campo em que as E.D.O.. estão muito presentes são os estudos físico-químicos de cinética Química. Cinética Química é o estudo das velocidades da reação. Segundo Atkins e de Paula, 2012, a velocidade total da reação pode ser dada pelo somatório do produto das concentrações molares pelas velocidades parciais de cada componente. Considerando os reagentes como taxa de saída e os produtos como a taxa de entrada, e sabendo que estes se anulam no ponto de equilíbrio, momento em que as reações direta (reagentes  $\rightarrow$  produtos) e inversa (produtos  $\rightarrow$  reagentes) coexistem com velocidades iguais. Tal que para uma reação,



pode ser reescrita tal que é;

$$\sum v_iA_i = 0 \quad (75)$$

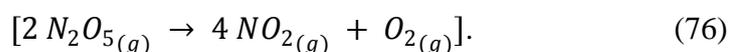
A cinética pode ser estudada conforme o número de estágios e fases de uma reação. Um campo importante no estudo da cinética Química é aquele em que se modela uma equação em termos da concentração das espécies reagentes e das constantes de velocidade chamada de lei de velocidade da reação. (MOORE, 1976).

Uma **Lei de Velocidade** ou lei cinética de reação é uma equação em que há a velocidade da reação é uma variável dependente das concentrações das espécies envolvidas pela equação global Química para reação num dado instante. Em muitos casos é possível obter soluções analíticas, ou experimentais, conhecidas como **lei de velocidade integrada** que são muito úteis. (MOORE, 1976).

O acompanhamento analítico exige um termostato para manter a temperatura constante e um bom cronômetro. A maior dificuldade, entretanto reside em acompanhar a concentração do reagente ou do produto. Moore, 1976, menciona que segundo as características de cada reação constantes físicas podem ser analisadas, como volume, pressão e índice de absorção ou refração. (ATKINS E DE PAULA, 2012).

Os estudos de L. Wilhermy em 1850 demonstraram que a velocidade do decréscimo da concentração de um reagente [A] com o tempo é proporcional ao reagente não modificado. (MOORE, 1976).

Para as chamadas reações de ‘primeira ordem’, uma reação do tipo  $A \rightarrow B + C$ , uma reação desse tipo é a da decomposição do pentóxido de dinitrogênio,



a forma integrada da lei de velocidade,

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (77)$$

é,

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}. \quad (78)$$

onde  $k$  é a constante de reação que depende apenas da temperatura e na equação representa a constante de proporcionalidade, e  $[A]$  é a concentração molar de uma espécie da reação. (MOORE, 1976).

A justificativa para as leis integradas baseia-se no fato de que as leis de velocidade são E.D.O., e neste caso tem estrutura semelhante a Eq. (04).

A integração assim se dá,

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (79)$$

A equação pode ser integrada diretamente, pois  $k$  é independente de  $t$ . Para o instante inicial  $t=0$ , a concentração de  $[A]$  é  $[A]_0$ . Serão considerados como limites de integração,

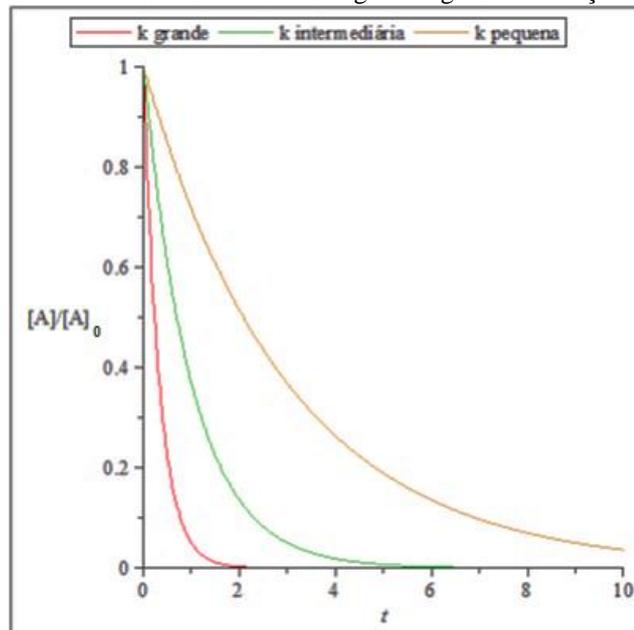
$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{dA}{A} = -k \int_0^t dt$$

$$e^{\ln\left(\frac{[A]}{[A]_0}\right)} = e^{-kt}$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt} \quad (80)$$

A Figura-9 mostra um gráfico da tendência de decaimento do reagente numa reação de primeira ordem. Onde a concentração do reagente diminui exponencialmente com o tempo numa velocidade determinada pela constante  $k$ , sendo que quanto maior  $k$  mais rápido o decaimento.

**Figura 9:** Gráfico-Decaimento do reagente segundo a variação de  $k$ .



### 3.2.4 Exemplo 4- Decaimento radioativo

A datação por carbono radioativo é uma ferramenta muito importante para a arqueologia e foi desenvolvida pelo químico americano Willard F. Libby (1908-1980). Essa datação se baseia em que algumas madeiras plantas e restos animais contêm quantidades residuais de carbono-14, um isótopo radioativo do carbono. Esse isótopo é acumulado durante a vida do indivíduo e passa a decair, ou desintegrar-se, na sua morte. (BELTRÃO, 2009).

A desintegração (variação) desse átomo que ocorre por unidade de tempo é proporcional à quantidade de átomos radioativos presentes em cada instante. Assim, se  $R = R(t)$  representa o número de átomos radioativos presente em cada instante  $t$ , uma equação matemática, que pode representar o fenômeno, é dado pela Equação diferencial (81)

$$\frac{dR(t)}{dt} = -kR(t). \quad (81)$$

onde  $k$ , chamado de constante de desintegração, é uma constante que na equação apresenta-se como coeficiente de proporcionalidade. (BELTRÃO, 2009).

A meia-vida do carbono é de aproximadamente 5730 anos, por ser tão longa permite a medição de resíduos datados de milhares de anos. Mesmo pequenas medidas de carbono identificadas permitem a descoberta proporcional da quantidade original. Ou seja, se for determinada uma quantidade  $R$  de  $C^{14}$  numa amostra, mesmo pequenas, torna-se possível identificar a quantidade inicial,  $R_0$ , pela proporcionalidade  $R/R_0$ . (JAVARONI, 2009).

Observando que a Eq. (81) apresenta estrutura semelhante a Eq. (04)

$$\frac{dR(t)}{dt} = -kR(t) \quad (82)$$

A integração pode ser feita diretamente, pois  $k$  é independente de  $t$ . Para o instante inicial  $t = 0$ , a quantidade de isótopos  $C^{14}$  é  $R_0$ , e segundo a meia-vida depois de 5730 anos esse número cai pela metade, ou seja, em  $t = 5730$  obtém-se  $R_{(5730)} = R_0/2$ . Considerando estas relações a constante  $k$  é identificada, tal que;

$$\frac{dR(t)}{R(t)} = -k dt$$

$$\int \frac{d}{R(t)} (\ln R(t)) dt = -k \int dt$$

$$R(t) = ce^{-kt}. \quad (83)$$

Tomando que  $R_{(5730)} = R_0/2$ , então;

$$\frac{R_0}{2} = R_0 e^{-k5730}$$

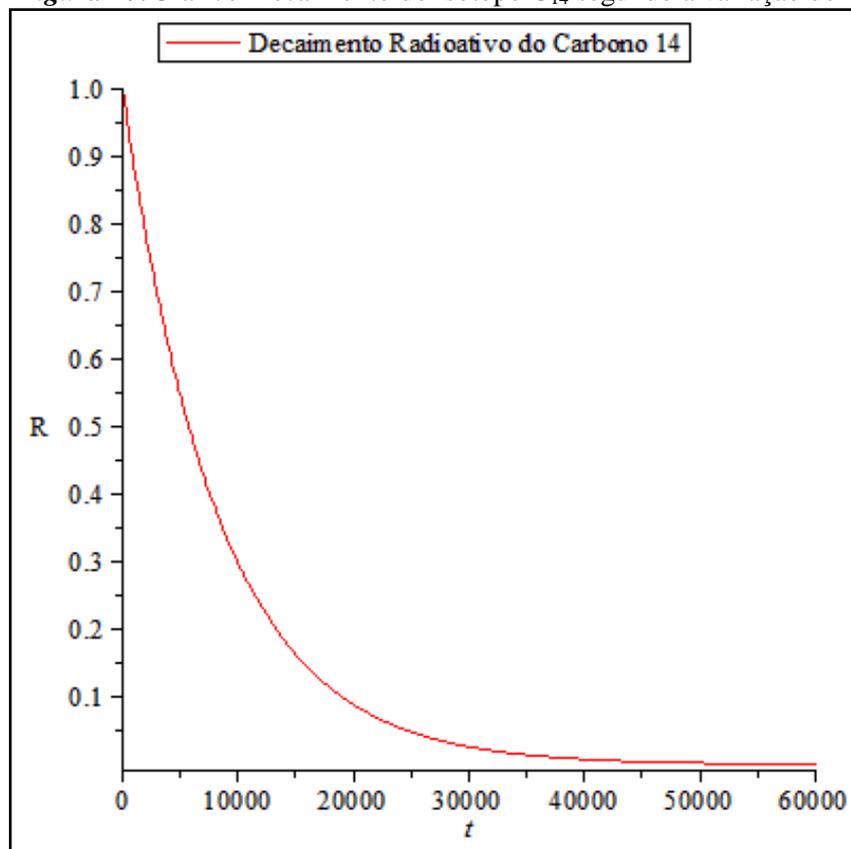
$$k = R_0 \cdot 0,00012097 \text{ ano}^{-1}. \quad (84)$$

Sendo assim a E.D.O.. tem como solução a função,

$$R(t) = e^{-0,00012097 \cdot t}. \quad (85)$$

A Figura 10 demonstra a do tendência de decaimento isótopo segundo o tempo, sendo que quanto maior o  $R_0$  mais acentuado é o decaimento.

**Figura 10:** Gráfico-Decaimento do isótopo  $C_{14}$  segundo a variação de  $R_0$ .



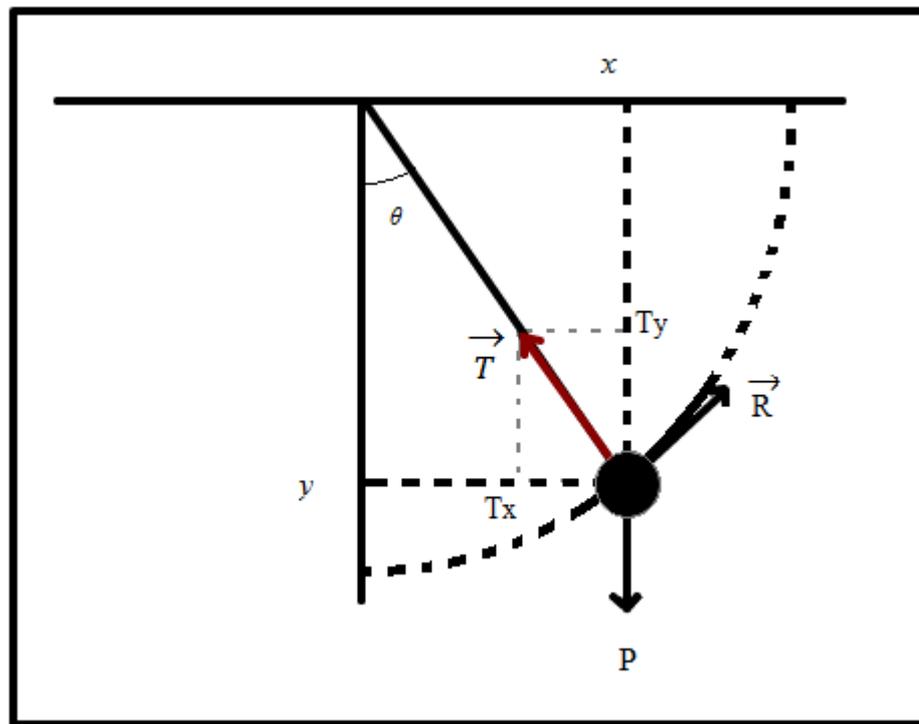
### 3.3 APLICAÇÕES DE E.D.O.. DE SEGUNDA ORDEM

#### 3.3.1 Exemplo- Pendulo.

Pendulo pode ser caracterizado comoum oscilador harmônico. Um oscilador harmônico é o modelo matemático que descreve o comportamento de movimento retilíneo de uma partícula sujeita a uma força que adireciona periodicamente em direção à origem, tal que  $F = -kr^2$ . A magnitude é descrita segundo essa força por um múltiplo  $k$  (constante positiva) da distância até origem.(ABREU E LOPEZ-CASTILHO, 2012)

Seja o pendulo conforme a figuraabaixo onde  $\vec{p}$  denota a força peso tal que  $\vec{p} = m$  (massa).  $\vec{a}$  (aceleração);  $\vec{v} = \alpha \cdot V$  (velocidade);  $\vec{R}$  a resistência; e  $\vec{T}$  tração de modulo  $T$ .

*Figura 11: Esquema- Pendulo de massa  $m$ .*



A partícula, conforme a Figura-11 tem massa  $m$ , e o comprimento da corda  $l$ , onde a corda tem massa desprezível.

Tomando-se em coordenadas polares, pelas propriedades do triangulo retângulo se tem que;

$$\begin{cases} x = l \sin \theta \\ y = -l \cos \theta \end{cases} \quad (86)$$

A partir da derivação das coordenadas acima em relação ao tempo,  $t$ , a velocidade é explicitada por;

$$v = (x', y'), \quad x' = l \cos \theta' \quad y' = l \sin \theta' \quad (87)$$

A segunda derivada fomenta a aceleração, tal que;

$$a = (x'', y''), \quad x'' = -l \sin(\theta')^2 + l \cos \theta' \cdot \theta'' \quad e \quad y'' = l \cos(\theta')^2 + l \sin \theta' \cdot \theta'' \quad (88)$$

A separação de todas as forças atuantes na partícula nos componentes x e y resulta em;

$$\vec{P}_x = 0; P_y = -mg; T_x = -T \sin \theta; T_y = T \cos \theta; R_x = \alpha x'; R_y = \alpha y' \quad (89)$$

Pela segunda lei de Newton a força resultante ( $F_r = m.a$ ), é igual à soma das forças aplicadas num ponto.

Aplicando este conceito em cada direção de x e y.

Em x:

$$m \cdot x'' = -T \sin \theta + \alpha x';$$

$$T = \frac{-m \cdot x'' + \alpha x'}{\sin \theta} \quad (90)$$

Em y:

$$m \cdot y'' = -T \cos \theta + mg + \alpha y';$$

$$T = \frac{m \cdot y'' + mg - \alpha y'}{\cos \theta} \quad (91)$$

Igualando os módulos da tração "T" nas equações acima:

$$\frac{-m \cdot x'' + \alpha x'}{\sin \theta} = \frac{m \cdot y'' + mg - \alpha y'}{\cos \theta} \quad (92)$$

Substituindo os valores de  $x', y', x'', y''$ :

$$\begin{aligned} & [-m \cdot (-l \sin(\theta')^2 + l \cos \theta' \cdot \theta'') + \alpha (l \cos \theta')]. \cos \theta \\ & = [m \cdot (l \cos(\theta')^2 + l \sin \theta' \cdot \theta'') + mg - \alpha (l \sin \theta')]. \sin \theta \end{aligned}$$

$$\theta'' = -\frac{\alpha}{m} \theta' + \frac{g}{l} \sin \theta = 0 \quad (93)$$

Para  $\theta$  muito próximo de zero,  $\sin\theta$  se aproximando de  $\theta$ , trabalha-se a equação anterior tal que;

$$\theta'' - \frac{\alpha}{m} \theta' + \frac{g}{l} \theta = 0. \quad (94)$$

Chamando  $w^2 = g/l$ ;  $\gamma = \alpha/m$ ; a equação (82) se transforma em;

$$\theta'' - \gamma \theta' + w^2 \theta = 0. \quad (95)$$

A equação (95) é a E.D.O.. do pendulo amortecido na vizinhança  $\theta = 0$  onde o parâmetro  $\gamma$  é muito pequeno.

AE.D.O.. (95) modela o comportamento de oscilação do pendulo. A resolução depende primariamente de caracterizar o tipo de E.D.O., nesse caso está é homogênea e pode ser resolvida pelo método explanado como **soluções para as E. D. O. lineares homogêneas com coeficientes constantes.**

Resolvendo a equação (95) se tem então;

$$\theta(t) = e^{rt}, \theta'(t) = r e^{rt}, \theta''(t) = r^2 e^{rt} \quad (96)$$

$$r^2 e^{rt} - \gamma r e^{rt} + w^2 e^{rt} = 0. \quad (97)$$

Tem-se então por solução do polinômio de segundo grau;

$$\Delta = (-\gamma)^2 - 4(1.w^2) \quad (98)$$

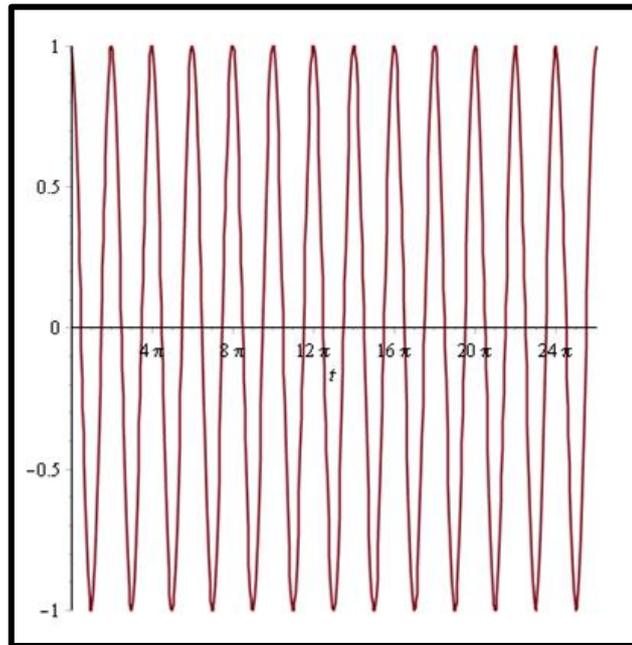
$$r = \frac{-(-\gamma) \pm \sqrt{[(-\gamma)^2 - 4(w^2)]}}{2} \quad (99)$$

Esse problema pode existir com três comportamentos e foram abertos a seguir;

**1º caso:** É o caso em que o pendulo não é amortecido, para tanto tem-se que  $\alpha=0$  por quanto  $\gamma=0$  e  $\Delta < 0$ . As raízes da equação característica são  $r = \pm wi$  e a solução geral é:  $\theta(t) = c_1 \cos(wt) + c_2 \sin(wt)$ ; com as condições iniciais (CI)  $\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$ .

**Observação:** Esse pêndulo não amortecido tem a mesma E.D.O.. do movimento harmônico simples, usado no movimento da mola e outros movimentos periódicos.

**Figura 12:** Gráfico- Pendulo  $\alpha=0, \gamma=0, w=1$  e  $CI(\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$ ).



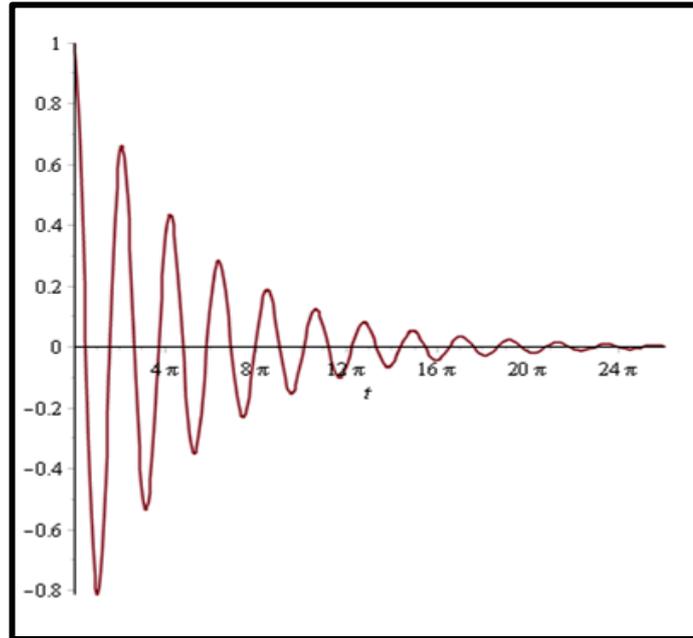
**2º caso:** É o caso em que é considerado o pendulo sofrendo amortecimento,  $\gamma < 0$ , ou seja, vai dissipando energia do sistema e este vai diminuindo a intensidade em direção a  $V=0$ . Neste a E.D.O. é semelhante aos que tem movimentos “periódicos” que vão diminuindo com movimentos senoidais.

As raízes são complexas e conjugadas e são  $r = \frac{\gamma}{2} \pm \beta i$ , onde  $\beta = \sqrt{-\gamma^2 + 4w^2}$ , e a solução geral é;

$$\theta(t) = e^{\frac{\gamma}{2}t} [c_1 \cos(\beta t) + c_2 \sin(w\beta t)] \quad (100)$$

com as condições iniciais (CI)  $\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$  e Pendulo com  $\gamma < 0, \alpha < 0, \Delta < 0$ .

**Figura 13:** Gráfico- Pendulo com  $\gamma = -\frac{1}{8}$ ,  $w = 1$ ,  $\Delta < 0$ ; CI:  $\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$ .

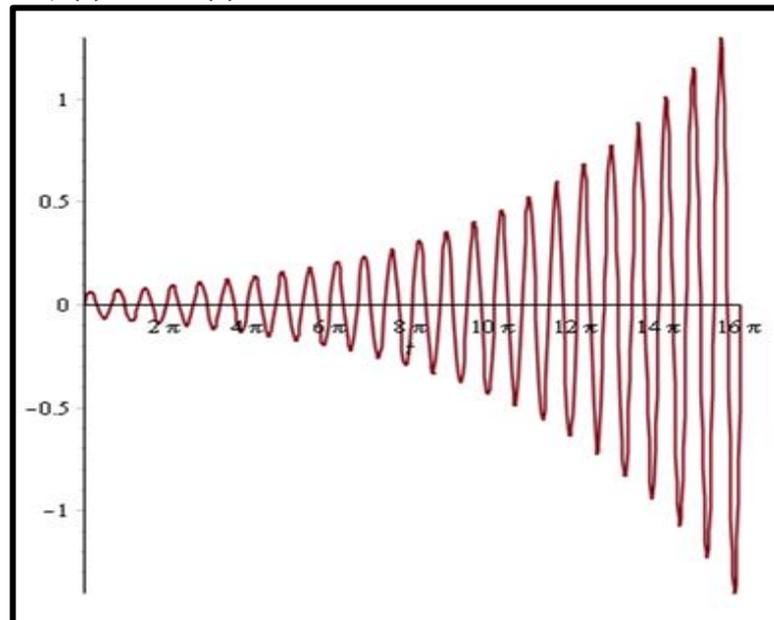


**3º caso:** É o caso em que é considerado um impulso, ou excitação, sobre o pendulo,  $\gamma > 0$ . As são raízes complexas e conjugadas e são  $r = \frac{\gamma}{2} \pm \beta i$  e a solução geral é;

$$\theta(t) = e^{\frac{\gamma}{2}t} [c_1 \cos(\beta t) + c_2 \sin(w\beta t)] \quad (101)$$

com as condições iniciais (CI)  $\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$  e Pendulo com  $\gamma > 0$ ,  $\alpha > 0$ ,  $\Delta < 0$ .

**Figura 14:** Gráfico- Pendulo com  $\gamma = +\frac{1}{8}$  e  $w = 3$   
CI( $\theta(0) = 1$  e  $\theta'(0) = 0$ ).



### 3.4 APLICAÇÕES E.D.O.. ‘QUALITATIVAS’

#### 3.4.1 Exemplo- Catalise Enzimática.

O potencial de catalisar reações Químicas é uma das bases para possibilitar a vida. Um catalisador, segundo Atkins e de Paula (2012) p. 259, é uma substância que acelera uma reação, mas não sofre, modificação de natureza Química, nesse processo. Diminui assim a energia de ativação, esse parâmetro determina a mínima energia cinética que se necessita dos reagentes para a formação de produtos.

Boa parte das enzimas são proteínas, e não raro são catalisadores muito mais poderosos que os sintéticos. O reconhecimento e a discriminação dessas complexas moléculas se deu inicialmente no final dos anos 1700 por estudos dirigidos a digestão de carne por secreções estomacais. Durante os séculos seguintes muitas descobertas nesse campo foram imprescindíveis para o desenvolvimento da bioQuímica.

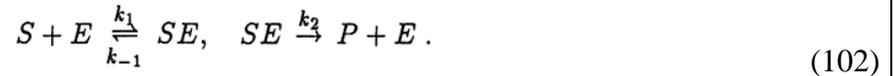
As condições biológicas relevantes possibilitam condições de fator de hidrogênio (pH), meio aquoso e temperatura desfavoráveis à cinética de reações não catalisadas. As enzimas, segundo Nelson e Cox (2011), fomentam um ambiente específico e adequado para determinada reação.

Essas moléculas são estruturadas de forma a conter um **sítio ativo**, um “bolsão” em que a reação ocorre isolada, e é ali que ela recebe o **substrato**, o reagente, fomentando o ambiente necessário.

O **complexo enzima-substrato** teve sua existência proposta por Charles-Adolphe Wutrz em 1880. Sendo este o ponto crucial para a modelagem matemática que defina o comportamento reacional, pois as reações de velocidade dependem do estudo deste.

A **cinética enzimática** é um dos métodos mais importantes para compreender um mecanismo enzimático, e consiste em determinar as variações de velocidade frente a variação dos parâmetros. Um fator chave é a concentração de substrato, **[S]**, entretanto a constante mudança deste durante o processo dificulta o estudo.

É necessário então acompanhar a velocidade inicial,  $V_0$ . A teoria geral de ação das enzimas foi proposta por Leonor Michaelis e Maud Menten em 1913. Segundo MURRAY, 1993, eles postularam a seguinte reação total:



Sendo que a enzima combina-se inicialmente, e de maneira reversível, com o substrato, e então o complexo é rompido em uma reação mais lenta que libera o produto e a enzima.

Trabalhando matematicamente se tem uma lei que norteia o processo. Segundo a lei de conservação da massa a concentração dos produtos é proporcional a dos reagentes. Então trabalhando as concentrações:

$$[S]=s \quad [E]=e \quad [SE]=c \quad [P]=p$$

Os postulados denotam que as velocidades de formação e quebra do complexo são determinadas pelas constantes  $k_1$  (formação),  $k_{-1} + k_2$  (quebra em reagentes e produtos respectivamente), que remetem a observação da Lei da conservação da massa já mencionada.

Aplicando a lei se tem então as seguintes equações:

$$\frac{ds}{dt} = -k_1 es + k_{-1} c, \quad (103)$$

esta diz que a taxa de concentração do substrato é proporcional a quebra do complexo em reagentes subtraído da formação do complexo,

$$\frac{de}{dt} = -k_1 es + (k_{-1} + k_2) c, \quad (104)$$

que por sua vez diz que a taxa de concentração da enzima é proporcional a quebra do complexo em reagentes e produtos subtraído da formação do complexo,

$$\frac{dc}{dt} = k_1 es - (k_{-1} + k_2) c, \quad (105)$$

por sua vez diz que a taxa de concentração do complexo é proporcional a quebra do complexo produtos,

$$\frac{dp}{dt} = k_2 c \quad (106)$$

esta diz que a taxa de concentração do produto é igual a quebra do complexo em reagentes subtraído da formação do complexo. Tem-se assim um sistema não-linear de equações. Nem

todas são independentes, a formação dos produtos depende da equação de concentração do complexo, trabalhando-as tem-se;

$$p(t) = k_2 \int_0^t c(s) ds, \quad (107)$$

Quanto à concentração inicial se tem que;

$$s = s_0 \quad e = e_0 \quad c = 0 \quad p = 0$$

Isso porque a reação inicia-se com substratos e enzimas interagindo com concentrações determinadas e objetivo de liberar um produto, entretanto no momento inicial a concentração de complexo e produto conhecidas e igual a zero.

Analisando as equações (103) e (104) se observa que a concentração do complexo e enzimas na solução é inversa, equações com módulos iguais, mas sinais opostos. Pois;

$$\frac{dc}{dt} + \frac{de}{dt} = 0, \quad (108)$$

Essas se anulando implica que;

$$c(t) + e(t) = e_0. \quad (109)$$

e isolando  $e(t)$ ;

$$e(t) = e_0 - c(t) \quad (110)$$

Por substituir a eq. (109) nas (103) e (105);

$$\frac{ds}{dt} = -k_1 e_0 s + (k_1 s + k_{-1}) c, \quad (111)$$

$$\frac{dc}{dt} = k_1 e_0 s - (k_1 s + k_{-1} + k_2) c. \quad (112)$$

com condições iniciais  $s(0) = s_0$  e  $e(0) = 0$ . Como as equações acima [(111) e (112)] são dadas apenas em termos de “s” e “c” a análise qualitativa inicial é feita apenas com essas duas equações. As análises aqui feitas só são validas para  $t \geq 0$  e as concentrações das variáveis acima ou iguais a zero.

Segue-se assim uma análise qualitativa das direções do sistema com as equações [(111) e (112)] no plano  $(c, s)$  para deduzir as formas das soluções, valendo apenas para  $c$  e  $s > 0$ .

$$1^{\circ}\text{- Análise de } \frac{ds}{dt} = -k_1 e_0 s + k_{-1} c;$$

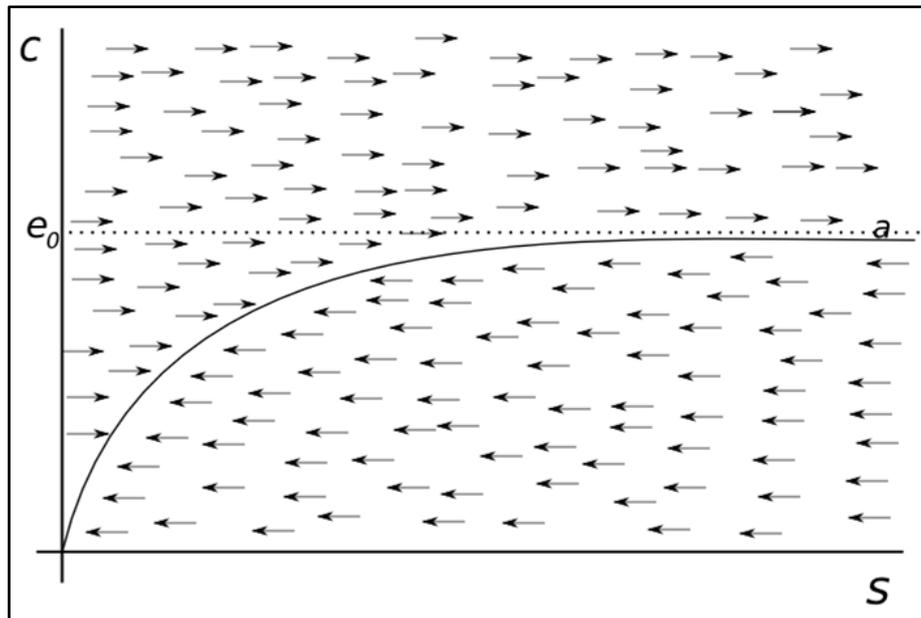
$$\frac{ds}{dt} > 0 \Rightarrow c > \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}, \quad (113)$$

$$\frac{ds}{dt} < 0 \Rightarrow c < \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}, \quad (114)$$

$$\frac{ds}{dt} = 0 \Rightarrow c = \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}. \quad (115)$$

E denomine-se  $c = \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}$ ; como curva "a",

**Figura 15:** Diagrama de Direção  $ds/dt$ .



$$2^{\circ}\text{- Análise de } \frac{dc}{dt} = k_1 e_0 s - (k_{-1} k_1 k_2) c;$$

$$\frac{dc}{dt} > 0 \Rightarrow c < \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}, \quad (116)$$

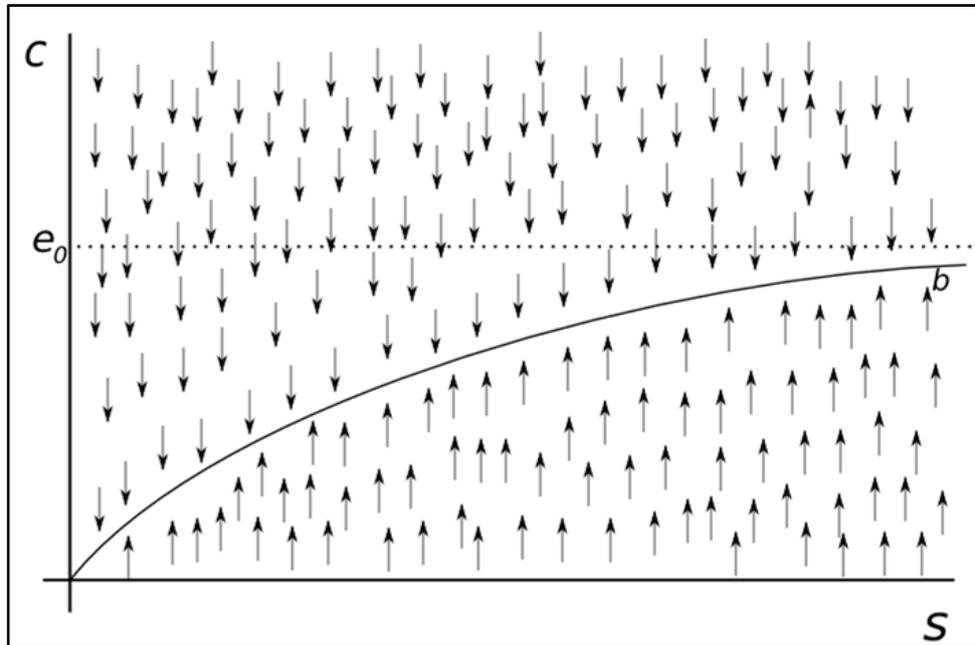
$$\frac{dc}{dt} < 0 \Rightarrow c > \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}, \quad (117)$$

$$\frac{dc}{dt} = 0 \Rightarrow c = \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_{-1}}. \quad (118)$$

E denomine-se  $c = \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_2 + k_{-1}}$ ; como curva “b”

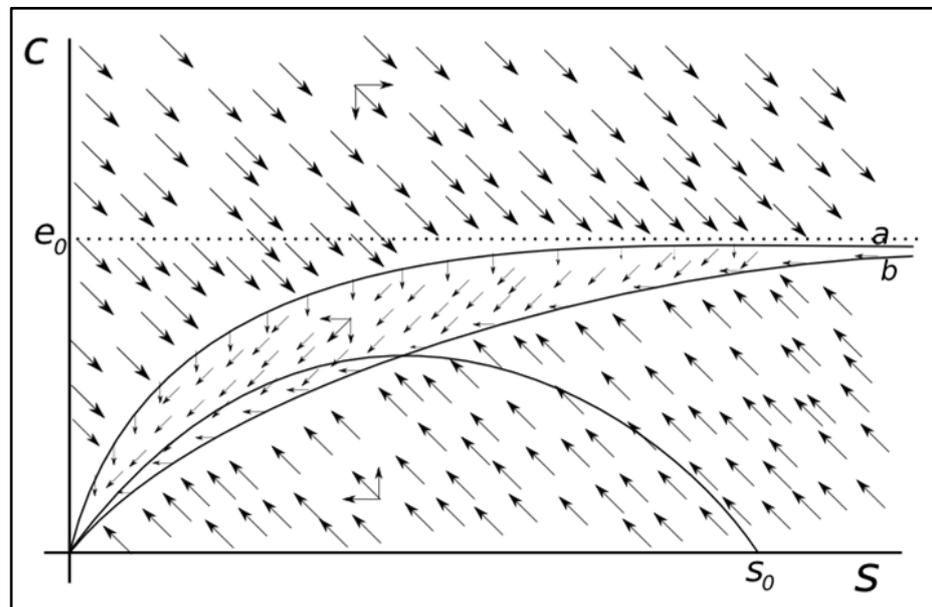
Geometricamente se obtém as seguintes direções;

**Figura 16:**Diagrama de Direção  $dc/dt$ .



Unindo os gráficos anteriores se obtém;

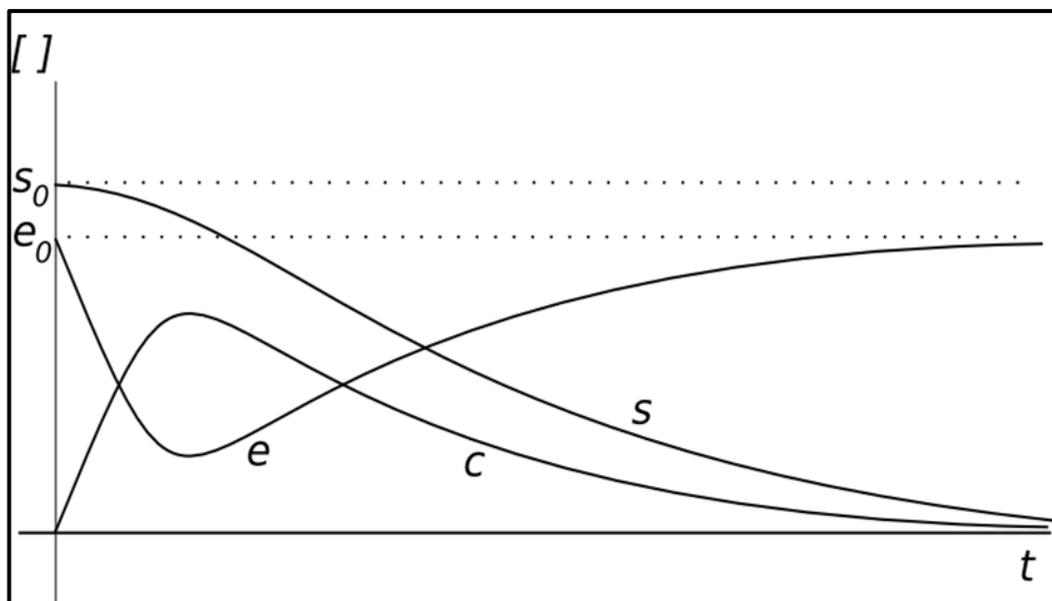
**Figura 17:**Diagrama de Direções.



O estudo desse gráfico permite observar que na condição inicial  $s(0)=s_0$  e  $c(0)=0$  se tem que  $\frac{ds}{dt} < 0$  em todo  $t > 0$ , portanto  $s(t)$  é sempre decrescente e tende a zero quando  $t \rightarrow \infty$ . Quimicamente isso corresponde a dizer que o substrato tende a ser totalmente consumido atingindo a concentração zero. Em relação a  $c(t)$  se observa que  $\frac{dc}{dt} > 0$  até  $c(t)$  atingir a curva “b” no valor  $c = \frac{k_1 e_0 s}{k_1 s + k_2 + k_{-1}}$ ; onde  $s$  depende da concentração de  $s_0$ . Após esse valor  $c$  decresce e tende a zero quando  $t \rightarrow \infty$ . Quimicamente isso diz que o complexo tende à zero depois atingir a curva b, pois o substrato passa a ser mais escasso.

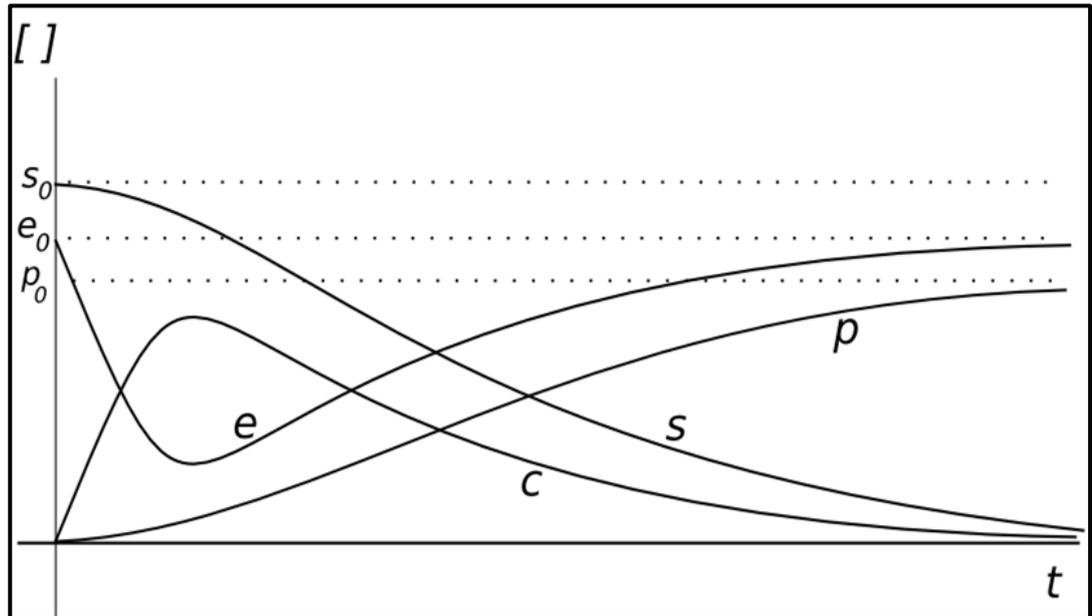
Assim se formula o seguinte gráfico para a concentração do substrato e do complexo (SE);

**Figura 18:** Gráfico- concentração  $s$  e  $c$  pelo tempo.



Pela equação (110), o gráfico da concentração da enzima é o oposto da do complexo ES elevando a uma altura “ $e_0$ ” da concentração inicial da enzima.

Pensando no produto se tem pela equação (105). Em  $t=0$  se tem  $\frac{dp}{dt} = k_2 c(0) = k_2 \cdot 0$ . Mas a partir do conceito básico de análises qualitativas, capítulo 2,  $c(t) > 0$  para todo  $t > 0$ , ou seja, a concentração do produto é sempre crescente. Mas como,  $t \rightarrow \infty$ , então  $\frac{dp}{dt} = k_2 c$ ,  $c(t) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$ , logo a concentração do produto tende a estabilizar em algum valor  $p_0$ . Observam-se as concentrações na Figura 19;

**Figura 19:** Gráfico- concentração  $s$ ,  $p$ ,  $e$  e  $c$  pelo tempo.

As concentrações dos componentes da reação são demonstradas conforme a Figura 19, onde  $s$  e  $e$  iniciam em sua concentração máxima, e  $s$  tende a zero sendo totalmente consumido. Pode-se observar também que as concentrações de  $e$  e  $c$  são inversas que após um pico de existência de  $c$  e consumo de  $e$ , o complexo tende a zero e  $e$  tende a concentração inicial  $e_0$ .

### 3.5 CONTEXTUALIZAÇÃO E FINALIZAÇÃO

São aqui apresentadas mais possibilidades de contextualizações dos exemplos anteriormente trabalhados, com foco nas E.D.O., com uma maior profundidade em sistemas químicos abordados durante a graduação. Os aqui comentados são os exemplos do pendulo e o de velocidade de reações catalisadas por enzimas. E por fim algumas considerações finais.

#### **Aplicação de sistemas harmônicos simples no ensino da mecânica quântica pela Equação de Schördinger.**

A importância de compreender sistemas de oscilações harmônicas para o estudo da Química é a aplicação útil no estudo de Química quântica. Uma aplicação admirável é no ensino do conceito de radiação.

Segundo Abreu e Lopez-Castilho, 2012, a Química quântica é introduzida nos cursos de graduação em Química, geralmente, de forma abrupta e sem preparar um caminho de conhecimentos matemáticos e físicos necessários. O que origina muitos problemas para o ensino-aprendizagem do tema.

Para Peixoto, 1978, muitos problemas de natureza quântica não tem uma solução analítica explícita. Entretanto modelos hipotéticos de aproximação de fenômenos quânticos são muito úteis para compreender as tendências dos sistemas naturais.

Esses problemas são aplicados a Equação de Schrödinger, que pode ser considerada uma análoga na mecânica quântica da segunda lei de Newton, da mecânica clássica. Esta é uma equação diferencial homogênea de segunda ordem, independente do tempo. Considerando a oscilação harmônica unidirecional pode ser descrita tal; (PEIXOTO, 1978).

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} = -\frac{8\pi\mu}{h^2} \left[ \frac{1}{2} kx^2 - E \right] \right] \psi(x) = 0 \quad (119)$$

Sendo k a constante de força do oscilador associada à energia potencial do sistema, x é o deslocamento apresentado pelo oscilador em relação à posição de equilíbrio e  $\mu$  é a massa reduzida do sistema.

Peixoto, 1978, sugere o uso de um modelo a partir do oscilador harmônico simples, citado no exemplo-1 do subtema de aplicações de E.D.O.. de segunda ordem, como um ponto de partida que permite conectar o conhecimento da mecânica clássica do aluno e a

teoria de mecânica quântica. Sendo útil por permitir uma análise muito precisa dos espectros vibracionais causados pelas vibrações moleculares.

### 3.5.1 A equação de Michaelis-Menten

Tomando a equação de velocidade de transformação do complexo SE (c), após o estágio transitório de complexação;

$$\frac{dc}{dt} = k_1 es - (k_{-1} + k_2)c = 0, \quad (120)$$

segundo estabelecido pelos estudos de L. Michaelis e M. L. Menten (1913) a constante  $K_m$  (constante de Michaelis) =  $(k_{-1} + k_2) / k_1$ .

$$c(t) = \frac{e s}{K_m}, \quad (121)$$

a velocidade pode ser determinada tal que;

$$v = k_2 c = k_2 \frac{e s}{K_m} = - \frac{ds}{dt}, \quad (122)$$

Sendo assim a velocidade da reação é dada pela concentração restante de substrato,  $v = - \frac{ds}{dt}$ . Entretanto essa concentração depende da concentração de [E] e experimentalmente só haverá o dado de  $[E]_0$ , ou  $e_0$ , que é a concentração inicial da enzima, na presença de um excesso de substrato. Pela relação anterior, que determinou  $c(t) + e(t) = e_0$ ,

$$c = \frac{e_0 s}{K_m + s}, \quad (123)$$

A famosa equação de hipérbole retangular de L. Michaelis e M. L. Menten (1913) é dada tal que;

$$v = k_2 c = k_2 \frac{k_2 e_0 s}{K_m + s} = - \frac{ds}{dt} \quad (124)$$

e portanto para a velocidade inicial da reação;

$$v_0 = k_2 [E]_0 [S]_0 / ([S]_0 + K_M) = V_{\max} [S]_0 / ([S]_0 + K_M) \quad (125)$$

Onde  $k_2[E]_0 = V_{max}$  é a velocidade máxima da reação para uma dada concentração inicial da enzima,  $[E]_0$ . A constante de velocidade  $k_2$  é também chamada de  $k_{cat}$  ou número de renovação. (CARVALHO, 2010).

Espenson, 2002 p. 91, o melhor modo para obtenção dos valores de  $K_m$ ,  $V_{max}$  e  $k_{cat}$  é o uso de um ajuste não linear por mínimos quadrados. Ajustes menos confiáveis estatisticamente, mas mais simples, são os ajustes lineares.

Carvalho, 2010, menciona cinco manipulações de ajustes lineares entre eles dentre as quais se tem as equações de Lineweaver-Burk, de Hanes e de Eadie-Hofstee.

**Tabela 1:** Equações de manipulações de ajustes lineares da equação Michaelis-Menten.

$1/v_0 = K_M/(V_{max} [S]_0) + 1/V_{max}$	Lineweaver-Burk
$[S]_0/v_0 = [S]_0/V_{max} + K_M/V_{max}$	Hanes
$v_0 = V_{max} - K_M(v_0/[S]_0)$	Eadie-Hofstee
$[S]_0 = V_{max} [S]_0/v_0 - K_M$	Carvalho, 2010

Essas equações são mais confiáveis, entre si, conforme a necessidade de maior precisão de um parâmetro ou outro.<sup>2</sup> A sua importância reside em ser didaticamente mais simples, e a maior rapidez que oferece na percepção desvios de um comportamento no mecanismo do tipo Michaelis-Menten.

<sup>2</sup>Carvalho, 2010, apresenta em seu trabalho uma discussão interessante da capacidade dessas equações em produzir parâmetros de Michaelis-Menten confiáveis.

## CONCLUSÕES

Diante do exposto pode-se concluir que o ensino de cálculo apesar de imprescindível tem sido trabalhado nos cursos de química com uma carência no âmbito das aplicações e da contextualização. Muitos desafios contribuem para esse estado tais como as dificuldades prévias dos discentes em matemática básica, carência de professores matemáticos que dominem conhecimentos químicos pertencentes à grade dos cursos, bem como de Químicos que usem o aparato matemático em suas explicações.

Neste trabalho foi possível destacar exemplos de aplicações que podem ser desbravados de maneira interdisciplinar, bem como individualmente pelos docentes de ambas as áreas, Matemática e Química. O que possibilitou determinar que as E.D.O., mesmo as mais simples, têm grande emprego em sistemas químicos na determinação de fatores complexos. E pode-se concluir que o uso aplicado, mesmo que demande mais tempo de estudo, é possível e de grande importância para um ensino menos superficial de cálculo em cursos de Química

Da pergunta que iniciou essa discussão, “O que é mais importante ensinar a um químico, decorar uma equação pronta ou dominar o aparato matemático que a originou?”, se pode destacar que o “decorar” acaba realmente sendo, infelizmente, usado quando não se domina o aparato matemático. Mas para um Químico o aparato matemático só pode ter utilidade direta se for aplicado de maneira clara à ciência central de seu curso. Por isso aplicações são imprescindíveis. Sendo assim ações práticas que tenham em foco à melhoria do ensino de Matemática nos cursos de graduação em Química se mostram necessárias e urgentes.

**REFERÊNCIAS**

- [1] ABREU, L.; LOPES-CASTILHO, A.; Sintonização de estados quânticos: um estudo numérico do oscilador harmônico quântico. *Quim. Nova*, Vol. 35, No. 8, 1692-1695, 2012. Disponível em: <[http://quimicanova.sbq.org.br/imagebank/pdf/Vol35No8\\_1692\\_32-ED11942.pdf](http://quimicanova.sbq.org.br/imagebank/pdf/Vol35No8_1692_32-ED11942.pdf)>, acesso em: 18 jan. 2016.
- [2] APPLICATIONS and Modelling in Mathematics Education. *International Reviews on Mathematical Education*, v. 34, n. 5 ISSN 1615-679X. Disponível em: <<http://subs.emis.de/journals/ZDM/zdm025i1.pdf>>. Acesso em: 18 nov. 2014.
- [3] ATKINS, P. W., PAULA, J. Atkins, *Físico-Química V. 2*, Tradução: Edilson Clemente da Silva, 8ª ed. – [Reimpr.]- Rio de Janeiro: LTC, 2012.
- [4] BASSANEZI R. C e W. C. FERREIRA JR, *Equações Diferenciais com Aplicações*. 1ª ed., Edit. Harbra, 1988.
- [5] BASSANEZI, R. C. *Ensino-Aprendizagem com Modelagem Matemática: uma nova estratégia*. São Paulo: Contexto, 2002.
- [6] BELTRÃO, M. E. P. *Ensino de Cálculo pela Modelagem e Aplicações- Teoria e Prática*. 2009. 320 f. Tese (Doutorado em Educação Matemática)- Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, São Paulo, 2009.
- [7] BOYCE, W. E. ; DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. Tradução Valéria de Magalhães Iorio. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
- [8] BOYER, C. B. *História da Matemática*. Tradução Elza F. Gomide. São Paulo: Editora: Edgar Blücher, Editora da Universidade de São Paulo, 1974.
- [9] CARVALHO, N. M. F. I; etc e tal, *Uso de equações lineares na determinação dos parâmetros de Michaelis- Menten*. *Quím. Nova* vol.33 No.7 São Paulo, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/S0100-40422010000700033>>; acesso em: 18/ 01/ 2016.
- [10] CARVALHO, R. B. F.; ALMEIDA, A. A. C.; DA SILVA, A. A. C. A.; LEITE, D. B. C.;ATAIDE, M.A. C. S. *Dificuldades apresentadas por alunos do ensino superior do curso de licenciatura Química diante de situações-problema e questões retiradas de listas tradicionais*, ANNQ, 2011. Disponível

em:<<http://www.annq.org/congresso2011/arquivos/1300242646.pdf>>. Acesso em: 14 jan. 2016.

- [11] CODDINGTON, E. A. Na introduction to ordinary differential equations (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1961; New York: Dover, 1989) Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: uma nova estratégia. 2 ed. São Paulo: Contexto, 2004.
- [12] ESPENSON, J. H.; Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, 2nd ed.; McGraw-Hill: Nova Iorque, 2002.
- [13] FERNANDES, D. M. da S. Utilização de Softwares Educacionais na diminuição da abstração no ensino-aprendizagem de Química em nível superior. 88 f. Monografia (Graduação em Licenciatura e Química) – Instituto Federal do Ceará, Quixadá, 2014.
- [14] FERNANDES, D. M. da S.; SALDANHA, G. C. B. Dificuldades de Aprendizagem no Nível Superior: estudo de caso com graduandos de licenciatura em Química. 2014. Disponível em:<<http://enalic2014.com.br/anais/anexos/7704.pdf>>. Acesso em: 14 jan. 2016.
- [15] JAVARONI, S. L. Abordagem geométrica: possibilidades para o ensino e aprendizagem de Introdução às Equações Diferenciais Ordinárias. 2007. 321 f. Tese (Doutorado em Educação Matemática)- Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro- SP, 2009.
- [16] LUZ, A. M. S.; CORRÊA, F. J. S. A. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS E APLICAÇÕES. Revista Virtual de Iniciação Acadêmica da Universidade Federal Pará. Vol. 1, N° 1, março 2001. Disponível em: <[http://www.cultura.ufpa.br/rcientifica/ed\\_anteriores/pdf/ed\\_01\\_amsl.pdf](http://www.cultura.ufpa.br/rcientifica/ed_anteriores/pdf/ed_01_amsl.pdf)> Acesso em: 18 nov. 2014.
- [17] MACHADO, N.J. Matemática por assunto: noções de cálculo. São Paulo: Scipione, 1988.
- [18] MICHAELIS, L.; MENTEN, M. L.; Biochem. Z. 1913.
- [19] MORAES; TEIXEIRA JUNIOR REFLEXÕES SOBRE O ENSINO DE CÁLCULO DIFERENCIAL E INTEGRAL EM CURSOS DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA. DiversaPrática, v. 2, n. 1, p. 194-217 – 1° semestre 2014.
- [20] MOORE, W. J. Físico-Química. Tradução da 4ª ed. Estadunidense/ Helena Li, São Paulo: Editora Edgar Blücher, 1ª ed, 1976.
- [21] MURRAY, J. D. Mathematical Biology, Springer Verlag. 2ª ed., 1993, USA.

- [22] PEIXOTO, E. M. A. Modelos simples em mecânica quântica. *Quim. Nova*, Vol. 1, No.4 08/ 08/ 1978, Disponível em: <[http://quimicanova.sbq.org.br/imagebank/pdf/Vol1No4\\_21\\_v01\\_n4\\_\(6\).pdf](http://quimicanova.sbq.org.br/imagebank/pdf/Vol1No4_21_v01_n4_(6).pdf)>, acesso em: 18 jan. 2016.
- [23] Nelson, D. L. and Cox, M. M. (Editor). *Princípios de bioQuímica de Lehninger*. 5ª ed. Artmed, PortoAlegre.2011.
- [24] NERY, A. L. P.; LIEGEL, R. M.; FERNANDEZ, C. Um olhar crítico sobre o uso de algoritmos no Ensino de Química no Ensino Médio: a compreensão das transformações e representações das equações químicas. *Revista Electronica de Enseñanza de las Ciencias*, 6 (3), p. 587-600, 2007.
- [25] SANTOS, R. M.; BORGES, H. B. Avaliação do Desempenho no Processo de Ensino Aprendizagem de Cálculo Diferencial e Integral I (O Caso da UFC). 1993. Disponível em: <<http://www.multimeios.ufc.br/arquivos/pc/artigos/artigoavaliacao-do-desempenho-no-processo-de-ensinoaprendizagem.pdf>>. Acesso em: Janeiro de 2016.