1 Ecuaciones diferenciales como modelos matemáticos

1.1. Modelo matemático

Un modelo matemático es la descripción matemática de un sistema o fenómeno de la vida real.

La formulación de un modelo matemático implica:

- Identificar las variables causantes del cambio de un sistema.
- Establecer un conjunto de hipótesis razonables acerca del sistema (leyes empíricas aplicables).

Las hipótesis de un sistema implican con frecuencia la razón o tasa de cambio de una o más variables que intervienen. El enunciado matemático de esas hipótesis es una o más ecuaciones donde intervienen derivadas, es decir, ecuaciones diferenciales.

1.2. Proceso de modelado

El proceso de modelado básicamente sigue los siguientes pasos:

1. Identificación de variables estableciendo una notación matemática.
2. Leyes empíricas que se pueden aplicar.
3. Planteamiento de las ecuaciones.

1.3. Ejemplos de formulación de modelos

1.3.1. Fusión

Se considera una esfera de hielo que se derrite a razón proporcional al área de su superficie.

Hallar una expresión para el volumen de la esfera en cualquier unidad de tiempo.

1. Variables:
   - La incógnita del problema: volumen (es función del tiempo).
   - Notación matemática:

     V: volumen, t: tiempo, $V = V(t)$: el volumen depende del tiempo, es decir, es función del tiempo.
2. Leyes empíricas que se pueden aplicar:
   - En los datos: *"La esfera se derrite a razón proporcional al área de su superficie"*, es decir, *"el volumen de la esfera varía a razón proporcional al área de su superficie"*.
   - La variación de volumen es la derivada de V con respecto al tiempo: $\dfrac{dV}{dt}$.
   - Expresión de la ley en forma matemática: $\dfrac{dV}{dt} = k\,4\pi r^2$,

     r es el radio de la esfera, $r = r(t)$.

3. Planteamiento de la ecuación:

   Planteamos la ecuación con la incógnita inicial V:

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3 \rightarrow \quad \left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{1/3} = r.$$

   Sustituyendo:

$$\frac{dV}{dt} = k4\pi\left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{2/3} = k(4\pi)^{1/3}3^{2/3}V^{2/3}.$$

   Ecuación diferencial que proporciona el volumen en cualquier tiempo t.

1.3.2. Reacciones químicas

En cinética de las reacciones, en lo que se está interesado es en la evolución de éstas con el transcurso del tiempo. Como las velocidades son derivadas con respecto al tiempo, no es de extrañar que la cinética de las reacciones se modelen mediante ecuaciones diferenciales. Un ejemplo de tales reacciones son las reacciones bimoleculares.

Sea la reacción bimolecular elemental

$$A + B \rightarrow P,$$

en la que dos sustancias (reactantes) se unen para formar una tercera (producto). Hallar una expresión para las distintas concentraciones en cualquier unidad de tiempo.

1. Variables.

   Las incógnitas son las concentraciones de los reactantes y el producto (son funciones del tiempo): $[A]$, $[B]$, $[P]$.

2. Leyes empíricas que se pueden aplicar:

   La velocidad de reacción depende de las concentración de los reactantes y quizás del producto. La *ley de la velocidad de reacción* es la formulación de esa dependencia:

$$velocidad = \frac{d[P]}{dt} = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt}$$

   Para las reacciones elementales existe un principio básico, la *ley de acción de masas:* la velocidad de una reacción elemental es proporcional al producto de las concentraciones de los reactantes:

$$velocidad = k[A][B]$$

   La ley de acción de masas está basada en la suposición de que reacciones elementales ocurren cuando las moléculas de los reactantes están en contacto simultáneamente. Por tanto, a mayor concentración, mayor velocidad.

   El coeficiente k es la constante de la reacción y se toma siempre positiva.

   Por último la *ley de conservación:* la suma de las concentraciones de los productos y de cualquiera de los reactantes permanece constante a lo largo de la reacción.

$$[B] + [P] = B_0 + P_0$$
$$[A] + [P] = A_0 + P_0,$$

   $A_0,\ B_0,\ P_0$ son las concentraciones iniciales de cada uno de los componentes.

3. Planteamiento de la ecuación.

   Igualando velocidades:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$$
$$\frac{d[B]}{dt} = -k[A][B]$$
$$\frac{d[P]}{dt} = k[A][B].$$

   Por último, aplicando la ley de conservación, se pueden eliminar variables para obtener la ecuación de $[A]$:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]([A] - A_0 + B_0).$$

   De la misma forma se obtienen las ecuaciones que proporcionan las demás concentraciones:

$$\frac{d[B]}{dt} = -k[B]([B] - B_0 + A_0),$$
$$\frac{d[C]}{dt} = k(A_0 + C_0 - [C])(B_0 + C_0 - [C]).$$

1.4. Condiciones adicionales

En el proceso de modelado, con bastante frecuencia, aparecen condiciones adicionales que se deben añadir al problema que se plantea. En el caso de las reacciones del ejemplo anterior, las concentraciones iniciales de los elementos son datos del problema que se consideran en la formulación de éste.

1.4.1. Ejemplo: enfriamientos

Al sacar un pastel del horno, su temperatura es de $300^o F$. Tres minutos después su temperatura es de $200^o F$. Estamos interesados en saber la temperatura del pastel en cualquier momento, siendo la temperatura ambiente de $70^o F$.

1. Variables. La temperatura T es función del tiempo t.
2. Ley de Newton del enfriamiento: *la rapidez con que la temperatura cambia es proporcional a la diferencia entre la temperatura del cuerpo y la temperatura constante del medio que lo rodea.*
3. La ecuación: $\dfrac{dT}{dt} = k(T - 70)$.
4. Condiciones adicionales : $T(0) = 300, \quad T(3) = 200$.

1.5. Métodos para resolver o analizar ecuaciones diferenciales

Una vez que tenemos formulado el modelo matemático, el problema está en resolverlo, que en la mayoría de las ocasiones no es fácil. Los métodos de estudio de modelos los podemos resumir en:

- *Método analítico*: método de búsqueda de soluciones a las ecuaciones diferenciales.
- *Análisis cualitativo:* se utiliza la ecuación diferencial como fuente de información de las propiedades de las posibles soluciones.
- *Análisis numérico:* aproximación a los valores de la solución.

Ejercicios del capítulo

1. Sea la reacción elemental unimolecular

$$A \to P.$$

Plantea el modelo matemático que da la concentración de A y de P en cualquier unidad de tiempo.

2. Una reacción bimolecular elemental. Una molécula de hidrógeno H_2 reacciona con una de yodo I_2 y forman ácido de halógeno HI. La reacción es

$$H_2 + I_2 \to 2HI.$$

Plantea las ecuaciones diferenciales que dan la concentración de cada componente y la del producto en cualquier unidad de tiempo.

3. Radioactividad. El isótopo de carbono C^{14} se transforma en nitrógeno ordinario N^{14} emitiendo un electrón en el proceso. Plantea la ecuación del modelo.

4. El hierro Fe y el oxígeno O_2 molecular reaccionan cuando se calientan para formar óxido de hierro negro Fe_3O_4:

$$3Fe + 2O_2 \to Fe_3O_4.$$

Formula las ecuaciones correspondientes a las distintas concentraciones en cualquier unidad de tiempo.

5. Un granizo esférico se derrite a razón proporcional a su área superficial. Se supone que tenía originalmente un radio de $\dfrac{1}{8}$ de pulgada y 40 minutos después su radio medía $\dfrac{1}{24}$ de pulgada.

   a) Obtén una expresión para el radio del granizo en cualquier tiempo t.

   b) Obtén expresiones del área superficial y el volumen del granizo en cualquier tiempo t.

6. En el proceso de conservación de alimentos, el azúcar de caña experimenta una inversión convirtiéndose en una mezcla de dos azúcares más sencillos: glucosa y fructosa. En solución diluida, la tasa de inversión es proporcional a la concentración de azúcar no alterado. Si la concentración es de 1/50 al principio y de 1/200 después de tres horas, plantea la el problema que proporciona la concentración de azúcar no alterado en cualquier momento.

7. Un cultivo tiene inicialmente una cantidad determinada de bacterias. En una hora, el número de bacterias medido es (3/2) de la cantidad inicial. Si la rapidez de multiplicación es proporcional al número de bacterias presentes, plantea el modelo que proporciona el tiempo necesario para que el número de bacterias se triplique.

8. Un reactor transforma el uranio 238, que es relativamente estable, en el isótopo plutonio 239. Después de 15 años se determina que 0,043 % de la cantidad inicial A_0 de plutonio se ha desintegrado. Plantea el modelo que da la semivida de este isótopo si la rapidez de desintegración es proporcional a la cantidad restante.

9. Un policía descubre el cuerpo de un profesor de ecuaciones diferenciales. Para resolver el crimen es decisivo determinar cuándo se cometió el homicidio. El forense llega al medio día y de inmediato observa que la temperatura del cuerpo es de 94.6 grados Fahrenheit. Espera una hora y observa que la temperatura del cuerpo ha disminuido a 93.4 grados Fharenheit. Asimismo, observa que la temperatura de la habitación es constante a 70 grados F. Suponiendo que la víctima estaba normal (al menos en cuanto a temperatura se refiere) hasta el momento de su fallecimiento, plantea la ecuación y los datos adicionales que nos de la hora a la que se cometió el crimen.