

Estabilidade de Reações Químicas Homogêneas Reversíveis de Primeira Ordem: uma análise generalizada

Luís Miguel dos Santos Gomes¹

Nemésio Matos de Oliveira Neto²

Resumo

Este trabalho analisa a cinética da reação química homogênea e reversível $A \rightleftharpoons B$ por meio de equações diferenciais ordinárias. O modelo baseado na Lei da Ação das Massas permite determinar pontos de equilíbrio, autovalores e estabilidade do sistema. Mostra-se que, para reações $k, k' > 0$, existe equilíbrio estável na reta $[A] + [B] = [C]$, com um autovalor nulo e outro negativo. Também foi implementada simulação computacional em Python, com visualização gráfica das trajetórias e impacto dos parâmetros. O estudo destaca a relevância das EDOs e da análise de estabilidade para compreender sistemas químicos e suas aplicações em processos industriais e ambientais.

Palavras-chave: EDOs ; Lei da Ação das Massas; Reação Química

Stability of First-Order Homogeneous Reversible Chemical Reactions: A Generalized Analysis

Abstract

This work analyzes the kinetics of the homogeneous and reversible chemical reaction $A \rightleftharpoons B$ using ordinary differential equations. The model, based on the Law of Mass Action, allows the determination of equilibrium points, eigenvalues, and system stability. It is shown that for reactions $k, k' > 0$, there is a stable equilibrium along the line $[A] + [B] = [C]$, with one zero eigenvalue and one negative eigenvalue. A computational simulation in Python was also implemented, with graphical visualization of trajectories and the impact of parameters. The study highlights the relevance of ODEs and stability analysis for understanding chemical systems and their applications in industrial and environmental processes.

Keywords: ODEs ; Law of Mass Action; Chemical Reaction

Introdução

A compreensão da cinética de reações químicas é essencial em áreas como modelagem climática, processos industriais, tratamento de águas e deterioração de alimentos. Nesse contexto, as equações diferenciais ordinárias (EDO) destacam-se como ferramenta central para descrever a evolução temporal das concentrações, a partir das leis da cinética química. Este estudo analisa, em um sistema fechado, a reação homogênea e reversível $A \rightleftharpoons B$, na qual os produtos podem regenerar os reagentes, estabelecendo equilíbrio dinâmico.

¹ Aluno da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - Campus Jequié

² Prof. Dr. da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - Campus Jequié

Materiais e Métodos

Esta pesquisa foi realizada no Laboratório de Física II e no Laboratório de Informática II da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB). Foram utilizados softwares de código aberto e de livre acesso, além do sistema operacional Windows 11 e do ambiente de programação PyCharm, com a linguagem Python para geração de gráficos, retratos de fase e campos de direções.

As simulações foram executadas em um Asus VivoBook GO 14/15, equipado com processador AMD Ryzen 7000 Series, 8 GB de memória RAM, SSD de 256 GB e placa gráfica integrada, o que garantiu desempenho adequado para os processamentos necessários.

O sistema estudado corresponde a uma reação química homogênea, elementar, de primeira ordem e reversível, envolvendo as espécies A e B, que atuam como reagente e produto, respectivamente. A modelagem matemática baseia-se na Lei da Ação das Massas, que relaciona as taxas de consumo e formação das espécies químicas às suas concentrações.

O processo ocorre em um sistema fechado, no qual a soma das concentrações das espécies permanece constante ao longo do tempo, refletindo a conservação da massa total. Dessa forma, as concentrações iniciais coincidem com a soma das concentrações no estado de equilíbrio.

A partir do modelo matemático formulado, procede-se ao estudo do comportamento das soluções de equilíbrio por meio da análise de estabilidade linear. Esse método envolve a determinação dos pontos de equilíbrio, o cálculo dos autovalores e autovetores da matriz associada e, em seguida, a interpretação dos resultados para caracterizar a reação quanto à estabilidade assintótica, instabilidade ou possíveis oscilações.

Por fim, realiza-se uma análise geométrica e gráfica, com a representação de campos de direções e retratos de fase, permitindo visualizar a evolução temporal do sistema e confirmar as conclusões obtidas pela análise algébrica.

Concentrações Finais via Pontos de Equilíbrio

Para determinar os pontos de equilíbrio do sistema, impõe-se que as taxas de variação temporal das concentrações sejam nulas. Esse procedimento conduz a um sistema linear no qual se observa uma relação entre as constantes cinéticas e as concentrações no equilíbrio. A razão entre essas constantes define a chamada

constante de equilíbrio químico, a partir da qual as concentrações finais podem ser expressas em função das condições iniciais, respeitando a conservação da massa total no sistema fechado.

Autovalores e Interpretação

A análise da matriz associada ao sistema mostra que os autovalores encontrados são zero e negativo. O autovalor nulo corresponde a uma direção neutra, indicando que perturbações levam o sistema a novas condições de equilíbrio ao longo da reta de conservação da massa. O autovalor negativo está associado a uma direção de estabilidade, garantindo que, diante de perturbações, as soluções retornem assintoticamente ao ponto de equilíbrio.

Os campos de direções obtidos em simulação ilustram o comportamento dinâmico do sistema em função da relação entre as constantes cinéticas. A reta que representa a soma constante das concentrações confina as trajetórias a uma linha no plano de fase. O ponto de equilíbrio é a interseção dessa reta com a direção definida pelos autovetores do sistema.

Dessa forma, independentemente dos valores das constantes positivas, o sistema converge para um ponto de equilíbrio estável na reta de conservação da massa. A análise revela três situações distintas: quando a constante da reação direta é maior, o equilíbrio é deslocado em favor do produto; quando a constante da reação inversa prevalece, favorece-se o reagente; e quando ambas são iguais, ocorre um equilíbrio simétrico, com concentrações iguais de reagente e produto.

Considerações Finais

O estudo da estabilidade linear aplicada a sistemas de reações químicas mostrou-se uma ferramenta poderosa para compreender o comportamento dinâmico da reação reversível analisada. A utilização de conceitos de estabilidade de sistemas lineares revelou grande potencial tanto para a interpretação dos resultados em cinética química quanto para a compreensão qualitativa das soluções das equações diferenciais ordinárias.

Além da relevância científica, esta investigação também possui valor pedagógico, pois pode auxiliar no ensino de disciplinas de Matemática que envolvem equações diferenciais, bem como em cursos de Química que utilizam cálculo e modelagem matemática, oferecendo um exemplo concreto e interdisciplinar de aplicação dos conceitos.

Como perspectiva, propõe-se ampliar o estudo para reações mais complexas, com equações diferenciais não lineares. Nesses casos, será necessário empregar ferramentas adicionais, como a linearização do sistema, o cálculo da matriz Jacobiana e, possivelmente, métodos avançados de análise, incluindo os expoentes de Lyapunov, para avaliar estabilidade e potenciais comportamentos caóticos.

Figuras

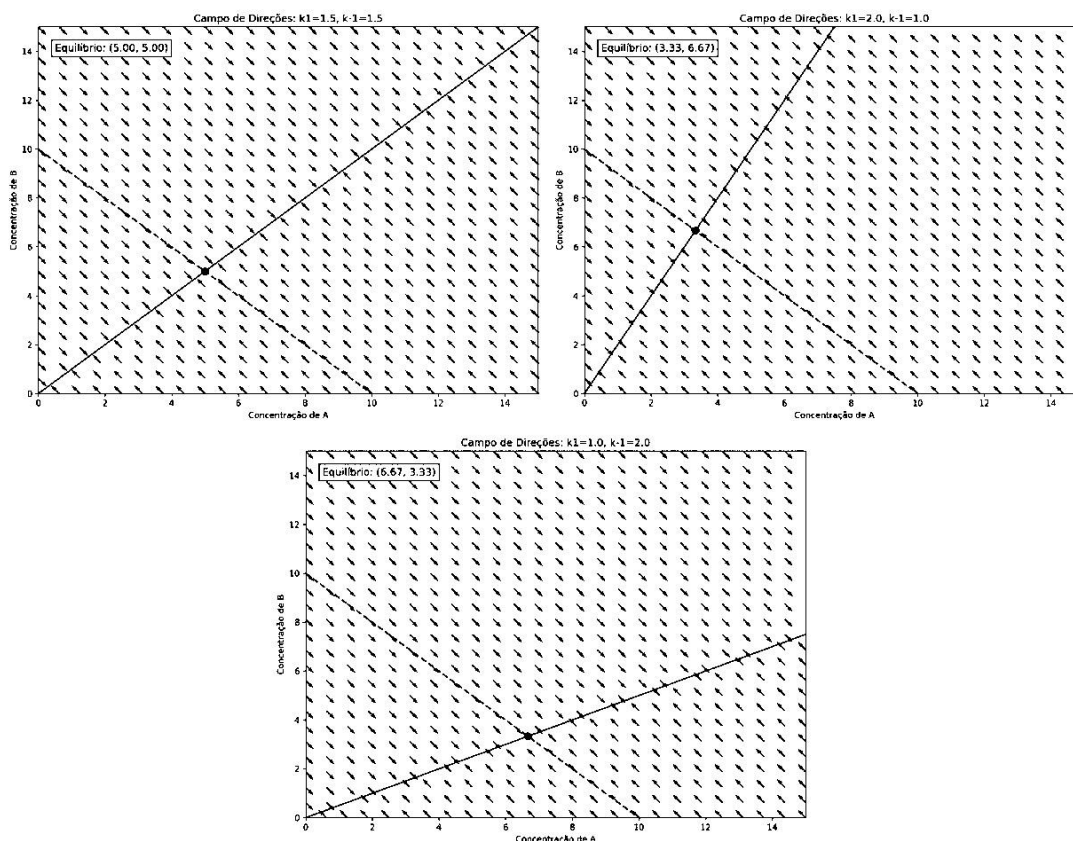


Figura 1: Campos de direções para diferentes k, k'

Agradecimentos

Agradeço à Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB) pela oportunidade de realização da Iniciação Científica, pelo espaço acadêmico proporcionado e pelo apoio institucional que foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Referências Bibliográficas

1. **AGUIAR, Leandro Gonçalves de.** *Cinética Química Aplicada*. 11. ed. Lorena: Universidade de São Paulo, Escola de Engenharia de Lorena, [2025].

2. **BOYCE, William E.; DIPRIMA, Richard C.** *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017.
3. **CARNEIRO, Wanderson dos Santos.** Modelagem cinética do modelo de Silva e Cerqueira (múltiplos substratos) utilizando a técnica de otimização meta-heurística Particle Swarm Optimization (PSO) em linguagem Python. 2022. Monografia (Graduação) — Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2022.
4. **FERREIRA, Luanne E. M. et al.** Uma breve revisão sobre a catálise por átomos isolados: conceitos e aplicações. *Química Nova*, São Paulo, v. 45, n. 2, 2022.
5. **PRENTICE, Carlos; SAINZ, Ricardo Lemos.** Cinética de deterioração apresentada por filés de carpa–capim (*Ctenopharyngodon idella*) embalados a vácuo sob diferentes condições de refrigeração. *Ciência e Tecnologia de Alimentos*, Campinas, v. 25, n. 1, p. 127-131, jan./mar. 2005.
6. **SOPHOCLEOUS, Kyriacos; CHRISTOUDIAS, Theo.** Reduced-Precision Chemical Kinetics in Atmospheric Models. *Atmosphere*, Basel, v. 13, p. 1418, 2022.
7. **ZHANG, Wei; CHEN, Shuai; CHEN, Zhaohui; LI, Zehong; ZHOU, Mayi; MA, Zhenzhu.** A review of chemical kinetic mechanisms and after-treatment of amino fuel combustion. *Science of The Total Environment*, Amsterdam, v. 959, p. 178220, 10 jan. 2025.

