2. MODELOS DINÁMICOS EN CONDICIONES DE MEZCLA COMPLETA

1

Modelos:

- Dinámicos: vamos a estudiar su variación en el tiempo, por lo tanto, nos servirán para la simulación y el control
- Mezcla completa: esta condición ideal puede estar bastante próxima a la realidad en muchos casos prácticos, p.ej., cuando hay un agitador, cuando hay una corriente gaseosa que mezcla un líquido, etc. Desde el punto de vista matemático simplifica notablemente las ecuaciones que son EDO, porque las variables solo cambian en el tiempo y no en el espacio.
- En principio consideramos sistemas *pseudohomogéneos*. Esto en general implica despreciar los efectos de resistencia a la transferencia de masa entre las fases. Pero reducen el número de variables y ecuaciones.

2

Balance de masa:

$$\begin{pmatrix} variación\ en \\ el\ tiempo\ de \\ la\ masa\ del \\ componente \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} masa\ del \\ componente \\ que\ entra \\ al\ rector \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} masa\ del \\ componente \\ que\ sale \\ del\ reactor \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} masa\ del \\ componente \\ que\ se\ produce\ [+] \\ o\ consume\ [-] \\ por\ reacción \end{pmatrix}$$

Para un componente de concentración C $\frac{d(VC)}{dt} = v_{in}C_{in} - v_{out}C_{out} \pm Vr$

Hipótesis de mezcla completa: $V\frac{dC}{dt} - C\frac{dV}{dt} = v_{in}C_{in} - v_{out}C \pm Vr$

Si la densidad es constante $\frac{dV}{dt} = v_{in} - v_{out}$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{v_{in}}{V}C_{in} - \frac{v_{in}}{V}C \pm r$$

O bien

$$\frac{dC}{dt} = DC_{in} - DC \pm r$$

siendo $D = v_{in}/V$ la tasa de dilución

3

Un modelo biológico simple: $S \rightarrow X$

Supongamos la velocidad de formación de nuevas células es proporcional a la cantidad de células;

$$r_X = \mu X$$

Sea Y la relación entre la velocidad de formación de células y la velocidad de consumo de sustrato y asumamos que se mantiene constante.
Supongamos además que no hay células en la corriente de entrada.

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$
$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

4

Representación en variables de estado ("State - space models")

En forma general un modelo dinámico $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})$

donde $\boldsymbol{x}$ es el vector de variables de estado y $\boldsymbol{u}$ el vector de variables de entrada. Cuando la función $\boldsymbol{f}$ es lineal tenemos el subconjunto de los **modelos lineales**.

La formulación de modelos lineales en variables de estado es:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{Ax} + \boldsymbol{Bu} \\ \boldsymbol{y} &= \boldsymbol{Cx} + \boldsymbol{Du} \end{aligned}}$$

donde $\boldsymbol{y}$ es el vector de variables de salida y $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$ y $\boldsymbol{D}$ son matrices. En particular $\boldsymbol{A}$ es la matriz jacobiana.

5

Linealización de modelos no lineales

Ejemplo en una variable: $\frac{dx}{dt} = f(x)$

Expansión por Taylor en torno al punto de estado estacionario (x_s):

$$f(x) = f(x_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s}(x - x_s) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x_s}(x - x_s)^2 + \ldots$$

Despreciando los términos de mayor orden $f(x) \approx f(x_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s}(x - x_s)$

Por ser estado estacionario $f(x_s) = 0$, entonces $\frac{dx}{dt} = \frac{d(x - x_s)}{dt} \approx \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s}(x - x_s)$

O definiendo la variable desviación $x' = x - x_s$

$$\frac{dx'}{dt} = \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s} x'$$

$$\boxed{\frac{dx'}{dt} = \alpha\, x'}$$

6

Linealización de modelos no lineales

Ejemplo con una variable de estado y una de entrada: $\dot{x} = \frac{dx}{dt} = f(x,u)$

Expansión por Taylor en torno al punto de estado estacionario (x_s, u_s):

$$\dot{x} = f(x_s,u_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s,u_s}(x-x_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{x_s,u_s}(u-u_s) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x_s}(x-x_s)^2 +$$

$$+ \left.\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial u}\right|_{x_s}(x-x_s)(u-u_2) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right|_{x_s}(u-u_s)^2 + \ldots$$

Despreciando los términos de mayor orden $\dot{x} \approx f(x_s,u_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s,u_s}(x-x_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{x_s,u_s}(u-u_s)$

Por ser estado estacionario $f(x_s, u_s) = 0$, entonces $\frac{d(x-x_s)}{dt} \approx \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s,u_s}(x-x_s) + \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{x_s,u_s}(u-u_s)$

O definiendo la variable desviación $x' = x - x_s$ y $u' = u - u_s$

$$\frac{dx'}{dt} \approx \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_s,u_s} x' + \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{x_s,u_s} u'$$

$$\boxed{\frac{dx'}{dt} = a\ x' + b\ u'}$$

7

En forma general

Si se tiene $\boldsymbol{x}$ el vector de n variables de estado, $\boldsymbol{u}$ el vector de m variables de entrada e $\boldsymbol{y}$ el vector de r variables de salida

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_1,\ldots,x_n,u_1,\ldots,u_m) \\ &\ \ \vdots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_1,\ldots,x_n,u_1,\ldots,u_m) \\ y_1 &= g_1(x_1,\ldots,x_n,u_1,\ldots,u_m) \\ &\ \ \vdots \\ y_r &= g_r(x_1,\ldots,x_n,u_1,\ldots,u_m) \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{\mathrm{x}} &= \mathrm{f}(\mathrm{x},\mathrm{u}) \\ \mathrm{y} &= \mathrm{g}(\mathrm{x},\mathrm{u}) \end{aligned}$$

Para linealizar se definen las matrices de la siguiente manera:

$$A_{ij} = \left.\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|_{x_s,u_s} \quad B_{ij} = \left.\frac{\partial f_i}{\partial u_j}\right|_{x_s,u_s} \quad C_{ij} = \left.\frac{\partial g_i}{\partial x_j}\right|_{x_s,u_s} \quad D_{ij} = \left.\frac{\partial g_i}{\partial u_j}\right|_{x_s,u_s}$$

Si anotamos con ' las variables desviación $\dot{x}' = Ax' + Bu'$

$y' = Cx' + Du'$

Muchas veces las variables de salida no son función de las de entrada, ***D* = 0**

8

Solución para el caso donde no hay cambio en las entradas ("zero-input form", entrada en valores de estado estacionario)

Recordemos, la forma general: $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Ax} + \boldsymbol{Bu}$

Considerando que las entradas se mantienen constantes en el valor de estado estacionario $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Ax}$

De igual forma que para una única variable $\dot{x} = ax$

la solución es $x(t) = e^{at}x(0)$ que es estable si $a < 0$

En forma similar para varias variables $\boldsymbol{x(t)} = \boldsymbol{e^{At}x(0)}$

que es estable si los valores propios ("eigenvalues") de ***A*** son negativos o con parte real negativa (oscilatoria si son complejos).

Para calcular la matriz exponencial, consideremos la matriz ***V*** de vectores propios ("eigenvectors") $\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix}\xi_1 & \xi_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22}\end{bmatrix}$

y la matriz de los valores propios $\Lambda = \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}$ $\quad \mathrm{AV} = \mathrm{V}\Lambda$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\Lambda\boldsymbol{V}^{-1}$$

$$e^{\boldsymbol{A}t} = \boldsymbol{V}\,e^{\Lambda t}\,\boldsymbol{V}^{-1} \qquad e^{\Lambda t} = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t}\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{x(t)} = \boldsymbol{V}\,e^{\Lambda t}\,\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x(0)}$$

9

Si la condición inicial está en la misma dirección del vector propio ξ_i entonces la "velocidad de respuesta" será proporcional al valor propio λ_i

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Ax}$$

Definimos un nuevo vector ***z*** tal que $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V\,z}$

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x}$$

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{V}\ \dot{\boldsymbol{z}}$$

$$\boldsymbol{V}\ \dot{\boldsymbol{z}} = \boldsymbol{AV}\ \boldsymbol{z}$$

$$\dot{\boldsymbol{z}} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{AV}\ \boldsymbol{z}$$

$$\dot{\boldsymbol{z}} = \boldsymbol{\Lambda}\ \boldsymbol{z} \qquad \begin{bmatrix}\dot{z}_1 \\ \dot{z}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2\end{bmatrix} \qquad \begin{aligned}\dot{z}_1 &= \lambda_1 z_1 \\ \dot{z}_2 &= \lambda_2 z_2\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{z}(t) = e^{\Lambda t}\boldsymbol{z}(0) \qquad \begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1(0) \\ z_2(0)\end{bmatrix}$$

si $\boldsymbol{z}(0) = \begin{bmatrix} z_1(0) \\ 0\end{bmatrix}$ $\quad \boldsymbol{z}(t) = \begin{bmatrix} z_1(0)e^{\lambda_1 t} \\ 0\end{bmatrix}$ $\quad \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{V}\ \boldsymbol{z}(t) = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1(t)e^{\lambda_1 t} \\ 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{11}\ z_1(0)e^{\lambda_1 t} \\ v_{21}\ z_1(0)e^{\lambda_1 t}\end{bmatrix}$

Las condiciones iniciales en la dirección del primer vector propio dan la velocidad de respuesta asociada al correspondiente valor

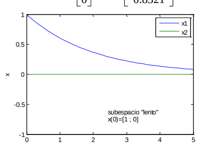
Y similar en la otra dirección

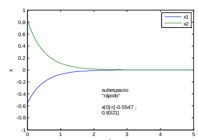
10

Ejemplo: un sistema estable $\quad \begin{aligned}\dot{x}_1 &= -0.5x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 &= -2x_2\end{aligned}$

$\lambda_1 = -0.5 \quad \lambda_2 = -2$ estable

$\xi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0\end{bmatrix} \quad \xi_2 = \begin{bmatrix} -0.5547 \\ 0.8321\end{bmatrix}$



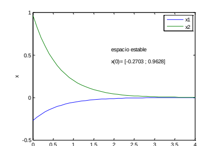


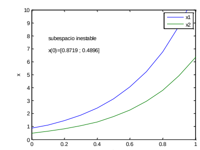
11

Ejemplo: un sistema inestable $\quad \begin{aligned}\dot{x}_1 &= 2x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 &= 2x_1 - x_2\end{aligned}$

$\lambda_1 = -1.5616 \quad \lambda_2 = 2.5616$ inestable

$\xi_1 = \begin{bmatrix} -0.2703 \\ 0.9628\end{bmatrix} \quad \xi_2 = \begin{bmatrix} 0.8719 \\ 0.4896\end{bmatrix}$





12

Solución para el caso general

Forma general: $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Ax} + \boldsymbol{Bu}$

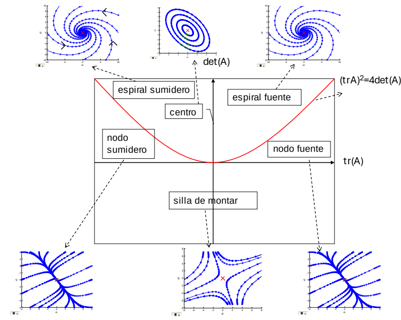
De igual forma que para un única variable $\dot{x} = ax + bu$

la solución es $x(t) = e^{at}x(0) + \left(e^{at} - 1\right)\frac{b}{a}u(0)$ Cuando *u(t) = cte = u(0)*

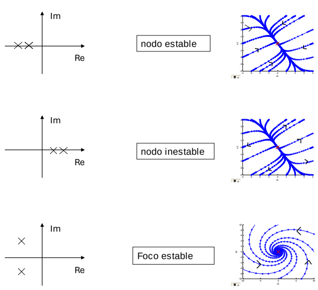
En forma similar para varias variables $\boldsymbol{x(t)} = \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{x(0)} + \boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{u}(0)$

donde $\boldsymbol{P} = e^{\boldsymbol{A}t}$ $\boldsymbol{Q} = \left(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{I}\right)\,\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}$

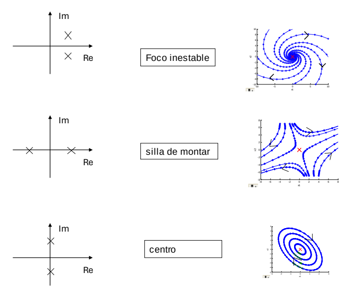
13



14



15



16