5 ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE ORDEN N

Recordemos que muchos de nuestros sistemas (y particularmente todos los que varían en el tiempo) se expresarán como ecuaciones diferenciales. La forma más general de expresar una un sistema será mediante una ecuación diferencial de orden n respecto a la variable de estado y de orden m respecto a la variable de entrada, del tipo

$$a_n(t)\frac{d^n x}{dt^n} + a_{n-1}(t)\frac{d^{n-1}x}{dt^{n-1}} + \ldots + a_1(t)\frac{dx}{dt} + a_0(t)x = b_m(t)\frac{d^m u}{dt^m} + b_{m-1}(t)\frac{d^{m-1}u}{dt^{m-1}} + \ldots + b_1(t)\frac{du}{dt} + b_0(t)u$$

donde x es la variable de estado que varía en el tiempo, u es la variable a manipular y a_i y b_j son los coeficientes o parámetros de la ecuación. En muchos casos estos coeficientes son invariables en el tiempo también y la resolución del sistema es más sencilla.

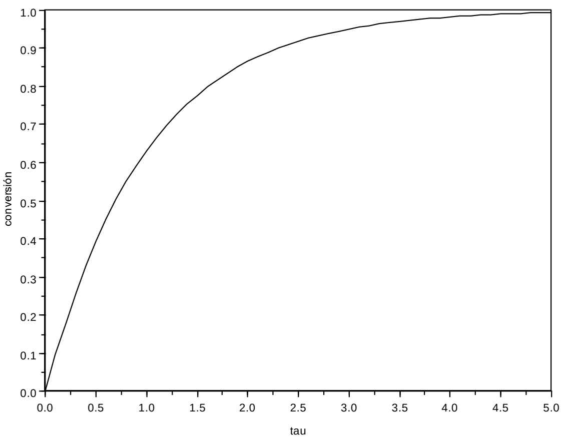
Veamos un ejemplo sencillo: sea un reactor discontinuo donde se llevan a cabo dos reacciones consecutivas $A \rightarrow B \rightarrow C$ ambas de primer orden con constantes cinéticas k_1 y k_2. Las ecuaciones que definen el sistema surgen de los balances de masa:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A$$
$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B$$
$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B$$

Ahora bien, la primera ecuación se integra directamente pues es una ecuación a variables separables.
$$C_A(t) = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

Que se puede escribir en forma adimensional llamando $x = \dfrac{C_{Ao} - C_A}{C_{Ao}}$ $\tau = k_1 t$

$$x = 1 - e^{-\tau}$$



Todas las ecuaciones con ese formato tendrán ese tipo de respuesta dinámica.

La segunda ecuación la podemos escribir de esta manera

$$C_A = \frac{1}{k_1}\frac{dC_B}{dt} + \frac{k_2}{k_1}C_B$$

Y derivando

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{k_1}\frac{d^2C_B}{dt^2} + \frac{k_2}{k_1}\frac{dC_B}{dt}$$

Sustituyendo en la primera ecuación

$$\frac{d^2C_B}{dt^2} + (k_1 + k_2)\frac{dC_B}{dt} + k_1k_2C_B = 0$$

Que es una ecuación diferencial homogénea a coeficientes constantes $a_2\frac{d^2x}{dt^2} + a_1\frac{dx}{dt} + a_0x = 0$

Cuya ecuación característica es $\lambda^2 + (k_1 + k_2)\lambda + k_1k_2 = 0$

$$(\lambda + k_1)(\lambda + k_2) = 0$$

Por lo tanto los valores propios son $\lambda = -k_1$ $\lambda = -k_2$

Y la solución es $C_B(t) = c_1\exp(-k_1t) + c_2\exp(-k_2t)$

Para hallar las constantes se necesita conocer las condiciones iniciales:

$$C_B(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad c_1 = -c_2$$

A su vez $\frac{dC_B(0)}{dt} = k_1C_{Ao}$

Por lo tanto la solución es $C_B(t) = \frac{k_1C_{Ao}}{k_2 - k_1}[\exp(-k_1t) - \exp(-k_2t)]$

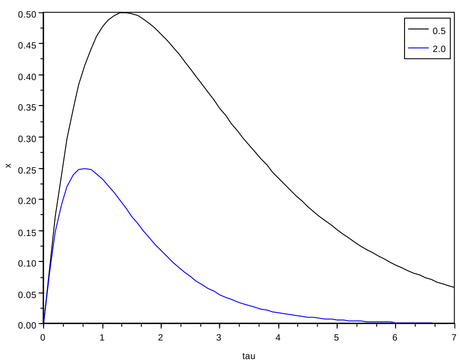
Que se puede escribir en forma adimensional llamando

$$x = \frac{C_B}{C_{Ao}}$$

$$\tau = k_1t$$

$$\alpha = \frac{k_2}{k_1}$$

$$x(\tau) = \frac{1}{\alpha - 1}[\exp(-\tau) - \exp(-\alpha\tau)]$$



Nuevamente, todas las ecuaciones con ese formato tendrán ese tipo de respuesta, en este caso dependiendo del parámetro α. Ver ‘ejem5.1’.

En general para una ecuación diferencial homogénea a coeficientes constantes

$$a_n \frac{d^n x}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} x}{dt^{n-1}} + \ldots + a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = 0$$

Escribimos el polinomio característico $a_n \lambda^n + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \ldots + a_1 \lambda + a_0 = 0$
Las raíces del polinomio característico (o *polos* en la terminología de control) son los valores propios (‘eigenvalues’) de la ecuación.

Si las raíces son distintas entonces la solución es de la forma

$$x(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t} + \ldots + c_n e^{\lambda_n t}$$

Por ejemplo para la ecuación vista anteriormente $\frac{dC_A}{dt} + k_1 C_A = 0$

la ecuación caracterísitca es $\lambda + k_1 = 0$ con valor propio $\lambda = -k_1$ con lo cual la solución es $C_A(t) = c_1 e^{-k_1 t}$ y conociendo la condición inicial se obtiene $C_A(t) = C_{A0} e^{-k_1 t}$.

Por ejemplo para la ecuación

$$\frac{d^2 C_B}{dt^2} + (k_1 + k_2) \frac{dC_B}{dt} + k_1 k_2 C_B = 0$$

Cuya ecuación característica es $\lambda^2 + (k_1 + k_2)\lambda + k_1 k_2 = (\lambda + k_1)(\lambda + k_2) = 0$ con valores propios $\lambda_1 = -k_1$, $\lambda_2 = -k_2$ La solución es $C_B(t) = c_1 e^{-k_1 t} + c_2 e^{-k_2 t}$. Con la condición inicial $C_B(0) = 0$ se obtiene $c_1 = -c_2$. Puede observarse también que a $t = 0$ $\frac{dC_B(0)}{dt} = k_1 C_{A0}$ por lo que tomando la derivada de C_B y sustituyendo las condiciones iniciales se llega a

$$C_B(t) = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t} \right)$$

Cuando se tienen raíces repetidas la solución es de la forma

$$\left(c_i + c_{i+1} t + c_{i+2} t^2 + \ldots + c_{i+r-1} t^{r-1} \right) e^{\lambda_i t}$$

Por ejemplo si en el caso anterior $k_1 = k_2 = k$

$$\frac{d^2 C_B}{dt^2} + 2k \frac{dC_B}{dt} + k^2 C_B = 0$$

$\lambda_1 = \lambda_2 = -k$ $\qquad$ $C_B(t) = (c_1 + c_2 t) e^{-kt}$

Para $t = 0$ $\quad c_1 = C_B(0) = 0$

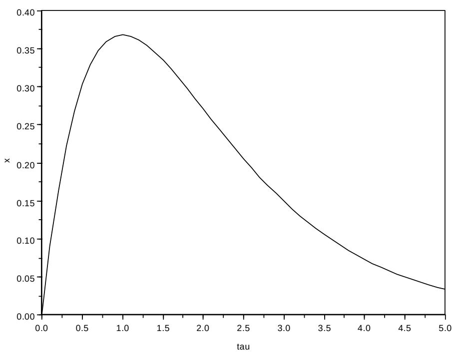
Derivando
$$\frac{dC_B(t)}{dt} = c_2 e^{-kt} - c_2 k\ t\ e^{-kt}$$

Para $t = 0$
$$c_2 = \left.\frac{dC_B}{dt}\right|_{t=0} = kC_{A0}$$

Por lo tanto
$$C_B(t) = kC_{A0} t\ e^{-kt}$$

Que escrito en forma adimensional equivale a

$$x(t) = \tau \exp(-\tau)$$



Cuando las raíces son <u>complejas</u> la solución general es de la forma
$$x(t) = e^{\lambda_i t}\left[A \cos \lambda_i t + j\ B \sin \lambda_i t\right]$$

Y por lo tanto la solución oscila.

Por ejemplo sea la ecuación
$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{dx}{dt} + x = 0$$

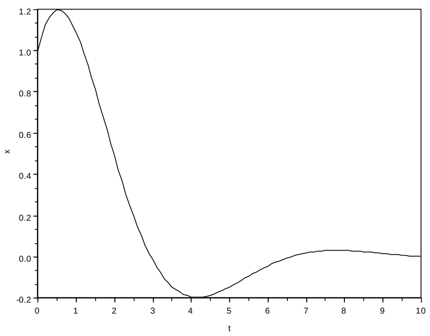
Cuya ecuación característica es $\lambda^2 + \lambda + 1 = 0$ con raíces $\lambda = -\frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} j$

La solución sería
$$x(t) = c_1 \exp\left[\left(-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} j\right)t\right] + c_2 \exp\left[\left(-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} j\right)t\right]$$

Que considerando la identidad de Euler $e^{j\theta} = \cos\theta + j \sin\theta$ y reagrupando
$$x(t) = e^{-t/2}\left[(c_1 + c_2)\cos\frac{\sqrt{3}}{2} t + (c_1 - c_2) j \sin\frac{\sqrt{3}}{2} t\right]$$

y llamando $c_3 = c_1 + c_2$ y $c_4 = c_1 - c_2$
$$x(t) = e^{-t/2}\left[c_3 \cos\frac{\sqrt{3}}{2} t + c_4 j \sin\frac{\sqrt{3}}{2} t\right]$$

por ejemplo con *x*(0)=1 y *x'*(0)=1



Es importante observar que los polos complejos están asociados a respuestas oscilantes en el tiempo.

Para las ecuaciones no homogéneas se sigue el siguiente procedimiento:

1) Resolver la ecuación homogénea
2) Determinar los coeficientes de una función particular de prueba (escogida según la función del lado derecho)
3) Combinar las dos soluciones

Por ejemplo el sistema $\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \qquad C_A(t) = C_{A0} e^{-k_1 t}$ puede ser considerado como una ecuación diferencial ordinaria no homogénea:

$$\frac{dC_B}{dt} + k_2 C_B = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t}$$

La solución homogénea es $x_H(t) = c_1 e^{-k_2 t}$

La función de prueba, según el formato del lado derecho es $x_P(t) = c_2 e^{-k_1 t}$

Sustituyéndola en la ecuación $-k_1 c_2 e^{-k_1 t} + k_2 c_2 e^{-k_1 t} = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t}$

$$\Rightarrow \quad c_2 = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}$$

Combinando las dos soluciones

$$x(t) = x_H(t) + x_P(t)$$

$$C_B(t) = c_1 e^{-k_2 t} + \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t}$$

Si en condiciones iniciales $C_{B0} = 0$

$$c_1 = -\frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}$$

Y por lo tanto

$$C_B(t) = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t} \right)$$

que, obviamente, coincide con el resultado obtenido anteriormente.

Para el caso de ecuaciones con coeficientes que varían en el tiempo la resolución analítica suele ser más engorrosa. Por ejemplo para las ecuaciones de la forma

$$\frac{dx}{dt} + p(t)x = q(t)$$

una manera de resolverlas es utilizar un factor de integración $\mu(t) = \exp\left[\int p(t)dt\right]$

Multiplicando ambos lados de la igualdad

$$\mu(t)\frac{dx}{dt} + \mu(t)p(t)x = \mu(t)q(t)$$

$$\exp\left[\int p(t)dt\right]\frac{dx}{dt} + \exp\left[\int p(t)dt\right]p(t)x = \exp\left[\int p(t)dt\right]q(t)$$

$$\frac{d}{dt}\left\{x(t)\exp\left[\int p(t)dt\right]\right\} = \exp\left[\int p(t)dt\right]q(t)$$

Integrando $$x(t)\exp\left[\int p(t)dt\right] = \int q(t)\exp\left[\int p(t)dt\right]dt + C$$

Y usando las condiciones iniciales

$$x(t) = \exp\left[-\int p(t)dt\right]\left\{x(0) + \int q(t)\exp\left[\int p(t)dt\right]dt\right\}$$

Veamos un ejemplo: Reactor Semi-Batch con reacción A $\rightarrow$B y caudal de entrada constante *v* (sin salida) (densidad constante). Las ecuaciones del modelo son

$$\frac{dV}{dt} = v$$

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = -kVC_A + vC_{Ain}$$

Expandiendo el lado derecho $$\frac{d(VC_A)}{dt} = C_A\frac{dV}{dt} + V\frac{dC_A}{dt}$$

$$\frac{dC_A}{dt} + \left[\frac{v}{V} + k\right]C_A = \frac{v}{V}C_{Ain}$$

Si el flujo es constante y el volumen inicial es 0, $V = vt$

$$\frac{dC_A}{dt} + \left[\frac{1}{t} + k\right]C_A = \frac{1}{t}C_{Ain}$$

Que es de la forma deseada. De la consideración del factor de integración $\mu(t) = \exp\left[\int p(t)dt\right]$ surge

$$\int p(t)dt = \int\left(\frac{1}{t} + k\right)dt = \ln t + kt + c_1$$

$$\exp\left[\int p(t)dt\right] = \exp[\ln t + kt + c_1] = \exp[\ln t]\exp[kt]\exp[c_1] = c_2 t\exp[kt]$$

y multiplicando a ambos lados de la ecuación

$$t\exp[kt]\frac{dC_A}{dt}+\exp[kt][1+kt]C_A=\exp[kt]C_{Ain}$$

pero

$$t\exp[kt]\frac{dC_A}{dt}+\exp[kt][1+kt]C_A=\frac{d[t\exp[kt]C_A]}{dt}$$

integrando

$$\exp[kt]C_A t=\frac{C_{Ain}}{k}[\exp[kt]-1]$$

y finalmente

$$C_A=\frac{C_{Ain}}{kt}[1-\exp[-kt]]$$

Véase otra forma (numérica) de resolver el problema en 'ejem5.2'.

La estabilidad de las soluciones debe entenderse en el sentido de que converja hacia un valor determinado (el punto de trabajo, de estado estacionario). En general, como vimos del formato general de las soluciones, en las que se presentan términos exponenciales, debe cumplirse que los valores propios (o polos) sean negativos (o mejor, de parte real negativa). Hallar los valores propios es sencillo para ecuaciones de primer o segundo grado pero puede complicarse para sistemas de órdenes superiores. Eventualmente hay que recurrir a métodos numéricos.

Un método alternativo es el propuesto por Routh: sea la ecuación

$$a_n\lambda^n+a_{n-1}\lambda^{n-1}+\ldots+a_1\lambda+a_0=0 \qquad a_n>0$$

La condición *necesaria* para la estabilidad es que todos los coeficientes sean positivos: $a_k>0$ para todo k

Para la condición *suficiente* es necesario construir el "arreglo de Routh":

$$\begin{array}{cccc} a_n & a_{n-2} & a_{n-4} & \ldots \\ a_{n-1} & a_{n-3} & a_{n-5} & \ldots \\ b_1 & b_2 & b_3 & \ldots \\ c_1 & c_2 & \ldots & \\ . & . & & \end{array}$$

$$b_1=\frac{a_{n-1}a_{n-2}-a_n a_{n-3}}{a_{n-1}} \qquad b_2=\frac{a_{n-1}a_{n-4}-a_n a_{n-5}}{a_{n-1}}$$

$$c_1=\frac{b_1 a_{n-3}-a_{n-1}b_2}{b_1} \qquad c_2=\frac{b_1 a_{n-5}-a_{n-1}b_3}{b_1}$$

Etc. Y debe cumplirse que todos los elementos de la primera columna sean positivos.