



PLANTEAMIENTO DE UNA MÉTRICA DE LA REPRESENTACIÓN LINEALIZADA DE UN SISTEMA NO LINEAL. APLICACIÓN PARA REACTORES (BIO)QUÍMICOS

APPROACH OF A MEASUREMENT OF LINEARIZED REPRESENTATION OF A NONLINEAR SYSTEM. APPLICATION TO (BIO)CHEMICAL REACTORS

J. Carrillo-Ahumada^{1*}, D.E. Páramo-Calderón², A. Aparicio-Saguilán²,
G.C. Rodríguez-Jimenes³ y M.A. García-Alvarado³

¹Instituto de Química Aplicada. Universidad del Papaloapan. Circuito Central 200, colonia Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. 68301, México.

²Instituto de Biotecnología. Universidad del Papaloapan. Circuito Central 200, colonia Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. 68301, México.

³Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica. Instituto Tecnológico de Veracruz. Av. Miguel Ángel de Quevedo 2779, Veracruz, Ver. 91860, México.

Recibido 12 de Diciembre de 2013; Aceptado 16 de Marzo de 2014

Resumen

Se plantea un métrica para determinar la representación de un sistema linealizado con respecto al sistema no lineal. Esta métrica esta basada en la expansión en series de Taylor de un sistema no lineal y fue aplicada para tres reactores (bio)químicos entre ellos el biorreactor de Cholette con multiplicidad de entradas, salidas y de estados estacionarios; un biorreactor con reacción enzimática y un reactor químico, aunque puede aplicarse para cualquier sistema no lineal. Se considera que el cociente de las matrices de primeras y segundas derivadas debe ser menor a la matriz de desviación de los valores nominales. Con este análisis, es posible determinar la influencia de cada parámetro en el sistema no lineal de estudio y su aplicación se encuentra en simulación y control.

Palabras clave: sistemas no lineales, linealización, series de Taylor, reactores (bio)químicos.

Abstract

A new criterion of measurement was proposed to determine the representation of a linearized system with respect to nonlinear system. This criterion is based on the Taylor series expansion of nonlinear system and was applied to three (bio)chemical reactors including the Cholette's bioreactor with multiple inputs, outputs and steady states; a reactor with enzymatic reaction and a chemical reactor. Current approach considers that matrix elements resulting from left division of matrices containing second-order and first-order partial derivatives should be smaller than deviations from the nominal values. With this analysis, is possible to determine the influence of each bifurcation parameter on the nonlinear system for simulation and control applications.

Keywords: nonlinear systems, linearization, Taylor series, (bio)chemical reactors.

*J. Carrillo-Ahumada. E-mail: jcarrillo@unpa.edu.mx; jesus carrillo18@yahoo.com
Tel. 01 (287) 8 75 92 40 Ext. 230

1 Introducción

Un sistema no lineal puede ser descrito de la siguiente forma (Khalil (1996)),

$$\frac{dx}{dt} = f(x, w, u) \tag{1}$$

$$y = g(x, w, u) \tag{2}$$

donde:

$$f(x, w, u) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \end{bmatrix} \tag{3}$$

$$g(x, w, u) = \begin{bmatrix} g_1(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \\ g_2(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \\ \vdots \\ g_r(x_1, x_2, \dots, x_n, w_1, w_2, \dots, w_m, u_1, u_2, \dots, u_c) \end{bmatrix} \tag{4}$$

x es el vector de estado del proceso, w es el vector de entradas exógenas, y es el vector de salidas medidas, y u es el vector de señales de control. La dinámica de este tipo de sistemas puede presentar los siguientes comportamientos:

- Singularidades dentro del dominio. Se presentan cuando el estado tiende al infinito en un tiempo finito.
- Múltiples puntos de equilibrio. Se observan cuando la respuesta converge a alguno de los diferentes puntos de operación dependiendo del estado inicial del sistema.
- Comportamiento armónico, subarmónico u oscilaciones quasi periódicas. Se muestran cuando el sistema es perturbado con una entrada exógena con excitación periódica, produciendo que la salida sea oscilatoria con una frecuencia que es múltiplo o submúltiplo de la frecuencia de entrada.
- Ciclos límite. Aparecen cuando la respuesta de un sistema tiene una oscilación con una amplitud y frecuencia determinada.
- Caos. Existe cuando una respuesta del sistema posee gran libertad, sin ningún patrón ni restricción a pesar de la naturaleza determinística del sistema.

Por otro lado, un sistema linealizado en un estado estacionario (s) puede ser representado por (García-Alvarado y Ruíz-López (2010) y Carrillo-Ahumada y col. (2011)),

$$\frac{dx}{dt} = Ax + B_1w + B_2u \tag{5}$$

$$y = C_1x + D_{11}w + D_{12}u \tag{6}$$

con $x \in R^{n \times 1}$, $w \in R^{m \times 1}$, $y \in R^{r \times 1}$, $u \in R^{c \times 1}$ y las matrices resultantes,

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial f_1}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{ns}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial f_2}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_{ns}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial f_n}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_{ns}} \end{bmatrix}; \\ B_1 &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial f_1}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial w_{ms}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial f_2}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial w_{ms}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial f_n}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial w_{ms}} \end{bmatrix}; \\ B_2 &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial f_1}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial u_{cs}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial f_2}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial u_{cs}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial f_n}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial u_{cs}} \end{bmatrix}; \\ C_1 &= \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial g_1}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_{ns}} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial g_2}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_{ns}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_r}{\partial x_{1s}} & \frac{\partial g_r}{\partial x_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_r}{\partial x_{ns}} \end{bmatrix}; \\ D_{11} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial g_1}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial w_{ms}} \\ \frac{\partial g_2}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial g_2}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial w_{ms}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_r}{\partial w_{1s}} & \frac{\partial g_r}{\partial w_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_r}{\partial w_{ms}} \end{bmatrix}; \\ D_{12} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial g_1}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial u_{cs}} \\ \frac{\partial g_2}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial g_2}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial u_{cs}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_r}{\partial u_{1s}} & \frac{\partial g_r}{\partial u_{2s}} & \dots & \frac{\partial g_r}{\partial u_{cs}} \end{bmatrix}; \end{aligned} \tag{7}$$

Si las matrices A , B_1 , B_2 , C_1 , D_{11} y D_{12} son constantes, el proceso es lineal además obedece al principio de superposición.

Un sistema linealizado puede representar a un sistema no lineal en las cercanías de un estado estacionario. Fuera de la región del estado estacionario

no hay garantía que el sistema linealizado represente al sistema no lineal. Además, el sistema linealizado está afectado por los parámetros que lo describen (parámetros considerados de bifurcación), ya que si estos rebasan cierto valor límite, no representará al sistema no lineal (Khalil (1996), Richter y Stein (2002)).

La linealización de un sistema no lineal en expansión en series de Taylor ha sido utilizada comúnmente como parte de la metodología para el análisis de estabilidad de sistemas no lineales y para la sintonización de controladores lineales en un determinado estado estacionario. Se obtienen de esta forma sistemas que son "aproximados" pero representativos del sistema no lineal. En algunos casos, la metodología de sintonización de controladores lineales involucra linealizar al sistema no lineal en un estado estacionario, plantear la búsqueda de las ganancias del controlador como un problema de optimización y finalmente evaluar dicho control en el sistema no lineal (García-Alvarado y col. (2005), Ruíz-López y col. (2006), García-Alvarado y Ruíz-López (2010) y Carrillo-Ahumada y col. (2011)), el control obtenido es aplicable en las cercanías del estado estacionario. Por lo tanto, el éxito que pueda tener un control lineal utilizando esta metodología de sintonización depende en gran medida de la influencia de los parámetros de bifurcación en la linealización.

En la industria (bio)química, las principales herramientas donde se realizan procesos biotecnológicos son los biorreactores, ya que pueden realizar un proceso químico que involucra organismos o sustancias bioquímicamente activas derivadas de dichos organismos. Sus aplicaciones han sido en el tratamiento de agua residual, desarrollo de bio-productos, industria farmacéutica, entre otras. La dinámica de los biorreactores puede presentar alguno de los comportamientos de los sistemas no lineales arriba mencionadas.

Algunos reactores que han llamado la atención por su dinámica no lineal son el biorreactor de Cholette, el biorreactor con reacción enzimática descrito por García-Alvarado y col. (2005) y el reactor químico descrito por Chen y col. (2002). El biorreactor de Cholette, es un sistema una-entrada una-salida (SISO por sus siglas en inglés), presenta multiplicidad de estados estacionarios algunos de ellos inestables, comportamiento caótico y puede ser representado como un sistema de Liénard. Ha sido estudiado por Jhunjhunwala y Chidambaram (2001), Sree y Chidambaram (2002 y 2003a,b), Ibarra-Junquera y Rosu (2007), Sivramakrishnan y col. (2008),

Normey-Rico y Camacho (2009), Márquez-Rubio y col. (2010), Carrillo-Ahumada y col. (2011) y Rajinikanth y Latha (2012). El biorreactor con reacción enzimática descrito por García-Alvarado y col. (2005) es un sistema múltiple-entrada múltiple-salida (MIMO por sus siglas en inglés) con estados estacionarios estables, el cual ha sido estudiado por Carrillo-Ahumada y col. (2011). El reactor químico descrito por Chen y col. (2002) es un sistema MIMO, el cual presenta multiplicidad de estados estacionarios estables, ha sido estudiado por Ruíz-López y col. (2006), García-Alvarado y Ruíz-López (2010), Carrillo-Ahumada y col. (2011) y Du y col. (2013). Por lo tanto, la simulación, análisis y control de estos sistemas es muy importante (Nuñez y col. (2013), Herrera-López y col. (2012), Conde-Mejía y col. (2012)).

El análisis de estabilidad, multiplicidad de estados estacionarios e influencia de parámetros de bifurcación sobre las condiciones de operación y de estado estacionario de los biorreactores es un tópico importante. Ejemplos de estudios sobre la multiplicidad en biorreactores son los reportados por Volcke y col. (2010), Dieulot (2012), Schaum y col. (2013) y Wang y col. (2013). Sobre el estudio del caos en biorreactores se pueden citar Patnaik (2005), Gao y col. (2006) y Stavrinides y col. (2013). Vanavil y col. (2014) realizan el análisis de bifurcación y de estado estacionario de dos biorreactores continuos operados en serie con reciclaje, utilizando el software MATCONT propuesto por Dhooze y col. (2003), enfocándose principalmente en el sustrato y la concentración de biomasa, considerando a la velocidad de dilución como parámetro de bifurcación. Wang y col. (2013) realizan un índice cuantitativo de los parámetros de bifurcación para realizar una optimización sobre que valores numéricos de éstos no afectan a las condiciones de operación, utilizan como sistemas de estudio a la fermentación anaeróbica, polimerización metil metacrilato y a una fermentación con *Z. mobilis*. Namjoshi y col. (2003) realizan un análisis de bifurcación de sistemas enzimáticos utilizando el software AUTO propuesto por Doedel y col. (1986). Dutta y col. (2001) realizan un análisis de sensibilidad del pH sobre la concentración de sustrato en un biorreactor mediante ecuaciones diferenciales parciales y una función objetivo.

Por lo tanto, se propone un procedimiento para establecer una métrica donde el sistema linealizado represente al no lineal utilizando los parámetros de bifurcación. Esta métrica esta basada en la expansión en series de Taylor de un sistema no lineal

donde el cociente de las matrices de primeras y segundas derivadas debe ser menor a la matriz de desviación de los valores nominales. Con lo que se puede tener una perspectiva de que parámetro afecta considerablemente a la linealización en un estado estacionario. Una aplicación de la métrica descrita es la posibilidad de construir algoritmos de control no lineales que aumenten la región de no-bifurcación.

El presente artículo está dividido de la siguiente forma: en la Sección 2, se presenta la teoría utilizada para el planteamiento de la métrica de la representación de un sistema linealizado con respecto al no lineal. La Sección 3, describe un ejemplo del uso de ecuaciones de sensibilidad paramétrica como criterio comparativo. En la Sección 4, se presentan a los reactores (bio)químicos de estudio: el de Cholette, el de García-Alvarado y col. (2005) y el descrito por Chen y col. (2002). La Sección 5, muestra un comparativo entre las ecuaciones de sensibilidad paramétrica con la métrica propuesta para el biorreactor de Cholette. Además, de la métrica propuesta aplicada para los reactores descritos por García-Alvarado y col. (2005) y Chen y col. (2002) respectivamente. Finalmente, en la Sección 6, se describe la conclusión de este trabajo.

2 Teoría

Reescribiendo las ecs. (1) y (2) se tiene,

$$\begin{bmatrix} \frac{dx}{dt} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{u}) \\ g(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{u}) \end{bmatrix} = \mathbf{f}(\mu) \quad (9)$$

donde $\mu \in R^{np \times 1}$ es el vector de todas las variables involucradas ($np = n + m + c$). Por lo tanto se tienen $\mu_s \in R^{np \times 1}$ variables de bifurcación definidas por,

$$\mu_s = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_s \\ \mathbf{w}_s \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix} \quad (10)$$

El sistema no lineal (ec. (9)) se puede linealizar en las cercanías de los parámetros de bifurcación con una expansión en serie de Taylor,

$$f_i(\mu) = f_i(\mu_s) + \mathbf{S}'_i(\mu - \mu_s) + (\mu - \mu_s)' \frac{\mathbf{Q}_i}{2!} (\mu - \mu_s) + \dots \quad (11)$$

$\forall i = 1, 2, \dots, ne$, donde $f_i(\mu) \in \mathbf{f}(\mu) \in R^{ne \times 1}$ para $ne = n + r$, y las matrices de primeras y segundas derivadas se definen como,

$$\mathbf{S}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_i(\mu_s)}{\partial \mu_1} \\ \frac{\partial f_i(\mu_s)}{\partial \mu_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_i(\mu_s)}{\partial \mu_{np}} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$\mathbf{Q}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_1 \partial \mu_1} & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_1 \partial \mu_2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_1 \partial \mu_{np}} \\ \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_2 \partial \mu_1} & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_2 \partial \mu_2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_2 \partial \mu_{np}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_{np} \partial \mu_1} & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_{np} \partial \mu_2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i(\mu_s)}{\partial \mu_{np} \partial \mu_{np}} \end{bmatrix} \quad (13)$$

si se define $|\mathbf{A}|$ como una matriz cuyos elementos son el valor absoluto de la matriz \mathbf{A} entonces los parámetros de bifurcación deben cumplir con,

$$|\mu - \mu_s| \leq 2 |\mathbf{Q}_i^{-1} \mathbf{S}_i| \quad (14)$$

$\forall i = 1, 2, \dots, ne$.

3 Criterio comparativo: ecuaciones de sensibilidad paramétrica

En la presente sección se muestra un ejemplo del diseño de ecuaciones de sensibilidad paramétrica (Khalil (1996) y Varma y col. (2005)) estas ecuaciones pueden servir de comparativo con la métrica de representación propuesta. La metodología consiste en considerar un modelo matemático no lineal, evaluar derivadas parciales y obtener el sistema de ecuaciones de sensibilidad.

1. Considerar un modelo matemático de la forma,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p}) \quad (15)$$

donde \mathbf{x} representa al estado, t al tiempo y \mathbf{p} a los parámetros del sistema.

2. Evaluar las derivadas parciales definidas por $\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}}$ y $\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$.
3. Obtener el sistema de ecuaciones de sensibilidad,

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}} \right) \mathbf{S} + \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right) \quad (16)$$

$$\text{donde } \mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & \dots & S_{1j} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{i1} & \dots & S_{ij} \end{pmatrix} \text{ y } S_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial p_j}.$$

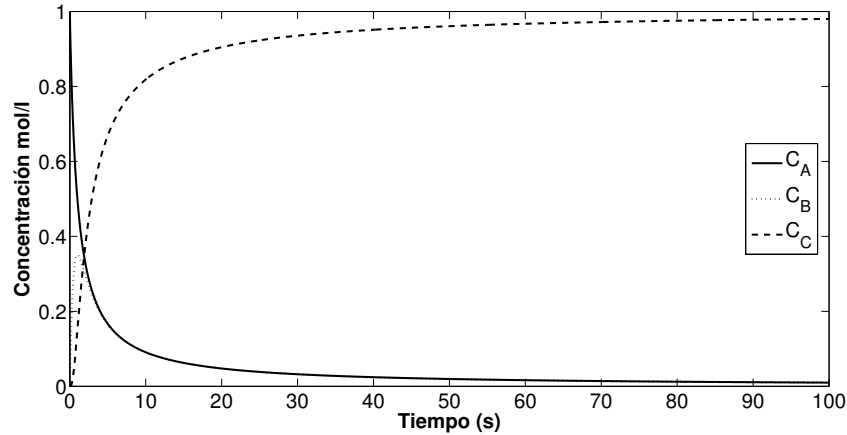


Fig. 1: Dinámica no lineal de las concentraciones del reactor batch isotérmico.

Con respecto a la obtención de las ecuaciones de sensibilidad, Romero y Navarro (2009) y Liu (2013) determinaron de manera cualitativa la influencia de los parámetros de bifurcación en los estados de un biorreactor con crecimiento microbiano modelado por la ley de Haldane y de una fermentación respectivamente.

A continuación se presentará un ejemplo del uso de las ecuaciones de sensibilidad. Un reactor batch isotérmico lleva a cabo las reacciones $2A \xrightarrow{k_1} 2B \xrightarrow{k_2} C$, el cual es modelado por las ecuaciones,

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^2 \quad (17)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A^2 - k_2 C_B^2 \quad (18)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B^2 \quad (19)$$

con $k_1 = 1$, $k_2 = 2$, $C_A(0) = 1$ mol/l, $C_B(0) = 0$ mol/l y $C_C(0) = 0$ mol/l. Determinar la manera como los coeficientes cinéticos k_1 y k_2 afectan a las conversiones de C_A , C_B y C_C durante los primeros 20 minutos de operación del reactor. Por lo tanto se tiene,

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -2k_1 C_A & 0 & 0 \\ 2k_1 C_A & -2k_2 C_B & 0 \\ 0 & 2k_2 C_B & 0 \end{bmatrix}; \quad \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \begin{bmatrix} -C_A^2 & 0 \\ C_A^2 & -C_B^2 \\ 0 & C_B^2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

definiendo: $S_{11} = \left(\frac{\partial C_A}{\partial k_1}\right)$, $S_{12} = \left(\frac{\partial C_A}{\partial k_2}\right)$, $S_{21} = \left(\frac{\partial C_B}{\partial k_1}\right)$, $S_{22} = \left(\frac{\partial C_B}{\partial k_2}\right)$, $S_{31} = \left(\frac{\partial C_C}{\partial k_1}\right)$ y $S_{32} = \left(\frac{\partial C_C}{\partial k_2}\right)$.

La matriz de sensibilidad paramétrica \mathbf{S} , es por lo tanto,

$$\begin{bmatrix} \frac{dS_{11}}{dt} & \frac{dS_{12}}{dt} \\ \frac{dS_{21}}{dt} & \frac{dS_{22}}{dt} \\ \frac{dS_{31}}{dt} & \frac{dS_{32}}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2k_1 C_A & 0 & 0 \\ 2k_1 C_A & -2k_2 C_B & 0 \\ 0 & 2k_2 C_B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \\ S_{31} & S_{32} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -C_A^2 & 0 \\ C_A^2 & -C_B^2 \\ 0 & C_B^2 \end{bmatrix} \quad (21)$$

El conjunto de ecuaciones resultante es,

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^2 \quad (22)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A^2 - k_2 C_B^2$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B^2$$

$$\frac{dS_{11}}{dt} = -2k_1 C_A S_{11} - C_A^2$$

$$\frac{dS_{12}}{dt} = -2k_1 C_A S_{12}$$

$$\frac{dS_{21}}{dt} = 2k_1 C_A S_{11} - 2k_2 C_B S_{21} + C_A^2$$

$$\frac{dS_{22}}{dt} = 2k_1 C_A S_{12} - 2k_2 C_B S_{22} + C_B^2$$

$$\frac{dS_{31}}{dt} = 2k_2 C_B S_{21}$$

$$\frac{dS_{32}}{dt} = 2k_2 C_B S_{22} + C_B^2$$

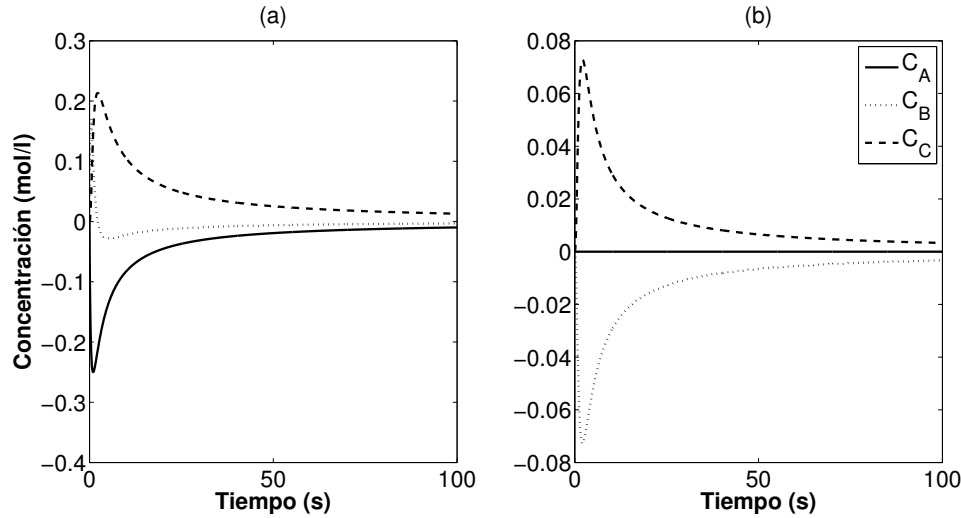


Fig. 2: Influencia del parámetro k_1 (a) y k_2 (b) en las concentraciones del reactor batch isotérmico.

con las condiciones iniciales de las ecuaciones de sensibilidad: $S_{ij}(0) = 0$ donde $i = 1, 2, 3$ y $j = 1, 2$. En la Figura 1, se muestra la dinámica no lineal de las concentraciones C_A , C_B y C_C del reactor batch isotérmico donde cada concentración llega a un estado estacionario.

Las figuras 2(a) y 2(b) muestran la influencia del parámetro k_1 y k_2 respectivamente en las concentraciones del reactor. Como se puede observar el reactor es más sensible ante el parámetro k_1 a diferencia del parámetro k_2 . Específicamente, la influencia del parámetro k_1 en las concentraciones en orden decreciente es $C_C > C_A > C_B$. Con respecto al parámetro k_2 , la concentración C_A es el estado con menos afectación.

Con el desarrollo de ecuaciones de sensibilidad paramétrica, se incrementa el número de ecuaciones diferenciales con respecto a los estados y a los parámetros que se requieren evaluar. En el ejemplo del reactor batch isotérmico descrito por ecs. (17)-(19), el sistema resultante da como consecuencia 9 ecuaciones diferenciales, las cuales están acopladas (ecs. 22). Cabe mencionar que las ecuaciones de sensibilidad paramétrica evalúan la influencia de parámetros con la dinámica no lineal, aunque debido a la forma no lineal de las ecuaciones resulta más complejo el desarrollo que con un sistema linealizado. Como una alternativa se pueden utilizar métodos que puedan derivar a las ecuaciones no lineales en un estado estacionario por ejemplo con el método numérico de diferencias finitas.

4 Sistemas de estudio

4.1 Biorreactor de Cholette

El biorreactor de Cholette es un tanque agitado con mezclado no ideal, isotérmico, donde se lleva a cabo una reacción enzimática de la forma: $\frac{k_1 c}{(1+k_2 c)^2}$. Esta forma de la rapidez de reacción es similar a una función de Michaelis-Menten para bajas concentraciones de sustrato pero a altas concentraciones se incluye en el modelo un parámetro de inhibición (Lo y Cholette (1983) y Liou y Chien (1983)). El biorreactor es modelado de la siguiente manera,

$$\frac{dc}{dt} = \frac{qn}{Vm}(c_f - c) - \frac{k_1 c}{(1 + k_2 c)^2} \quad (23)$$

$$c_e = nc + (1 - n)c_f \quad (24)$$

Las consideraciones que se mantienen en este biorreactor son:

- Todos los parámetros y propiedades fisicoquímicas son constantes.
- La reacción enzimática ocurre en el reactor tipo tanque agitado continuo con mezclado no ideal operado bajo condiciones isotérmicas.

Este sistema presenta multiplicidad en las concentraciones de alimentación, sustrato y de salida como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Estados estacionarios del biorreactor de Cholette.

Concentración de alimentación (c_{fs}) (kg mol m ⁻³)	Concentración de sustrato (c_s) (kg mol m ⁻³)	Concentración de salida (c_{es}) (kg mol m ⁻³)
3.288	1.767; 1.303; 0.014	2.147; 1.80; 0.832
6.484	6.0; 0.238; 0.045	6.122; 1.80; 1.655
7.026	6.584; 0.184; 0.057	6.694; 1.894; 1.80

En Chidambaram y Reddy (1996) se presentan polinómios para obtener los estados estacionarios de la concentración de alimentación, sustrato y de salida. Los valores nominales comúnmente utilizados son: $q_s = 3.333 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $V = 1 \times 10^{-3} \text{ m}^3$, $k_1 = 10 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 10 \text{ m}^3 \text{ kg mol}^{-1}$, $n = m = 0.75$. La definición de parámetros puede consultarse en el Apéndice A.

Este sistema, es descrito generalmente por una ecuación diferencial (ec. 23) y una algebraica (ec. 24) (Chidambaram y Reddy (1996), Sree y Chidambaram (2002 y 2003a,b), Carrillo-Ahumada y col. (2011) y Rajinikanth y Latha (2012)). Aunque en algunos casos únicamente se utiliza la concentración de sustrato (Jhunjunwala y Chidambaram (2001), Sree y Chidambaram (2002), Sivaramakrishnan y col. (2008), Normey-Rico y Camacho (2009) y Márquez-Rubio y col. (2010)).

4.2 Biorreactor con reacción enzimática

En este biorreactor tipo tanque agitado, el reactivo A es transformado en un producto P en una reacción catalizada por una enzima E. Este sistema ha sido descrito y estudiado por García-Alvarado y col. (2005) y Carrillo-Ahumada y col. (2011). Las ecuaciones que describen a este sistema son,

$$V_r \frac{dC_{A1}}{dt} = Q_{01}C_{A0} - QC_{A1} + V_r r_A \quad (25)$$

$$V_r \frac{dC_{E1}}{dt} = Q_{02}C_{E0} - QC_{E1} \quad (26)$$

$$V_r \frac{dC_{P1}}{dt} = -QC_{P1} - V_r r_P \quad (27)$$

$$\rho C_p V_r \frac{dT_{11}}{dt} = \rho C_p (Q_{01}T_{01} - QT_{11}) - hA(T_{11} - T_{12}) - \Delta H_r V_r r_A \quad (28)$$

$$\rho C_p V_c \frac{dT_{12}}{dt} = \rho C_p Q_{03}(T_{02} - T_{12}) + hA(T_{11} - T_{12}) \quad (29)$$

La reacción es exotérmica con una cantidad de ΔH_r de energía libre. La rapidez de reacción se asume como,

$$r_A = -\frac{k_0 e^{(-E/RT)} C_E^2 C_A}{k_m + C_A}; \quad r_P = -\frac{Y_{P/A} k_0 e^{(-E/RT)} C_E^2 C_A}{k_m + C_A}$$

se considera que este biorreactor tipo tanque agitado es de mezcla perfecta y cubierto con una chaqueta de enfriamiento en la cual el agua de enfriamiento se considera que es mezclada también. Los valores nominales en estado estacionario son designados por: $C_{A0s} = 15 \text{ kg A m}^{-3}$, $C_{A1s} = 1.42 \text{ kg A m}^{-3}$, $C_{E0s} = 50 \text{ kg E m}^{-3}$, $C_{E1s} = 0.5 \text{ kg E m}^{-3}$, $C_{P1s} = 10.86 \text{ kg P m}^{-3}$, $C_p = 4.185 \text{ kJ g}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, $A = 13.55 \text{ m}^2$, $E = 27245 \text{ J g mol}^{-1}$, $h = 7200 \text{ kJ m}^{-2} \text{ h}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, $k_0 = 1.66 \times 10^6 \text{ kg E}^{-2} \text{ kg A m}^{-3} \text{ h}^{-1}$, $k_m = 7 \text{ kg A m}^{-3}$, $Q = Q_{01} + Q_{02}$, $Q_{01} = 0.7 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$, $Q_{02s} = 0.007 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$, $Q_{03s} = 0.2 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$, $R = 8.314 \text{ J g mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $T_{01} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{02} = 10 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{11s} = 43.15 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{12s} = 42.87 \text{ }^\circ\text{C}$, $V_c = 0.71 \text{ m}^3$, $V_r = 4.42 \text{ m}^3$, $\Delta H_r = 10000 \text{ kJ kg A}^{-1}$, $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$. La definición de parámetros puede consultarse en el Apéndice A. Los valores de los estados estacionarios son descritos por García-Alvarado y col. (2005) los cuales fueron validados por simulación numérica.

4.3 Reactor químico

Este reactor tipo tanque agitado no lineal presenta una reacción exotérmica de primer orden. Este sistema ha sido descrito y estudiado por Chen y col. (2002), García-Alvarado y Ruíz-López (2010), Carrillo-Ahumada y col. (2011) y Du y col. (2013).

$$V \frac{dC}{dt} = q(C_f - C) - V k_0 e^{(-E/RT)} C \quad (30)$$

$$\rho C_p V \frac{dT}{dt} = \rho C_p q(T_f - T) + (-\Delta H) V k_0 e^{(-E/RT)} C + \rho_c C_{pc} q_c (1 - e^{-h/\rho_c C_{pc} q_c})(T_{cf} - T) \quad (31)$$

Los valores nominales en estado estacionario son designados por: $C_s = 0.1 \text{ mol l}^{-1}$, $T_s = 458.54 \text{ K}$, $q_s = 100 \text{ l min}^{-1}$, $q_{cs} = 103.41 \text{ l min}^{-1}$, $C_{fs} = 1 \text{ mol l}^{-1}$, $T_{fs} = 350 \text{ K}$, $T_{cfs} = 350 \text{ K}$, $V = 100 \text{ l}$, $h = 7 \times 10^5 \text{ cal min}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $k_0 = 7.2 \times 10^{10} \text{ l min}^{-1}$, $E/R = 10^4 \text{ K}$, $\Delta H = -2 \times 10^5 \text{ cal mol}^{-1}$, $\rho = \rho_c = 10^3 \text{ g l}^{-1}$, $C_p = C_{pc} = 1 \text{ cal g}^{-1} \text{ K}^{-1}$. La definición de parámetros puede consultarse en el Apéndice A. Los valores de los estados estacionarios son reportados por Chen y col. (2002) los cuales fueron validados mediante simulación numérica.

5 Resultados

5.1 Estudio comparativo con el biorreactor de Cholette

Métrica de la representación linealizada del sistema no lineal

Para este sistema se designan los vectores de estado del sistema, señales exógenas y señales de control como:

$$x_s = [c_s]; \quad w_s = [q_s]; \quad u_s = [c_{fs}]$$

con las ecs. (23) y (24) se obtiene un vector **f** y las matrices **S** y **Q**. Donde,

$$f = \begin{bmatrix} \frac{qn}{V_m}(c_f - c) - \frac{k_1 c}{(1+k_2 c)^2} \\ nc + (1-n)c_f \end{bmatrix} \quad (32)$$

$$S = [S_1(\mu) \quad S_2(\mu)] \quad (33)$$

$$Q = [Q_1(\mu) \quad Q_2(\mu)] \quad (34)$$

Tabla 2. Métrica de la representación linealizada del biorreactor de Cholette en diferentes estados estacionarios.

Estado estacionario	S ₁	S ₂	Q ₁	2 Q ₁ ⁻¹ S ₁ (μ)	
1) $c_s = 0.2383$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 6.484$	$\begin{bmatrix} 0.323 \\ 6245 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.294 & -500 & 0 \\ -500 & -0.025 & 500 \\ 0 & 500 & 3.30 \times 10^{-13} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.211 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 11.279 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
2) $c_s = 6.0$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 6.484$	$\begin{bmatrix} -0.0307 \\ 484.00 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -4.1769 \times 10^{-4} & -500 & 0 \\ -500 & -0.0016 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 6.2172 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 5.2492 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
3) $c_s = 0.045$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 6.484$	$\begin{bmatrix} -1.8358 \\ 6.4390 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 35.0102 & -500 & 0 \\ -500 & -0.0250 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0515 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 12.8265 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
4) $c_s = 1.767$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 3.288$	$\begin{bmatrix} -0.0077 \\ 1.5210 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.0129 & -500 & 0 \\ -500 & -0.0062 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.9897 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 1.0523 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
5) $c_s = 1.303$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 3.288$	$\begin{bmatrix} 0.0102 \\ 1.9850 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.0284 & -500 & 0 \\ -500 & 0 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.5328 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 2.4372 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
6) $c_s = 0.014$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 3.288$	$\begin{bmatrix} -5.8365 \\ 3.2740 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 110.06 & -500 & 0 \\ -500 & -0.0062 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0527 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 6.4953 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
7) $c_s = 6.584$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 7.026$	$\begin{bmatrix} -0.0312 \\ 442.00 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -3.1892 \times 10^{-4} & -500 & 0 \\ -500 & -0.0016 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 6.8019 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 5.9179 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
8) $c_s = 0.184$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 7.026$	$\begin{bmatrix} 0.3334 \\ 6.8420 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.2425 & -500 & 0 \\ -500 & -0.0125 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.5124 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 15.1964 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$
9) $c_s = 0.057$ $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ $c_{fs} = 7.026$	$\begin{bmatrix} -1.1431 \\ 6.9690 \times 10^3 \\ 0.0333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.75 \\ 0 \\ 0.25 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 23.4927 & -500 & 0 \\ -500 & -0.0250 & 500 \\ 0 & 500 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.0472 \\ 6.666 \times 10^{-5} \\ 13.8908 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_s \\ q_s \\ c_{fs} \end{bmatrix}'$

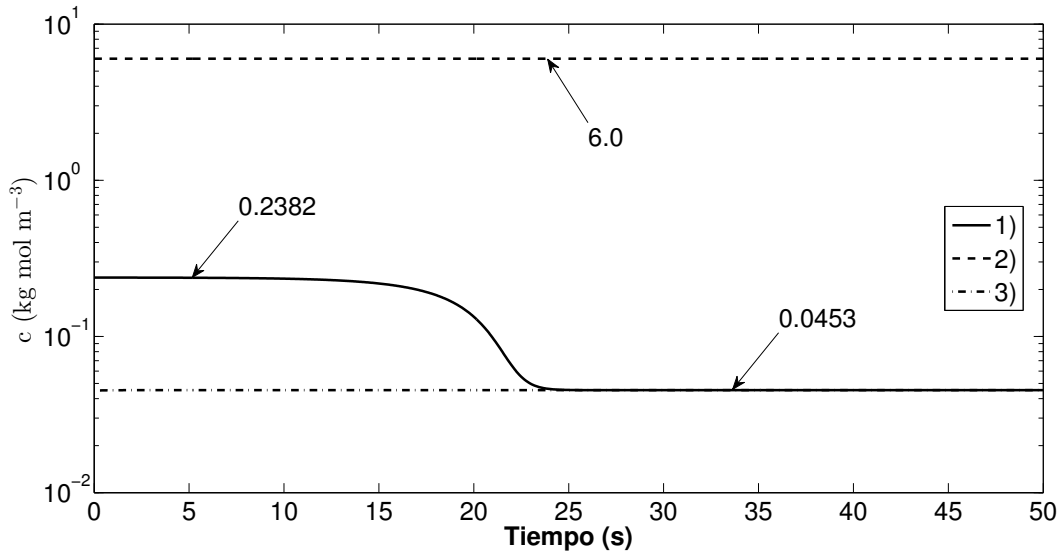


Fig. 3: Dinámica no lineal ante diferentes condiciones iniciales en la concentración de sustrato con $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_{fs} = 6.484$.

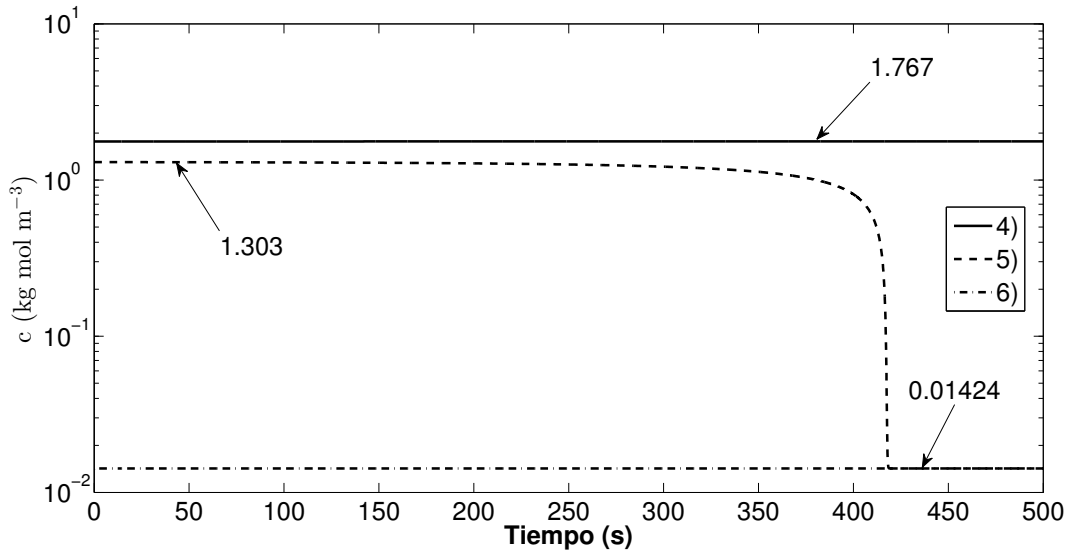


Fig. 4: Dinámica no lineal ante diferentes condiciones iniciales en la concentración de sustrato con $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_{fs} = 3.288$.

Considerando que el criterio de la representación linealizada de un sistema no lineal en un estado estacionario, se encuentra descrito por la condición planteada en la ec. (14). Se realiza la métrica

$(2|Q_1^{-1}S_1(\mu)|)$ para todos los estados estacionarios del biorreactor de Cholette como se muestra en la Tabla 2.

Este biorreactor tiene estados estacionarios estables e inestables. Los estados estacionarios

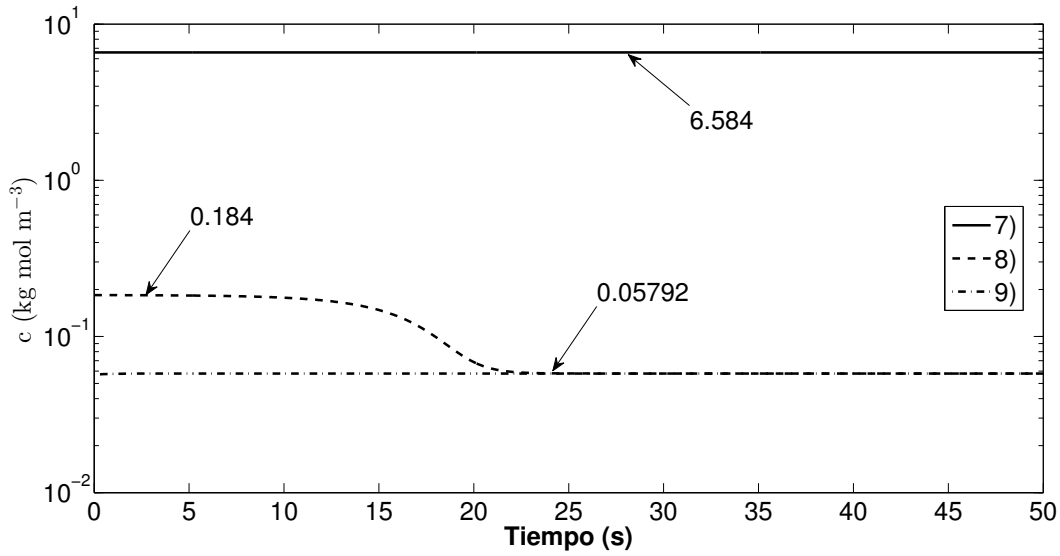


Fig. 5: Dinámica no lineal ante diferentes condiciones iniciales en la concentración de sustrato con $q_s = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_{fs} = 7.026$.

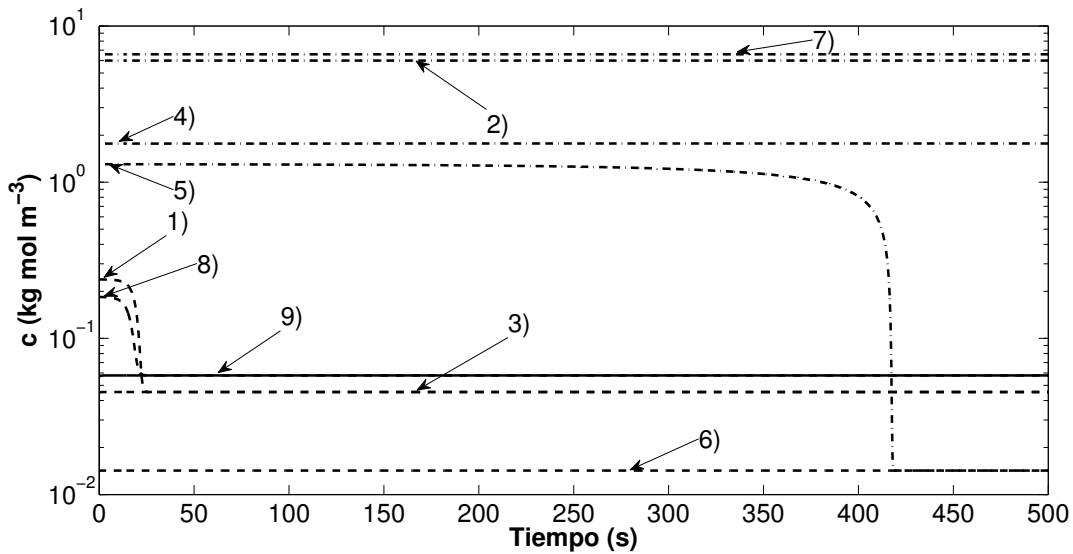


Fig. 6: Concentración de sustrato del biorreactor de Choleté. Estado estacionario que no cumple con la condición (ec. 14) para c_s (-). Estados estacionarios que no cumplen con la condición (ec. 14) para c_{fs} (---). Estados estacionarios que cumplen con la condición (ec. 14) para c_f (- -).

estables son: 2, 3, 4, 6, 7 y 9 debido a $S_1(c_s) < 0$. Los estados estacionarios inestables son: 1, 5 y 8 debido a $S_1(c_s) > 0$ (Apéndice B). La concentración de sustrato en diferentes puntos de operación es observada en las

Figs. 3-5.

El sistema está conformado por una ecuación lineal (ec. 24) por lo tanto para todos los estados se tiene $Q_2(\mu) = 0$.

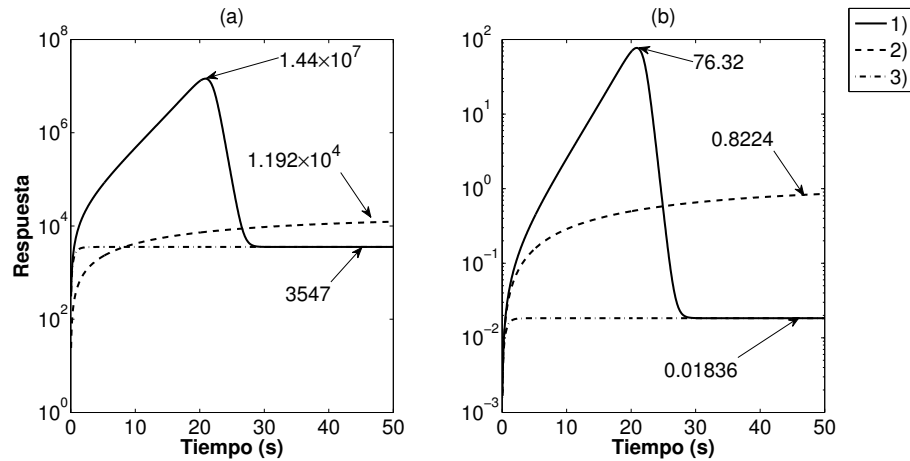


Fig. 7: Ecuaciones de sensibilidad del parámetro q (a) y del parámetro c_f (b) ante condiciones de operación $q = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_f = 6.484$.

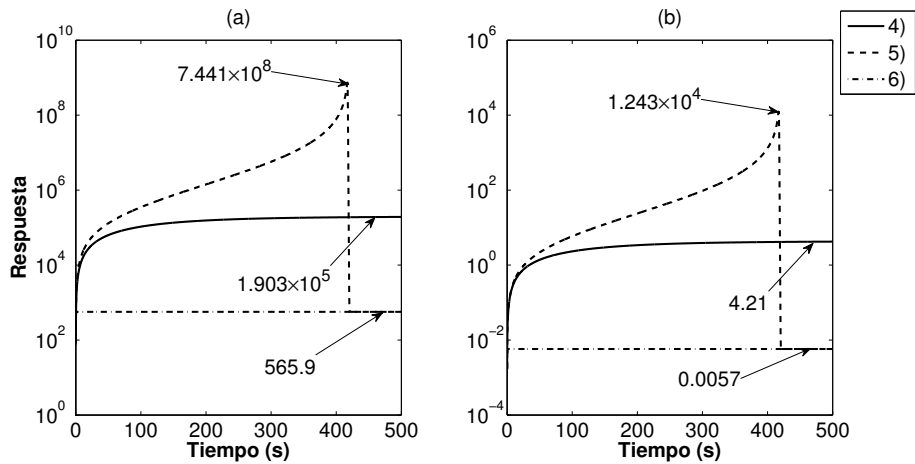


Fig. 8: Ecuaciones de sensibilidad del parámetro q (a) y del parámetro c_f (b) ante condiciones de operación $q = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_f = 3.288$.

Por lo que el análisis de la métrica de la representación linealizada en un estado estacionario fue aplicado solamente a la ec. (23). Con respecto al estado del sistema c_s , la condición (ec. 14) no se cumplió en el estado estacionario 9 ($2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(c_s)| < 0.057$). Con respecto a la entrada exógena q_s , presenta el valor de $2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(q_s)| \approx q_s$, por lo que se observa que este parámetro es más sensible ante cambios independientemente del estado estacionario que se este evaluando. Con respecto a la señal de control c_{fs} , la condición (ec. 14) no se cumplió en los

estados estacionarios: 2 ($2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(c_{fs})| < 6.484$), 4 ($2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(c_{fs})| < 3.288$), 5 ($2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(c_{fs})| < 3.288$) y 7 ($2|\mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{S}_1(c_{fs})| < 7.026$). Por otro lado, si se cumplió para los demás estados estacionarios. En la Fig. 6 se observa la concentración de sustrato de los estados estacionarios del biorreactor de Cholette.

La dinámica de la concentración de sustrato presenta multiplicidad de estados estacionarios algunos de ellos estables e inestables, además que este biorreactor presenta un comportamiento caótico (Ibarra-Junquera y Rosu, 2007). Esto debido a la

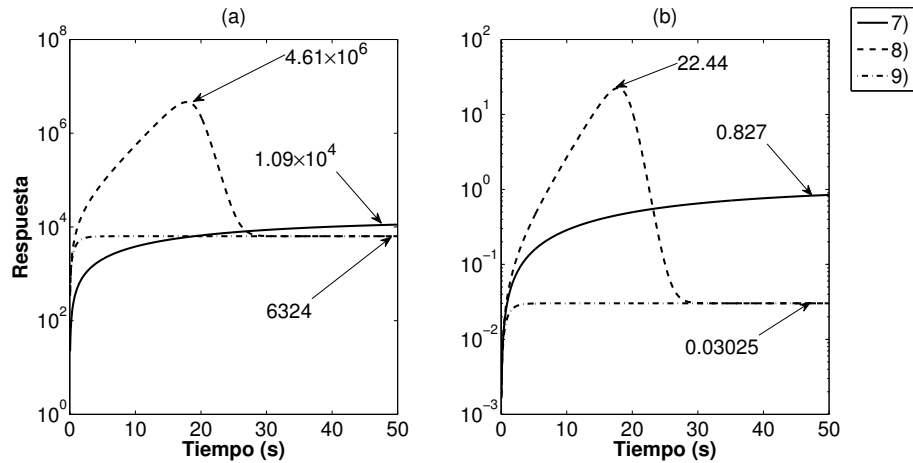


Fig. 9: Ecuaciones de sensibilidad del parámetro q (a) y del parámetro c_f (b) ante condiciones de operación $q = 3.333 \times 10^{-5}$ y $c_f = 7.026$.

forma de la reacción enzimática que se describe en el modelo matemático.

Ecuaciones de sensibilidad paramétrica del biorreactor de Cholette

Debido a que la dinámica no lineal esta dada por la concentración de sustrato, se pueden diseñar las ecuaciones de sensibilidad ante los parámetros q y c_f . Por lo tanto se tiene,

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{qn}{Vm} \frac{(1 + k_2c)^2 k_1 - 2(1 + k_2c)k_2 k_1 c}{(1 + k_2c)^4};$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, t, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \left[\frac{n}{Vm}(c_f - c) \quad \frac{qn}{Vm} \right] \quad (35)$$

definiendo: $S_{11} = \left(\frac{\partial c}{\partial q}\right)$, $S_{12} = \left(\frac{\partial c}{\partial c_f}\right)$. Por lo tanto el conjunto de ecuaciones resultante es,

$$\frac{dc}{dt} = \frac{qn}{Vm}(c_f - c) - \frac{k_1 c}{(1 + k_2c)^2} \quad (36)$$

$$\frac{dS_{11}}{dt} = \left(-\frac{qn}{Vm} - \frac{(1 + k_2c)^2 k_1 - 2(1 + k_2c)k_2 k_1 c}{(1 + k_2c)^4} \right) S_{11}$$

$$+ \frac{n}{Vm}(c_f - c)$$

$$\frac{dS_{12}}{dt} = \left(-\frac{qn}{Vm} - \frac{(1 + k_2c)^2 k_1 - 2(1 + k_2c)k_2 k_1 c}{(1 + k_2c)^4} \right) S_{12}$$

$$+ \frac{qn}{Vm}$$

donde $S_{1j}(0) = 0$ con $j = 1, 2$. En las Figs. 7-9 se muestra la simulación de las ecuaciones de sensibilidad de parámetros utilizando los puntos de operación mostrados en la Tabla 2.

Como puede observarse, la influencia del parámetro q_s es mayor que el parámetro c_{fs} en todos los estados estacionarios del biorreactor de Cholette. Como es mostrado por medio del criterio propuesto (ec. 14) en la Tabla 2. El inconveniente que tiene las ecuaciones de sensibilidad de parámetros es que no puede observarse la influencia del parámetro c en su mismo estado, ya que este método observa el comportamiento dinámico del sistema a comparación del criterio propuesto que observa la influencia de cada parámetro en estado estacionario.

5.2 Métrica de la representación linealizada del biorreactor con reacción enzimática

Para este sistema se designan los vectores de estado del sistema, señales exógenas y señales de control como:

$$x_s = \begin{bmatrix} C_{A1s} \\ C_{E1s} \\ C_{P1s} \\ T_{11s} \\ T_{12s} \end{bmatrix}; \quad w_s = \begin{bmatrix} C_{A0s} \\ T_{01s} \end{bmatrix}; \quad u_s = \begin{bmatrix} Q_{02s} \\ Q_{03s} \end{bmatrix}$$

Considerando las ecs. (25)-(29) se obtiene el vector \mathbf{f} para las matrices \mathbf{S} y \mathbf{Q} . Donde:

Tabla 3. Métrica de la representación linealizada del biorreactor con reacción enzimática en un estado estacionario.

Función	Estado estacionario	S_i	Q_i	$2 Q_i^{-1}S_i $
$i = 1$	$C_{A1s} = 1.42$ $C_{E1s} = 0.5$ $T_{11s} = 43.15$ $C_{E0s} = 50$	$\begin{bmatrix} -1.457 \\ -8.868 \\ -0.072 \\ 0.1583 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.154 & -2.595 & -2.125 \times 10^{-2} & 0 \\ -2.595 & -8.863 & -1.453 \times 10^{-1} & 0 \\ 2.125 \times 10^{-2} & -1.453 \times 10^{-1} & -9.6 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3.080 \times 10^{-14} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 8.694 \times 10^{-2} \\ 1.576 \times 10^{-1} \\ 4.985 \times 10^1 \\ 5.141 \times 10^{12} \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} C_{A1s} \\ C_{E1s} \\ T_{11s} \\ C_{A0s} \end{bmatrix}'$
$i = 2$	$C_{E1s} = 0.5$ $Q_{02s} = 0.007$	$\begin{bmatrix} -0.159 \\ 11.312 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -3.53 \times 10^{-14} & -5.87 \times 10^{-13} \\ -5.87 \times 10^{-13} & -1.28 \times 10^{-7} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 4.484 \times 10^{12} \\ 1.089 \times 10^8 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} C_{E1s} \\ Q_{02s} \end{bmatrix}'$
$i = 3$	$C_{A1s} = 1.42$ $C_{E1s} = 0.5$ $C_{P1s} = 10.86$ $T_{11s} = 43.15$	$\begin{bmatrix} 1.037 \\ 7.094 \\ -0.159 \\ 0.058 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.123 & 2.076 & 2.25 \times 10^{-13} & 0.017 \\ 2.076 & 7.090 & 0 & 0.116 \\ 2.25 \times 10^{-13} & 0 & 2.94 \times 10^{-14} & 7.4 \times 10^{-15} \\ 0.017 & 0.116 & 7.4 \times 10^{-15} & 7.68 \times 10^{-4} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 9.394 \times 10^{-1} \\ 7.805 \times 10^{-1} \\ 5.386 \times 10^{12} \\ 3.019 \times 10^1 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} C_{A1s} \\ C_{E1s} \\ C_{P1s} \\ T_{11s} \end{bmatrix}'$
$i = 4$	$C_{A1s} = 1.42$ $C_{E1s} = 0.5$ $T_{11s} = 43.15$ $T_{12s} = 42.87$ $T_{01s} = 20$	$\begin{bmatrix} 3.099 \\ 21.19 \\ -5.260 \\ 5.274 \\ 0.158 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -0.367 & 6.201 & 0.057 & 2.28 \times 10^{-13} & 0 \\ 6.201 & 21.179 & 0.347 & 0 & -1.39 \times 10^{-12} \\ 0.057 & 0.347 & 0.002 & 0 & -1.39 \times 10^{-12} \\ 2.28 \times 10^{-13} & 0 & 2.18 \times 10^{-13} & 2.11 \times 10^{-13} & 0 \\ 0 & -1.39 \times 10^{-12} & 0 & 0 & -3.47 \times 10^{-14} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.104 \times 10^2 \\ 4.689 \times 10^1 \\ 4.875 \times 10^3 \\ 2.499 \times 10^{13} \\ 4.564 \times 10^{12} \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} C_{A1s} \\ C_{E1s} \\ T_{11s} \\ T_{12s} \\ T_{01s} \end{bmatrix}'$
$i = 5$	$T_{11s} = 43.15$ $T_{12s} = 42.87$ $Q_{03s} = 0.2$	$\begin{bmatrix} 32.834 \\ -33.115 \\ -46.296 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1.12 \times 10^{-14} & -1.13 \times 10^{-14} & -4.02 \times 10^{-12} \\ -1.13 \times 10^{-14} & -1.13 \times 10^{-14} & -0.704 \\ -4.02 \times 10^{-12} & -0.704 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 2.931 \times 10^{15} \\ 1.68 \times 10^4 \\ 9.406 \times 10^1 \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} T_{11s} \\ T_{12s} \\ Q_{03s} \end{bmatrix}'$

$$f = \begin{bmatrix} (1/V_r)[Q_{01}C_{A0} - QC_{A1} - V_r r_A] \\ (1/V_r)[Q_{02}C_{E0} - QC_{E1}] \\ (1/V_r)[-QC_{P1} + V_r r_P] \\ (1/(\rho C_p V_r))[\rho C_p(Q_{01}T_{01} - QT_{11}) - hA(T_{11} - T_{12}) - \Delta H_r V_r r_A] \\ (1/(\rho C_p V_c))[\rho C_p Q_{03}(T_{02} - T_{12}) + hA(T_{11} - T_{12})] \end{bmatrix} \quad (37)$$

$$S = [S_1(\mu) \quad S_2(\mu) \quad S_3(\mu) \quad S_4(\mu) \quad S_5(\mu)] \quad (38)$$

$$Q = [Q_1(\mu) \quad Q_2(\mu) \quad Q_3(\mu) \quad Q_4(\mu) \quad Q_5(\mu)] \quad (39)$$

Al realizar el análisis de $2|Q_{1,2,\dots,5}^{-1}S_{1,2,\dots,5}|$ como muestra en la Tabla 3, se determina que algunos estados del sistema cumplieron con la condición (ec. 14) para f (ec. 37). Con respecto a la función que están modelando, (f_1 para C_{A1} , f_2 para C_{E1} , f_3 para C_{P1} , f_4 para T_{11} y f_5 para T_{12}) con excepción del estado C_{A1} que lo cumplió únicamente en f_4 . Por lo tanto, el parámetro C_{A1} es más sensible ante cambios específicamente en f_1 .

Para las entradas exógenas (C_{A0s} y T_{01s}) y señales de control (Q_{02s} y Q_{03s}) se cumplió con la condición

(ec.14) en las funciones $f_{1,4,2,5}$ respectivamente. Con respecto a la estabilidad de f (ec. 37) para el sistema, se observa que es estable debido a $S_1(C_{A1s}) < 0$, $S_2(C_{E1s}) < 0$, $S_3(C_{P1s}) < 0$, $S_4(T_{11s}) < 0$ y $S_5(T_{12s}) < 0$ (Apéndice B).

5.3 Métrica de la representación linealizada del reactor químico en un estado estacionario

Para este sistema se designan los vectores de estado del sistema, señales exógenas y señales de control como:

$$x_s = \begin{bmatrix} C_s \\ T_s \end{bmatrix}; \quad w_s = \begin{bmatrix} C_{fs} \\ T_{fs} \end{bmatrix}; \quad u_s = \begin{bmatrix} q_s \\ q_{cs} \end{bmatrix}$$

Considerando las ecs. (30) y (31) se obtiene un vector f para las matrices S y Q .

$$f = \begin{bmatrix} (1/V)[q(C_f - C) - V k_0 e^{-E/RT} C] \\ (1/\rho C_p V)[\rho C_p q(T_f - T) + (-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT} C + \rho_c C_{pc} q_c (1 - e^{-h/\rho_c C_{pc} q_c})(T_{cf} - T)] \end{bmatrix} \quad (40)$$

$$S = [S_1(\mu) \quad S_2(\mu)] \quad (41)$$

$$Q = [Q_1(\mu) \quad Q_2(\mu)] \quad (42)$$

Tabla 4. Métrica de la representación linealizada del reactor químico en un estado estacionario.

Función	Estado estacionario	S_i	Q_i	$2 Q_i^{-1}S_i $
$i = 1$	$C_s = 0.1$	$\begin{bmatrix} -9.997 \\ -0.047 \\ 0.009 \\ 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 4.070 \times 10^{-12} & -2.363 \times 10^{-1} & -5 \times 10^{-3} & -7.10 \times 10^{-10} \\ -2.363 \times 10^{-1} & -1.1307 \times 10^{-3} & -1.64 \times 10^{-17} & -1.39 \times 10^{-15} \\ -5 \times 10^{-3} & -1.64 \times 10^{-17} & -7.11 \times 10^{-15} & 5 \times 10^{-3} \\ -7.1 \times 10^{-10} & -1.39 \times 10^{-15} & 5 \times 10^{-3} & -7.11 \times 10^{-11} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.017 \\ 38.065 \\ 200 \\ 1.817 \end{bmatrix}$
	$T_s = 458.54$			
	$q_s = 100$			
	$C_{fs} = 1.0$			
$i = 2$	$C_s = 0.1$	$\begin{bmatrix} 1799.6 \\ 7.422 \\ -0.885 \\ -0.877 \\ 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 47.277 & 0 & 6.710 \times 10^{-13} & 0 \\ 47.277 & 0.2261 & -5 \times 10^{-3} & -4.955 \times 10^{-3} & 6.110 \times 10^{-14} \\ 0 & -5 \times 10^{-3} & 9.310 \times 10^{-13} & 6.710 \times 10^{-16} & 5 \times 10^{-3} \\ 6.710 \times 10^{-13} & -4.955 \times 10^{-3} & 6.710 \times 10^{-16} & 2.261 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 6.110 \times 10^{-14} & 5 \times 10^{-3} & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.323 \\ 38.065 \\ 200 \\ 3045.8 \\ 139.01 \end{bmatrix}$
	$T_s = 458.54$			
	$q_s = 100$			
	$q_{cs} = 103.41$			
	$T_{fs} = 350$			

Al realizar el análisis de los cocientes $2|Q_{1,2}^{-1}S_{1,2}|$ como muestra en la Tabla 4, conforme a la condición (ec. 14) se determinó que f (ec. 40) para los estados f_1 para C_s y f_2 para T_s respectivamente no cumplieron con dicha condición debido en gran medida a la respuesta oscilatoria de estos estados en lazo abierto (pudiéndose validar con los valores propios de la matriz característica (ver Apéndice B).

En contraparte, la señal exógena C_{fs} cumplió con la condición (ec. 14) a excepción de T_{fs} ($2|Q_2^{-1}S_2(T_{fs})| < 350$). Por lo tanto, el parámetro T_{fs} es más sensible ante cambios. Para las señales de control q_s y q_{cs} cumplieron con dicha condición (ec. 14) debido a $2|Q_{1,2}^{-1}S_{1,2}(q_s)| > 100$ y $2|Q_2^{-1}S_2(q_{cs})| > 103.41$ respectivamente. Con respecto a la estabilidad del vector f (ec. 40), para f_1 conforme a $S_1(C_s) < 0$ es estable, mientras que f_2 conforme a $S_2(T_s) > 0$ es inestable (Apéndice B).

Conclusión

El criterio de la métrica de la representación linealizada de un sistema no lineal en un estado estacionario, mostró como puede ser afectada la linealización por medio de los parámetros de bifurcación. Al realizar el comparativo con el diseño de ecuaciones de sensibilidad de parámetros, se observa que el criterio propuesto no incrementa el número de ecuaciones, además que representa cuantitativamente los límites de los parámetros de bifurcación para no afectar a la linealización. Este criterio propuesto puede ser utilizado en cualquier modelo no lineal que describa el comportamiento en estado estacionario estable o inestable. Su aplicación se encuentra en el análisis de sistemas no lineales y en la teoría de control. Por ejemplo, cuando se requiere sintonizar un controlador para un sistema, se puede dar mayor ponderación al parámetro de bifurcación que puede afectar la dinámica. También como la posibilidad de construir algoritmos de control no-

lineales que aumenten la región de no-bifurcación.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Programa de Mejoramiento del Profesorado (PROMEP) por el financiamiento parcial para esta investigación mediante el proyecto "Análisis de Estabilidad de Procesos Químicos y Alimentarios con Controladores Óptimo-Robustos" (PROMEP/103.5/12/7959; UNPA-PTC-119).

Apéndice A

Definición de parámetros

Biorreactor de Cholette

- c Concentración de sustrato
- q Velocidad de flujo de alimentación
- V Volumen
- c_f Concentración de alimentación de sustrato
- c_e Concentración de salida
- k_1 Máxima velocidad cinética
- k_2 Parámetro de inhibición
- m Índice de mezclado
- n Índice de mezclado

Biorreactor tipo tanque agitado continuo con reacción enzimática

- C_A Concentración del reactante
- T Temperatura del reactor
- q_c Concentración del reactante
- q Velocidad de flujo del proceso
- C_f Concentración de alimentación
- T_f Temperatura de alimentación
- T_{cf} Temperatura promedio del refrigerante
- V Volumen del reactor
- h Coeficiente de transferencia de calor
- k_0 Rapidez de reacción
- E/R Energía de activación

ΔH	Calor de reacción
ρ	Densidad
ρ_c	Densidad
C_p	Calor específico
C_{p_c}	Calores específicos

Reactor químico tipo tanque agitado

A	Coefficiente de transferencia de calor entre el tanque y la chaqueta de enfriamiento
C_{A0}	Concentración de reactivo en la entrada del CSTR
C_{A1}	Concentración de reactivo en la salida del CSTR
C_{E0}	Concentración de enzima en la entrada del CSTR
C_{E1}	Concentración de enzima en la salida del CSTR
C_{P1}	Concentración de producto en la salida del CSTR
C_p	Capacidad calorífica
E	Energía de activación
h	Coefficiente de transferencia de calor entre el tanque y la coraza de enfriamiento
k_0	Constante de reacción
k_m	Constante de Michaelis
Q	Rapidez de flujo en la salida del CSTR
Q_{01}	Rapidez de flujo en la solución reactiva
Q_{02}	Rapidez de flujo en la solución enzimática
Q_{03}	Rapidez de flujo del agua de enfriamiento
R	Constante de los gases
T_{01}	Temperatura de la solución reactiva
T_{02}	Temperatura del agua de enfriamiento
T_{11}	Temperatura en la salida del CSTR
T_{12}	Temperatura en la salida del agua de enfriamiento
V_c	Volumen de la coraza de enfriamiento
V_r	Volumen de la reacción
ΔH_r	Calor de reacción
ρ	Densidad

Apéndice B

Valores propios de la matriz característica y condición de estabilidad

Considerando una ecuación no lineal (ec. 1), la cual puede ser presentada linealmente por ec. (5). Las características de estabilidad están dadas por los valores propios de la matriz \mathbf{A} los cuales son las raíces de la ecuación característica,

$$|\lambda_i \mathbf{A} - \mathbf{I}_n| = 0 \quad (43)$$

donde $i = 1, 2, \dots, n$. Es conocido que un sistema es estable si y solo si la parte real de los valores propios (λ) de la matriz \mathbf{A} son no negativos. Sin embargo el comportamiento dinámico es caracterizado por la

parte real de los valores propios (Ruíz-López y col. (2006)).

Referencias

- Carrillo-Ahumada, J., Rodríguez-Jimenes, G.C. y García-Alvarado, M.A. (2011). Tuning optimal-robust linear MIMO controllers of chemical reactors by using Pareto optimality. *Chemical Engineering Journal* 174(1), 357-367.
- Chen, C.L., Wang, T.C. y Hsu, S.H. (2002). An LMI approach to H_∞ PI controller design *Journal of Chemical Engineering of Japan* 35(1), 83-93.
- Chidambaram, M. y Reddy, G.P. (1996). Nonlinear control of systems with input and output multiplicities. *Computers & Chemical Engineering* 20(3), 295-299.
- Conde-Mejía, C., Jiménez-Gutiérrez, A. y Elhalwagi, M. (2012). A comparison of pretreatment methods for bioethanol production from lignocellulosic materials. *Process Safety and Environmental Protection* 90(3), 189-202.
- Dhooge, A., Govaerts, W. y Kuznetsov, Y.A. (2003). MATCONT: A matlab package for numerical bifurcation analysis of ODEs. *ACM Transactions on Mathematical Software* 29(2), 141-164.
- Dieulot, J.Y. (2012). A productivity signal feedback controller for continuous bioreactors. *Journal of Process Control* 22, 1318-1324.
- Doedel, E., Wang, X. y Fairgrieve, T. (1986). AUTO: Software for continuation and bifurcation problems in ordinary differential equations. *Technical Report, California Institute of Technology*.
- Du, J., Song, C., Yao Y. y Li, P. (2013). Multilinear model decomposition of {MIMO} nonlinear systems and its implication for multilinear model-based control. *Journal of Process Control* 23(3), 271-281.
- Dutta, S., Chowdhury, R. y Bhattacharya, P. (2001). Parametric sensitivity in bioreactor: an analysis with reference to phenol degradation system. *Chemical Engineering Science* 56, 5103-5110.

- Gao, C., Li, K., Feng, E. y Xiu, Z. (2006). Nonlinear impulsive system of fed-batch culture in fermentative production and its properties. *Chaos, Solitons and Fractals* 28, 271-277.
- García-Alvarado, M.A. y Ruíz-López I.I. (2010) A design method for robust and quadratic optimal MIMO linear controllers. *Chemical Engineering Science* 65(11), 3431-3438.
- García-Alvarado, M.A., Ruiz-López, I.I. y Torres-Ramos, T. (2005). Tuning of multivariate PID controllers based on characteristic matrix eigenvalues, Lyapunov functions and robustness criteria. *Chemical Engineering Science* 60(4), 897-905.
- Herrera-López, E.J., Castillo-Toledo, B. y Femat, R. (2012). Fuzzy servo controller for CSTB with substrate inhibition kinetics. *Journal of Process Control* 22(6), 959-967.
- Ibarra-Junquera, V. y Rosu, H.C. (2007). PI-controlled bioreactor as a generalized Lienard system. *Computers and Chemical Engineering* 38, 225-231.
- Jhunjhunwala, M. K. y Chidambaram, M. (2001). PID controller tuning for unstable systems by optimization method. *Chemical Engineering Communications* 185, 91-113.
- Khalil, H.K. (1996). *Nonlinear Systems*. Editorial Macmillan Pub. Co. Estados Unidos de América.
- Liou, C.T. y Chien, Y.S. (1983). The effect of nonideal mixing on input multiplicity in a CSTR. *Chemical Engineering Science* 46(8), 2113-2116.
- Liu, C., (2013). Sensitivity analysis and parameter identification for a nonlinear time-delay system in microbial fed-batch process. *Applied Mathematical Modelling*, 38(4), 1449-1463.
- Lo, S.N. y Cholette, A. (1983). Multiplicity of conversion in a cascade of imperfectly stirred tank reactors. *Chemical Engineering Science* 38(1), 367-372.
- Márquez-Rubio, J.F., del-Muro-Cuéllar, B., Velasco-Villa, M. y Álvarez-Ramírez, J. (2010). Control basado en un esquema observador para sistemas de primer orden con retardo. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 9(1), 43-52.
- Namjoshi, A., Kienle, A. y Ramkrishna, D. (2003) Steady-state multiplicity in bioreactors: bifurcation analysis of cybernetic models. *Chemical Engineering Science* 58, 793-800.
- Normey-Rico, J.E. y Camacho, E.F. (2009) Unified approach for robust dead-time compensator design. *Journal of Process Control* 19, 38-47.
- Núñez, S., De Battista, H., Garelli, F. y Vignoni, A. (2013). Second-order sliding mode observer for multiple kinetic rates estimation in bioprocesses. *Control Engineering Practice* 21(9), 1259-1265.
- Patnaik, P.R. (2005). Application of the Lyapunov exponent to detect noise-induced chaos in oscillating microbial cultures. *Chaos, Solitons and Fractals* 26, 759-765.
- Rajinikanth, V. y Latha, K. (2012). Tuning and retuning of PID controller for unstable systems using evolutionary algorithm. *ISRN Chemical Engineering*, 1-10.
- Richter, H. y Stein, G. (2002). On Taylor series expansion for chaotic nonlinear systems. *Chaos, Solitons and Fractals* 13, 1783-1789.
- Romero, J.A. y Navarro, J.L. (2009). Improved efficiency in sensitivity calculations for bioreactor models. *Computers and Chemical Engineering*, 33, 903-910.
- Ruíz-López, I.I., Rodríguez Jimenes, G.C. y García-Alvarado, M.A. (2006). Robust MIMO PID controllers tuning based on complex/real ratio of the characteristic matrix eigenvalues *Chemical Engineering Science* 61(13), 4332-4340.
- Schaum, A., Alvarez, J. y Lopez-Arenas, T. (2013). Saturated linear dynamic output-feedback control for a class of three state continuous bioreactors with inhibited kinetics. *Journal of Process Control* 23, 332-350.
- Sivaramakrishnan, S., Tangirala, A. K. y Chidambaram, M. (2008). Sliding mode controller for unstable systems. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 22(1), 41-47.
- Sree, R.P. y Chidambaram, M. (2002). Identification of unstable transfer model with a zero by optimization method. *Journal of the Indian Institute of Science* 82, 219-225.

- Sree, R.P. y Chidambaram, M. (2003a). Control of unstable bioreactor with dominant unstable zero. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 17(2), 139-145.
- Sree, R.P. y Chidambaram, M. (2003b). A simple method of tuning PI controllers for unstable systems with zero. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 17(3), 207-212.
- Stavrinos, S.G., Banerjee, S., Suleyman, H. y Mehmet, O. (2013). Chaos and Complex Systems. *Springer Berlin Heidelberg*, 209-212.
- Vanavil, B., Harikumar, M.P. y Rao, A.S. (2014). Bifurcation analysis of two continuous bioreactors operated in series with recycle. *Chemical Engineering Research*, Artículo en prensa.
- Varma, A., Morbidelli, M. y Wu, H., (2005). Parametric sensitivity in Chemical Systems. *Cambridge University Press*.
- Volcke, E.I.P., Sbarciog, M., Noldus, E.J.L., De Beats y Loccufier, M. (2010). Steady state multiplicity of two-step biological conversion systems with general kinetics. *Mathematical Biosciences*, 228, 160-170.
- Wang, H., Zhang, N., Qiu, T., Zhao, J., He, X. y Chen, B. (2013). A process design framework for considering the stability of steady state operating points and Hopf singularity point in chemical processes. *Chemical Engineering Science*, 99, 252-264.