

UNIVERSIDAD CENTROCCIDENTAL
“LISANDRO ALVARADO”

Decanato de Ciencias y Tecnología
Licenciatura en Ciencias Matemáticas



“ANÁLISIS DINÁMICO DE UN REACTOR CONTINUO DE
TANQUE AGITADO. ”

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO PRESENTADO POR

BR. BORYS O. PÁEZ C.

COMO REQUISITO FINAL
PARA OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADO
EN CIENCIAS MATEMÁTICAS
ÁREA DE CONOCIMIENTO: ANÁLISIS NUMÉRICO Y ECUACIONES
DIFERENCIALES.

TUTOR: PROF. WILFREDO ANGULO

TUTOR: PROF. JOYNÉ CONTRERAS

Barquisimeto, Venezuela. Noviembre de 2008



Universidad Centroccidental
 "Lisandro Alvarado"
 Decanato de Ciencias y Tecnología
 Licenciatura en Ciencias Matemáticas



ACTA
 TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

Los suscritos miembros del Jurado designado por el Jefe del Departamento de Matemáticas del Decanato de Ciencias y Tecnología de la Universidad Centroccidental "Lisandro Alvarado", para examinar y dictar el veredicto sobre el Trabajo Especial de Grado titulado:

“ANÁLISIS DINÁMICO DE UN REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO. ”

presentado por el ciudadano BR. BORYS O. PÁEZ C. titular de la Cédula de Identidad No. 17.228871, con el propósito de cumplir con el requisito académico final para el otorgamiento del título de Licenciado en Ciencias Matemáticas.

Luego de realizada la Defensa y en los términos que imponen los Lineamientos para el Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Ciencias Matemáticas, se procedió a discutirlo con el interesado habiéndose emitido el veredicto que a continuación se expresa:

¹ _____

Con una calificación de _____ puntos.

En fe de lo expuesto firmamos la presente Acta en la Ciudad de Barquisimeto a los ____ días del mes de _____ de _____.

 TUTOR

 FIRMA

 PRINCIPAL

 FIRMA

 PRINCIPAL

 FIRMA

OBSERVACIONES:

¹ Aprobado ó Reprobado

*A mis padres por ser el tesoro más
valioso y hermoso que Dios me ha dado.*

AGRADECIMIENTOS

Al Dios eterno agradezco infinitamente por la vida, por la salud, por dirigir mis pasos en el transcurso de esta carrera y porque gracias a su intervención he alcanzado una meta más en mi vida. A Él sea la Gloria por todos los siglos.

A mis Padres Milagros y Borys por el amor incondicional y enorme que me han dado desde que comencé a existir, por el apoyo diario, por las cosas sencillas que parecieran no resaltar pero que hoy me mantienen feliz, por las palabras de ánimo, por la educación que me dieron, porque gracias a eso hoy soy lo que soy, por buscar la forma de ayudarme aún cuando la situación era difícil, por todo el esfuerzo que hicieron para que hoy alcanzara esta meta, estaré toda la vida agradecido, por eso y más es que los Amo con todas las fuerzas de mi corazón.

A mis hermanos y demás familiares que de alguna manera me brindaron el apoyo suficiente para continuar y finalizar esta meta.

A Liseth Valencia por hacerme reír, por escucharme, por dedicar tiempo a conversar de tantas cosas, por compartir todos los momentos desde el comienzo de este trabajo aún hasta hoy, por todos los momentos de alegría y tristezas que compartimos y que fueron productivos, en fin, nunca terminaría de mencionar todo lo que hizo por mí, siempre ha sido una excelente persona y sobre todo muy especial para mí.

A Willennys y Maria de los Angeles, por brindarme su amistad, por todos los momentos extraordinarios que compartimos dentro y fuera de la universidad, por siempre estar pendientes de mí, por sus palabras de ánimo y más aún por ser muy especiales para mí.

A Yankis, Manuel, Elifer, Isaac, Adrian, Efren, Javier, Luiggy, Rafael, José, Leonardo, en fin a todos mis amigos de promoción por la amistad que creció y sigue creciendo, por los momentos fuertes y preocupantes de la carrera que estuvimos luchando juntos y por los que no también.

A los profesores Wilfredo Angulo y Joyné Contreras por la confianza depositada en mi, por ayudarme desde el primer día que comencé el trabajo, realmente agradezco su ayuda, dedicación, esfuerzo; sin sus conocimientos no hubiera sido posible la culminación de este trabajo.

A todos las personas que con oraciones y de forma silenciosa aportaron considerablemente a mi formación personal, académica y espiritual.

Y a todo aquel que en este momento se me escape de la mente pero que llevo en mi corazón.

A todos ustedes muchas gracias.....!

Resumen

En este trabajo se analizó la dinámica de un reactor químico de tanque perfectamente agitado (o CSTR) en el que se lleva a cabo una reacción química genérica del tipo $A \rightarrow B$. Para esto, se planteó un modelo matemático de dos ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) altamente no lineales en las variables de estado concentración del reactivo A y temperatura del sistema. Se demostró que este es un problema con condiciones iniciales bien planteado y que presenta un parámetro característico del sistema que determina la presencia de uno a tres estados estacionarios. Se construyó el diagrama de histéresis que, junto con simulaciones numéricas, evidenciaron la presencia de estados estacionarios que pueden desaparecer o bifurcarse. La caracterización de los estados estacionarios se realizó empleando la teoría local de linealización y la de iteración monótona de punto fijo, y permitió clasificarlos como nodos atractores, puntos silla y puntos nodos-silla. Finalmente, se estudió el comportamiento global de las órbitas del sistema en el plano de fase mediante el análisis nulclinal y se constató la existencia de regiones en el diagrama de fase en las cuales las componentes del campo de direcciones cambian de signo de una región a otra.

Palabras claves: ecuaciones diferenciales, existencia de soluciones, diagrama de histéresis, simulación numérica, análisis nulclinal.

ÍNDICE

Agradecimientos	i
Introducción	1
Antecedentes	3
1. Planteamiento del Problema	5
1.1. Descripción del Sistema	5
1.2. Presentación del Modelo Matemático	7
1.3. Problemas Matemáticos a Estudiar	9
2. Análisis Cualitativo y Numérico de EDO's	12
2.1. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO's)	13
2.1.1. Generalidades	13
2.1.2. Existencia, unicidad y estabilidad de soluciones	14
2.1.3. Estabilidad de la solución	18
2.1.4. Sistemas de EDO's	22
2.1.5. Ecuaciones diferenciales autónomas	23
2.1.6. Sistemas autónomos no lineales	26
2.1.7. Análisis nulclinal de sistemas no lineales	35
2.2. Métodos Numéricos	36
2.2.1. Ecuaciones no lineales y su solución por iteración	37
2.2.2. Método de Runge Kutta para la resolución numérica de EDO's	41
2.3. Teoría de bifurcación	46
2.3.1. Aspectos básicos sobre bifurcación en sistemas de EDO's	46
3. Resultados y Análisis	50
3.1. Buen planteamiento del modelo matemático	50
3.2. Estabilidad de estados estacionarios e histéresis del sistema	52

4. Conclusiones y Recomendaciones	69
A.	71
Referencias	75

Índice de figuras

1.1. Esquema representativo de un CSTR.	6
2.1. Estabilidad de un estado estacionario \mathbf{u}^e	27
2.2. Estabilidad asintótica de un estado estacionario \mathbf{u}^e	28
2.3. Nodo Estable	31
2.4. Nodo Inestable	31
2.5. Punto Silla	32
2.6. Foco Estable	33
2.7. Foco Inestable	33
2.8. Punto Centro	33
3.1. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_1	55
3.2. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_5	56
3.3. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_3	56
3.4. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_2	57
3.5. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_4	57
3.6. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_1	58
3.7. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_2	58
3.8. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_3	58
3.9. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_4	58
3.10. Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_5	58
3.11. Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_3	67
3.12. Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_1	68
3.13. Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_2	68
3.14. Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_4	68
3.15. Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_5	68

INTRODUCCIÓN

Una de las *operaciones unitarias* más importantes en la industria química y petroquímica está asociada con la transformación de sustancias, o especies químicas, en productos de utilidad para el ser humano. Tal operación unitaria consiste en el estudio, análisis, diseño, construcción y puesta en marcha de equipos en donde la *reacción química* que define al proceso de transformación es llevada a cabo. Específicamente a éste tipo de equipos se les conoce con el nombre de *Reactores Químicos* y el análisis de los mismos es necesario para obtener información vital para el diseño, puesta en marcha y control del equipo a nivel industrial.

Entre todos los análisis que existen, el del comportamiento de evolución temporal para las variables de estado (en *estado dinámico*) es uno de los que se debe realizar con sumo cuidado, pues éste no solo aporta información para el diseño si no que también proporciona información necesaria para establecer *sistemas de control automático en tiempo real* sobre el proceso antes del arranque en la industria.

En este orden de ideas, el *modelado matemático* y la *simulación computacional* de los sistemas juega un rol importante. Por lo tanto, muchos investigadores se han dedicado a proponer modelos matemáticos no tan sencillos, pero tampoco demasiado complejos, con el propósito de investigar el comportamiento dinámico de ciertos reactores específicos usados a nivel industrial. Entre éstos, se encuentran los modelos matemáticos que provienen de *balances de materia y balance de energía* aplicados sobre *reactores químicos de tanque agitado* (CSTR) ampliamente usados en muchos procesos. Estos modelos presentan una estructura de problemas de valor inicial para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, altamente no lineales, a pesar de las simplificaciones que se consideren; esto hace que la resolución de dichos problemas resulte muy complicada.

Actualmente, gracias al gran desarrollo de la computación, los métodos numéricos permiten obtener soluciones aproximadas, y sus representaciones gráficas, de problemas que modelan situaciones reales. Sin embargo, estas soluciones deben ser validadas experimentalmente y en muchos casos complementadas con un estudio cualitativo del comportamiento de las mismas, a fin de dar confiabilidad a los resultados obtenidos numéricamente y poder emplearlos como una referencia para el diseño de equipos y de sistemas de control para los procesos, determinar rangos óptimos de operación

entre otras cosas.

En este sentido, el presente trabajo se realiza para analizar el comportamiento dinámico de un sistema reactivo en un CSTR adiabático. El mismo tiene por objeto estudiar la existencia y unicidad de la solución del modelo que describe la dinámica del sistema reactivo, investigar el comportamiento de las soluciones del modelo que parten de condiciones iniciales cercanas o alejadas de los estados estacionarios y describir el comportamiento de las soluciones de equilibrio respecto a la variación de algún parámetro característico del sistema.

El trabajo ha sido dividido en capítulos para una mejor comprensión del contenido. En el Capítulo 1 se expone el planteamiento del problema. En el Capítulo 2, se presentan los fundamentos teóricos sobre el análisis cualitativo y numérico de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's). En el Capítulo 3 se realiza todo el desarrollo que permite estudiar cualitativamente el comportamiento dinámico de las soluciones del problema planteado, objeto de la investigación. En el mismo se establecen y demuestran dos proposiciones, que permiten caracterizar las soluciones, resultados de la investigación; también se presenta el análisis de los resultados obtenidos.

En el Capítulo 4 se plantean las conclusiones y recomendaciones de la investigación.

Antecedentes

En la industria química y petroquímica, el reactor continuo de tanque agitado CSTR es uno de los equipos altamente usado [8]. Por tal motivo, tanto experimental como teóricamente se han generado numerosas investigaciones que hoy en día se consideran de vital importancia para el estudio de las reacciones químicas [24, 26]. Una de las virtudes de éste equipo es que en él se pueden estudiar reacciones químicas elementales y complejas con un simple arranque, posteriormente se puede repetir la experiencia sin mucha dificultad y controlando las variables que sean necesarias. Las variables controladas con más frecuencia, por su incidencia directa en la reacción química, son: la velocidad de flujo volumétrico de reactantes hacia el CSTR, la temperatura de los reactantes en todo el CSTR, la temperatura ambiente bajo la cual se encuentra localizado el CSTR y las proporciones o concentraciones de los reactantes dentro del CSTR.

El esquema clásico no isotérmico, de primer orden en el escenario de un reactor de flujo continuo bien agitado se ha estudiado extensamente y al respecto se tienen los trabajos de Zeldovich [44], van Heerden [42], Bilous y Amundson [20], Aris y Amundson [9, 10, 11], Hlavacek [41], Uppal [4, 3], Balakotaia y Luss [12, 15, 16, 13, 17], Farr y Aris [6], Planeaux y Jensen [38] y Ball y Gray en [18]. Tal esquema exotérmico simple (una reacción química simple que transforma un reactante a un producto) mostró que posee un comportamiento dinámico variado desde curvas de estados estacionarios que se han aislado, lazos de histéresis hasta bifurcaciones tipo Hopf (de ambos tipos: supercríticas y subcríticas) y órbitas homoclínicas.

Posteriormente, Sidhun *et al* en [29] estudiaron el comportamiento dinámico de una reacción elemental en un CSTR. En dicha reacción química, dos reactantes X y Y se alimentan al CSTR para ser transformados a un producto P según el esquema: $A + B \rightarrow P$ con naturaleza termodinámica del tipo exotérmica e irreversible. El estudio del sistema CSTR más la reacción, se realizó mediante un modelo matemático de tres ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) concernientes a la variación temporal de las concentraciones C_X y C_Y , respectivamente de las especies X y Y , y

la temperatura T del sistema. Planteado como un problema a valores iniciales para las EDO's, los investigadores demostraron la existencia de múltiples estados estacionarios con comportamiento oscilatorio en ciertas regiones validas para el grupo parámetros físico-químicos. De igual forma presentaron diagramas de bifurcación en varios espacios de parámetros de control y además probaron que el sistema siempre posee una región de atracción invariante globalmente.

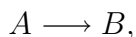
CAPÍTULO 1

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En este Capítulo presentaremos formalmente el Sistema Autónomo de Ecuaciones Diferenciales No Lineales que usamos para describir la dinámica del sistema reacción química-CSTR. Para esto, comenzaremos por describir el sistema físico-químico en términos de la reacción química genérica que se estudió y el equipo donde ésta se lleva a cabo. Posteriormente se presentará el modelo matemático completo que se deduce por medio de las Leyes de Conservación de la Materia y de la Energía siguiendo muy de cerca las referencias [8] y [19]. La versión del modelo presentada será en términos de variables y números adimensionales. Finalizamos este Capítulo con una presentación de los problemas a estudiar desde el punto de vista matemático consistente con las hipótesis inherentes al problema físico-químico estudiado.

1.1. Descripción del Sistema

El trabajo consistirá en realizar un estudio del *comportamiento dinámico* de un sistema conformado por un *reactor químico continuo de tanque agitado* (CSTR por sus siglas en inglés) y una *reacción química exotérmica de primer orden*



donde A es el compuesto químico que se transforma en el compuesto químico B ; conocidos como *reactante* y *producto* respectivamente.

Un reactor *continuo de tanque mezcla completa* o de *tanque perfectamente agitado* (CSTR), consiste de un *recipiente cilíndrico* de volumen V con tuberías de entrada y de salida. Las tuberías de entrada proporcionan el reactante A a una cierta *velocidad de flujo* y la tubería de salida proporciona la *mezcla* que contiene cierta cantidad de reactante A que no se ha transformado y el producto B a otra *velocidad de flujo*. En la siguiente figura se muestra una representación esquemática de un CSTR

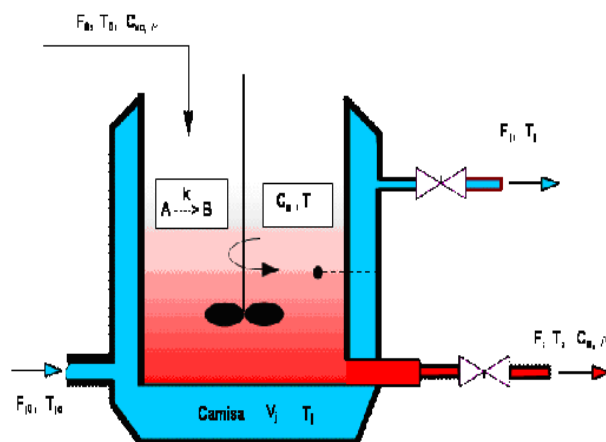


Figura 1.1: Esquema representativo de un CSTR.

Desde el punto de vista dinámico de la reacción química, la *concentración* C_A reaccionada del compuesto A se determina mediante la *velocidad de reacción*, la cual tomará diferentes valores numéricos dependiendo de la forma funcional como se defina o como se mida. En general, la velocidad de reacción es una *función no lineal* de la *temperatura* T del sistema (reacción química más el CSTR), usualmente expresada en unidades absolutas como grados Kelvin, y de la concentración C_A . En estos términos, a la velocidad de reacción se le denomina: *velocidad de consumo del reactante*. Usualmente, tal función es *no-negativa* y en algunos casos puede variar directamente con el tiempo. Para la reacción química que estamos considerando, la función no depende explícitamente del tiempo y es *separable* con respecto a sus argumentos. De manera más precisa, la velocidad de reacción viene dada por la siguiente función a valor real

$$r : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^+$$

$$(C_A, T) \mapsto r(C_A, T),$$

con

$$r(C_A, T) = f(C_A)k(T),$$

en donde $f = f(C_A)$ es una función de C_A definida por la *estequiometría* de la reacción según la *ley de acción de masas* y $k = k(T)$, llamado *coeficiente cinético de reacción*, es una función de T positiva y acotada. Aún más, la función $k = k(T)$ es

continua y estrictamente positiva para toda $T > 0$ y

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} k(T) = 0$$

en concordancia con el *principio termodinámico* que establece que la reacción química *no puede ocurrir* a cero absoluto de temperatura [8]. En éste orden de ideas, mediante estudios fisicoquímicos se han comprobado experimentalmente las premisas anteriores respecto a la función de velocidad de reacción y se han propuesto estructuras matemáticas de esta función para diversos mecanismos de reacción. Particularmente, para la reacción química considerada en este trabajo se ha probado que la *ley de Arrhenius* describe adecuadamente la función de velocidad de reacción y la misma viene dada por

$$r(C_A, T) = \kappa C_A e^{-E/RT}, \quad (1.1)$$

en donde $\kappa > 0$ es una constante denominada *factor pre-exponencial de Arrhenius*, $E > 0$, constante, es la *energía de activación* y $R > 0$ es la *constante de Joule*. Hacemos notar que para la ley de Arrhenius

$$f(C_A) = C_A \quad \text{y} \quad k(T) = \kappa e^{-E/RT}.$$

La cantidad de calor generada o absorbida por una reacción es proporcional a la función de velocidad de reacción r . Para una reacción exotérmica como la considerada en éste trabajo, el calor es, por lo tanto, liberado a una velocidad dada por

$$-\Delta H r(C_A, T) = -\Delta H \kappa C_A e^{-E/RT} \quad (1.2)$$

donde $\Delta H > 0$ es la *entalpía de reacción* considerada constante y el producto $\Delta H \kappa$ es una cantidad física del sistema denominada *calor de reacción*.

El hecho de que la reacción se lleve a cabo en un tanque de volumen V continuamente agitado (el CSTR) implica que la concentración C_A del reactante A y la temperatura T del sistema *permanecen uniforme*; en cualquier instante de tiempo $\bar{t} \geq 0$ la concentración y la temperatura poseen un mismo valor numérico en todas las partes del CSTR. De hecho C_A y T solo dependen del tiempo \bar{t} , y es precisamente esta variación la que queremos determinar.

1.2. Presentación del Modelo Matemático

Consideramos que el tanque es alimentado por una corriente de reactante A a una velocidad volumétrica Q que está a una temperatura fija T_f y en donde la con-

centración de A es constante y toma un valor fijo que denotaremos por C_{Af} . También consideramos que el producto B junto con el reactante A que no se transformó es removido del CSTR por una corriente a la misma velocidad volumétrica Q , de manera tal que el CSTR siempre permanece lleno y mantiene constante el volumen V de la mezcla reaccionante en todo instante de tiempo.

Ahora, un *balance de materia* por unidad de tiempo sobre la cantidad de reactante A , medida en *moles*,¹ en el CSTR viene dado por (ver [19])

$$\left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de cambio} \\ \text{del número de moles de} \\ A \text{ en el reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{entrada de} \\ A \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{salida de} \\ A \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de transformación} \\ \text{de } A \text{ por medio de} \\ \text{la reacción} \end{array} \right].$$

Este balance de materia proporciona la siguiente ecuación

$$V \frac{dC_A}{dt} = QC_{Af} - QC_A - Vr(C_A, T), \quad (1.3)$$

en donde $r(C_A, T)$ viene dada por (1.1). Si consideramos que el CSTR está *aislado* (adiabático), entonces el calor no se pierde por sus paredes. Luego, un balance de energía calórica viene dado por (ver [19])

$$\left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de cambio} \\ \text{de energía calórica} \\ \text{en el reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{entrada de energía} \\ \text{calórica} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{salida de energía} \\ \text{calórica} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Velocidad de generación} \\ \text{de energía calórica} \\ \text{debido a la reacción} \end{array} \right].$$

Este balance de energía proporciona la siguiente ecuación

$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} = QC_p T_f - QC_p T + (-\Delta H)r(C_A, T), \quad (1.4)$$

en donde $C_p > 0$ y $\rho > 0$ son, respectivamente, el *calor específico* por unidad de volumen y la densidad de la mezcla reaccionante, consideradas constantes.

Introduciendo las variables adimensionales

$$u_1 = \frac{C_A}{C_{Af}}, \quad u_2 = \left(\frac{T - T_f^0}{T_f} \right) \gamma, \quad t = \frac{\bar{t}Q_0}{V} \quad (1.5)$$

¹ El *mol* es la unidad de medida en química que se usa para indicar la cantidad de átomos presentes en una molécula de sustancia cualquiera. Un mol de cualquier sustancia equivale a 6.023×10^{23} unidades fórmula de la sustancia. Por ejemplo: una muestra de 12.011 gramos de Carbono equivale a 6.023×10^{23} átomos de carbono, o 1 mol de carbono debido a que el peso molecular del carbono es justamente igual a 12.011 gramos. Si la muestra de carbono es de 24.022 gramos, entonces en la muestra hay 12.046×10^{23} átomos de carbono o, equivalentemente, 2 moles de átomos de carbono.

y las constantes adimensionales

$$\alpha = \frac{\kappa V}{Q} e^{-\gamma}, \quad \beta = \left(\frac{(-\Delta H) C_{Af}^0}{\rho C_p T_f^0} \right) \gamma, \quad \gamma = \frac{E}{RT_f^0}, \quad (1.6)$$

$$q = \frac{Q}{Q_0}, \quad u_{1f} = \frac{C_{Af}}{C_{Af}^0}, \quad u_{2f} = \left(\frac{T - T_f^0}{T_f^0} \right) \gamma,$$

en donde C_{Af}^0 , T_f^0 y Q_0 son los valores *nominales* o de *referencia* de las cantidades C_{Af} , T_f y Q , encontramos que (1.3) y (1.4) se transforman en

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = q(u_{1f} - u_1) - \alpha u_1 k(u_2), \\ \frac{du_2}{dt} = q(u_{2f} - u_2) + \alpha \beta u_1 k(u_2), \end{cases} \quad (1.7)$$

y ahora $k = k(u_2)$ es la función

$$k(u_2) = \exp\left(\frac{u_2}{1 + \frac{u_2}{\gamma}}\right)$$

para la cual se tiene que

$$\lim_{u_2 \rightarrow 0^+} k(u_2) = 1 \quad \text{y} \quad \lim_{u_2 \rightarrow \infty} k(u_2) = e^\gamma.$$

1.3. Problemas Matemáticos a Estudiar

En ésta sección presentamos los problemas matemáticos que se estudiaron en este trabajo con el propósito de describir la dinámica del CSTR. Estos problemas son consistentes con algunas consideraciones físicas adicionales que particularizan el sistema de EDO's (1.7) y además se establece el dominio de validez del sistema siguiendo muy de cerca el trabajo realizado por [10].

En este orden de ideas, se considera que la velocidad nominal de flujo Q_0 es siempre idéntica a la cantidad no nominal Q . Esto implica que $q = 1$ aún cuando la velocidad de flujo Q tenga variaciones en un cierto rango de trabajo. El efecto solo se verá reflejado en el parámetro α que consideraremos crítico según como lo demuestran los autores de la referencias [8] y [19] en sus experiencias. En efecto, el parámetro α por cada elección de Q se considera variable entre cero y uno, es decir

$$0 < \alpha < 1.$$

Por otro lado, siguiendo el trabajo de Aris y Amundson en [10] y Bequette en [19], se consideran fijos los parámetros $\beta > 0$ y $\gamma > 0$. Bajo el mismo argumento de que las cantidades nominales son idénticas a las no nominales tendremos siempre que $u_{1f} = 1$ y $u_{2f} = 0$.

Por otro lado, consistentemente con la física del problema y el adimensionamiento introducido tenemos que

$$0 \leq u_1 \leq 1 \quad \text{y} \quad 0 \leq u_2 \leq \beta,$$

con esto, el dominio de validez de las funciones lado derecho en el sistema de EDO's (1.7) es el subconjunto $\bar{\Omega}$ de \mathbb{R}_+^2 definido por

$$\bar{\Omega} = [0, 1] \times [0, \beta]. \quad (1.8)$$

Si especificamos condiciones iniciales $u_1^0 \in [0, 1]$ y $u_2^0 \in [0, \beta]$ respectivamente para u_1 y u_2 , entonces con lo anterior, el sistema de EDO's (1.7) se reduce al siguiente problema de Cauchy: dado un intervalo $[0, \tau]$, con $\tau > 0$ una constante fija, dada la función $\mathbf{f} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^2$, dado $0 < \alpha < 1$, dadas β y γ constantes estrictamente positivas y fijas, encontrar la función $\mathbf{u} : [0, \tau] \rightarrow \bar{\Omega}$ tal que

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), & \forall t \in (0, \tau] \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \end{cases} \quad (1.9)$$

En este problema $\mathbf{u}^0 \in \bar{\Omega}$ es el vector de condiciones iniciales, es decir

$$\mathbf{u}^0 = (u_1^0, u_2^0)$$

y la función vectorial $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = (f_1(\mathbf{u}), f_2(\mathbf{u}))$ viene dada por

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = (1 - u_1 - \alpha u_1 k(u_2), -u_2 + \alpha \beta u_1 k(u_2)) \quad (1.10)$$

en donde $k = k(u_2)$ es la función que se definió en la sección anterior.

Los estados de equilibrio del sistema físico-químico en estudio se corresponden con las soluciones de equilibrio del problema (1.9). Más específicamente, es el vector $\mathbf{u}^e = (u_1^e, u_2^e) \in \bar{\Omega}$ tal que

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}^e) = \mathbf{0}. \quad (1.11)$$

Con lo anterior, en pro de analizar la dinámica del sistema, se plantean los siguientes problemas matemáticos a estudiar:

1. **Buen planteamiento del modelo matemático:** investigar la existencia y unicidad de la solución al problema de Cauchy (1.9).
2. **Estabilidad de las soluciones equilibrio:** consistirá en investigar el comportamiento local de las soluciones de equilibrio del sistema (1.9) que parten de condiciones iniciales cercanas o alejadas de los estados estacionarios \mathbf{u}^e .
3. **Histérisis del sistema:** investigar el comportamiento de las soluciones de equilibrio respecto a la variación del parámetro crítico α .

El primer problema será abordado verificando las hipótesis de los resultados fundamentales de la teoría cualitativa de ecuaciones diferenciales no lineales en el contexto de sistema autónomos. Este estudio será complementado mediante la construcción e interpretación de diagramas de fases haciendo uso del análisis nulclinal y un método de aproximación numérica para ecuaciones diferenciales. El segundo problema será tratado desde dos enfoques complementarios: uno en el cual se considera el sistema de ecuaciones no lineales como un problema de aproximaciones sucesivas y otro en el cual se linealiza el sistema de ecuaciones en un entorno del vector de estados estacionarios \mathbf{u}^e y se describe la naturaleza de estos estados de acuerdo al comportamiento de las soluciones del sistema diferencial lineal cuando el tiempo tiende a infinito. Finalmente, el tercer problema será abordado utilizando la teoría fundamental de bifurcaciones.

CAPÍTULO 2

ANÁLISIS CUALITATIVO Y NUMÉRICO DE EDO'S

En el presente Capítulo exponemos los conceptos y resultados fundamentales que sustentan el trabajo de investigación.

Presentamos de forma resumida la teoría cualitativa de análisis de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) en el contexto de sistema autónomos. Algunos de los resultados solo son enunciados y para detalles técnicos de las pruebas referimos al lector a literatura especializada tal como: [2], [23] y [5]. Para la construcción y análisis de diagramas de fases del sistema se expone brevemente la técnica de análisis nulclinal que puede ser consultada de manera más extensa y con algunos ejemplos prácticos en [21] y [35]. En este mismo orden de ideas, se presenta el método numérico de Runge Kutta como herramienta de aproximación a las soluciones a EDO's y utilizado para el trazado de órbitas en el diagrama de fase.

Continuamos la exposición de este Capítulo con los conceptos y resultados matemáticos que permitieron determinar las soluciones de equilibrio del sistema de EDO's, estudiar la estabilidad y naturaleza de estas soluciones. Específicamente, se trata lo concerniente a fundamentos sobre el análisis de ecuaciones no lineales tanto desde el punto de vista cualitativo como desde el punto de vista numérico; la teoría de aproximación sucesiva se presenta brevemente. De igual manera, presentamos algunos conceptos y resultados sobre la linealización de sistemas de ecuaciones para el estudio del comportamiento local de las órbitas del problema (1.9) en un entorno del estado estacionario. Detalles sobre el desarrollo de definiciones y resultados de estas teorías pueden ser consultados en [40] y [39].

Finalizamos este Capítulo con los aspectos básicos sobre el comportamiento de bifurcación en sistemas de EDO's que nos permitieron estudiar los cambios drásticos en el diagrama de fases del sistema, respecto al número de estados estacionarios como

función de pequeñas variaciones en el parámetro crítico del sistema.

2.1. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO's)

2.1.1. Generalidades

Las ecuaciones diferenciales son unas de las herramientas matemáticas más importantes y usadas para el modelado de problemas en ciencia e ingeniería. Por esta razón, el estudio de las ecuaciones diferenciales se ha vuelto de vital importancia para muchos investigadores, pues es necesario establecer bajo que condiciones el modelo matemático es un problema bien planteado y también diseñar, construir e implementar métodos numéricos para la aproximación adecuada a la solución o conjunto de soluciones asociado al problema. En este orden de ideas, en esta sección presentamos algunos fundamentos básicos sobre la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) que usamos para investigar el buen planteamiento del problema de Cauchy (1.9) y aproximar numéricamente la solución.

Sin pérdida de generalidad, consideraremos el siguiente problema de valor inicial (PVI) o de Cauchy

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \text{ tal que} \\ \frac{du}{dt}(t) = f(t, u), \quad \forall t \in [a, b] \\ u(t_0) = \varphi_0. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

La función dada $f(t, u)$ es *continua* para todo (t, u) en algún dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$; y (t_0, φ_0) es un punto en Ω . Los resultados que daremos para (2.1) serán generalizados para sistemas de EDO's de primer orden derivados de las anteriores mediante una notación vectorial y matricial adecuada como la que hemos usado en el PVI del CSTR.

Diremos entonces que una función $\varphi(t)$ es una solución sobre $[a, b]$ de (2.1) si para todo $t \in [a, b]$ se cumple que:

- 1.) $(t, \varphi(t)) \in \Omega$,
- 2.) $\varphi(t_0) = \varphi_0$ para todo $t_0 \in [a, b]$,
- 3.) φ' existe y $\frac{d\varphi}{dt}(t) = f(t, \varphi(t))$.

Como notación a lo largo de esta sección, $\varphi(t)$ denotará la solución verdadera de la EDO asociada al PVI.

Para obtener alguna *idea geométrica* de las soluciones de una EDO, podemos ver el *campo de direcciones* inducido por la EDO sobre el plano $t - u$. Si $\varphi(t)$ es una solución que pasa a través de (t_0, φ_0) , entonces la pendiente de $\varphi(t)$ en (t_0, φ_0) es $\frac{d\varphi}{dt}(t) = f(t_0, \varphi_0)$. Dentro del dominio Ω de $f(t, u)$, escogemos un conjunto de puntos representativos (t, u) y entonces trazamos un segmento de línea corto con pendiente $f(t, u)$ a través de cada (t, u) . En síntesis, por cada $(t, u) \in \Omega$ la pendiente m de la solución $\varphi = \varphi(t)$ puede hallarse mediante la fórmula explícita $m = f(t, u)$. Por lo tanto, cada valor $m_{ij} = f(t_i, \varphi_j)$ calculado por distintos puntos de Ω , representa la pendiente de la *recta tangente* a la solución que pasa por (t_i, φ_j) . Por lo anterior, el *campo de direcciones* no es más que una gráfica en la que se representan las pendientes $\{m_{ij}\}$ en una colección de puntos de Ω y puede usarse para ver como se va ajustando una solución a la pendiente dada. Esta misma idea será adoptada más adelante en sistemas de EDO's con dos incógnitas pero haciendo uso de una herramienta geométrica adaptada al caso.

2.1.2. Existencia, unicidad y estabilidad de soluciones

En muchos casos prácticos el PVI (2.1) tiene una única solución. En ésta sección, presentaremos algunos resultados teóricos concernientes a éste aspecto, esto nos permitirá investigar el buen planteamiento de nuestro problema lo cual además fundamenta el análisis numérico del problema. Daremos condiciones para asegurar que el problema (2.1) tiene *una y solo una solución*. De igual manera, consideraremos la *estabilidad de tal solución* cuando la data inicial φ_0 y la derivada $f(t, u)$ son *perturbadas* mediante *cantidades pequeñas*. Una vez aclarado éstos aspectos teóricos, los métodos numéricos serán planteados y analizados de forma *consistente* con el problema original garantizando así propiedades de *convergencia* y *estabilidad numérica*.

En éste orden de ideas, el dominio Ω de ahora en adelante será considerado *convexo*¹. Tenemos entonces el siguiente resultado de existencia y unicidad local

Teorema 2.1. *Sea $f(t, u)$ una función continua de t y de u , para todo $(t, u) \in \Omega$; y sea (t_0, φ_0) un punto interior de Ω . Considerando que $f(t, u)$ satisface la **condición***

¹ Se dice que $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ es *convexo*, si siempre que (x_1, y_1) y (x_2, y_2) pertenecen a Ω , entonces el punto $((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2, (1 - \lambda)y_1 + \lambda y_2)$ también pertenece a Ω para cada $\lambda \in [0, 1]$.

de Lipschitz

$$|f(t, v) - f(t, w)| \leq K|v - w|, \quad \forall (t, v), (t, w) \in \Omega, \quad (2.2)$$

para algún $K \geq 0$. Entonces para un intervalo $I = (t_0 - \tau, t_0 + \tau)$ tomado adecuadamente, existe una única solución $\varphi(t)$ sobre I del PVI (2.1).

Una observación muy importante es que si $\frac{\partial f(t, u)}{\partial u}$ existe y está acotada sobre Ω , entonces (2.2) se satisface. Simplemente, sea

$$K = \max_{(t, u) \in \Omega} \left| \frac{\partial f(t, u)}{\partial u} \right|. \quad (2.3)$$

Entonces, por el teorema del valor medio existe ξ entre v y w tal que

$$f(t, v) - f(t, w) = \frac{\partial f(t, u)}{\partial u} (v - w),$$

de donde obtenemos finalmente; después de aplicar valor absoluto, la condición de Lipschitz se tiene con constante K definida mediante la expresión (2.3).

Esquema de la prueba del Teorema 2.1. Aquí en esta sección sólo daremos un esquema de la prueba; el lector puede consultar los detalles en cualquiera de las referencias especializadas que nombramos al inicio del Capítulo.

La idea está en reformular el problema (2.1) como una *ecuación integral equivalente*. En efecto, como f es una función continua con respecto a t entonces la solución del problema (2.1) satisface

$$u(t) - \varphi_0 = \int_{t_0}^t f(s, u(s)) ds. \quad (2.4)$$

Al inverso, si u está definida por (2.4), entonces u es continua en I y $u(t_0) = \varphi_0$. Aún más, ya que u es una *primitiva* de la función continua $f(\cdot, u(\cdot))$, entonces $u \in \mathcal{C}^1(I)$ y satisface la ecuación diferencial $\frac{du}{dt} = f(t, u(t))$ por el teorema fundamental del cálculo.

Para demostrar que (2.4) tiene una única solución, definimos una sucesión de funciones $\varphi_n(t)$ de la manera siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para } t_0 - \tau \leq t \leq t_0 + \tau, \\ \varphi_0(t) = \varphi_0, \\ \varphi_{n+1}(t) = \varphi_0 + \int_{t_0}^t f(s, \varphi_n(s)) ds \quad n \geq 0, \end{array} \right. \quad (2.5)$$

con τ una constante tomada de tal forma que

$$\tau K < 1. \quad (2.6)$$

Posteriormente, se demuestra que si τ se toma lo suficientemente pequeño, entonces todas las funciones $\varphi_n(t)$ permanecen en Ω y convergen a la función $\varphi(t)$, *uniformemente* sobre $[t_0 - \tau, t_0 + \tau]$. Entonces tomando el límite en (2.5) se obtiene que

$$\varphi(t) = \varphi_0 + \int_{t_0}^t f(s, \varphi(s)) ds, \quad t_0 - \tau \leq t \leq t_0 + \tau. \quad (2.7)$$

Vale la pena resaltar en éste punto que lo que se está planteando es un problema del análisis funcional no lineal, en donde se considera el problema de *punto fijo* para un operador definido por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado el operador } T : \mathcal{K} \rightarrow V, \text{ encontrar } u \in \mathcal{K} \text{ tal que} \\ u = T(u), \end{array} \right.$$

en donde V es un espacio de Banach (o de manera simple: un espacio vectorial lineal normado en donde toda sucesión tipo Cauchy converge bajo la norma asociada) y \mathcal{K} es un subespacio de V . Entonces, para resolver tal problema se tiene del análisis funcional el *teorema de punto fijo de Banach* que dice:

Teorema 2.2 (Teorema de punto fijo de Banach). *Considerando que \mathcal{K} es un conjunto cerrado no vacío en un espacio de Banach V , y además, que $T : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$ es una aplicación **contractiva** con constante contractiva $\alpha \in [0, 1)$, es decir, si*

$$\|T(u) - T(v)\|_V \leq \alpha \|u - v\|_V \quad \forall u, v \in \mathcal{K}.$$

Entonces los resultados siguientes se tiene:

1. *Existencia y unicidad: existe un único $u \in \mathcal{K}$ tal que $u = T(u)$.*
2. *Convergencia y estimaciones para el error de iteración: para cualquier $u_0 \in \mathcal{K}$, la sucesión $\{u_n\} \subseteq \mathcal{K}$ definida por $u_{n+1} = T(u_n)$, $n = 0, 1, \dots$, converge a u :*

$$\|u_n - u\|_V \rightarrow 0 \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty.$$

Para el error, las siguientes cotas son validas:

$$\|u_n - u\|_V \leq \left(\frac{\alpha^n}{1 - \alpha} \right) \|u_0 - u_1\|_V,$$

$$\|u_n - u\|_V \leq \left(\frac{\alpha}{1 - \alpha} \right) \|u_{n-1} - u_n\|_V,$$

$$\|u_n - u\|_V \leq \alpha \|u_{n-1} - u\|_V.$$

Retomando el esquema de la demostración, lo que a continuación debemos hacer es obtener la *velocidad de convergencia*. Para esto, restamos (2.5) de (2.7) y acotamos. Así, para $t \in (t_0 - \tau, t_0 + \tau)$

$$|\varphi(t) - \varphi_{n+1}(t)| \leq \int_{t_0}^t |f(s, \varphi(s)) - f(s, \varphi_n(s))| ds,$$

pero por la condición de continuidad Lipschitz

$$|f(s, \varphi(s)) - f(s, \varphi_n(s))| \leq K |\varphi(s) - \varphi_n(s)|,$$

luego

$$|\varphi(t) - \varphi_{n+1}(t)| \leq K \int_{t_0}^t |\varphi(s) - \varphi_n(s)| ds.$$

Como φ y φ_n son funciones $\mathcal{C}^0(\bar{I})$, entonces $(\varphi - \varphi_n) \in \mathcal{C}^0(\bar{I})$, luego podemos usar la estándar norma del máximo para acotar tal diferencia, es decir

$$\|\varphi - \varphi_n\|_\infty = \max_{x \in \bar{I}} |\varphi(t) - \varphi_n(t)| \geq |\varphi(t) - \varphi_n(t)|,$$

por tanto

$$|\varphi(t) - \varphi_{n+1}(t)| \leq K \|\varphi - \varphi_n\|_\infty \int_{t_0}^t ds$$

de donde

$$\|\varphi(t) - \varphi_{n+1}(t)\|_\infty \leq K \|\varphi - \varphi_n\|_\infty |t - t_0|.$$

Sin perdida de generalidad, ahora podemos definir

$$\tau = \max_{t \in \bar{I}} |t - t_0| \geq |t - t_0|,$$

entonces

$$|\varphi(t) - \varphi_{n+1}(t)| \leq \tau K \|\varphi - \varphi_n\|_\infty.$$

Dado a que en ésta última expresión el lado derecho es independiente de t , entonces podemos tomar el máximo del lado izquierdo para obtener finalmente que

$$\|\varphi - \varphi_{n+1}\|_\infty \leq \tau K \|\varphi - \varphi_n\|_\infty \quad n \geq 0. \quad (2.8)$$

Note que la desigualdad (2.8) implica que

$$\|\varphi - \varphi_n\|_\infty \leq (\tau K)^n \|\varphi - \varphi_0\|_\infty, \quad (2.9)$$

asi que con la condición de que $0 \leq \tau K < 1$ podemos afirmar que el orden de convergencia es *lineal*. Es decir, el error decrece linealmente en τK por iteración.

Finalmente, la prueba de unicidad de $\varphi(t)$ es similar al proceso anterior para obtener (2.7): Sea $\tilde{\varphi}(t)$ una segunda solución de (2.4). Entonces

$$\varphi(t) - \tilde{\varphi}(t) = \int_{t_0}^t [f(s, \varphi(s)) - f(s, \tilde{\varphi}(s))] ds,$$

lo cual implica que

$$\|\varphi - \tilde{\varphi}\|_\infty \leq \tau K \|\varphi - \tilde{\varphi}\|_\infty.$$

Ahora, como $\tau K < 1$ entonces

$$\|\varphi - \tilde{\varphi}\|_\infty < \|\varphi - \tilde{\varphi}\|_\infty,$$

implicando esto que $\tilde{\varphi} \equiv \varphi$ y concluimos la prueba. \square

2.1.3. Estabilidad de la solución

La estabilidad de la solución $\varphi(t)$ se examina cuando el PVI se cambia por un *problema perturbado* definido de la manera siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \text{ tal que} \\ \frac{du}{dt}(t) = f(t, u) + \delta(t), \quad \forall t \in \bar{I} \\ u(t_0) = \varphi_0 + \delta_0 \end{array} \right. \quad (2.10)$$

con las mismas hipótesis para $f(t, u)$ que hemos pedido en el Teorema 2.1. Aún más, se considera que $\delta(t)$ es una función continua para todo $t \in I$ tal que $(t, u) \in \Omega$ para algún u . Puede entonces demostrarse que el problema (2.10) *tiene solución unica*, la cual denotaremos por $\varphi(t; \delta, \delta_0)$. Los resultados del Teorema 2.1 serán validos para un

intervalo fijo $[t_0 - \tau, t_0 + \tau]$, uniformemente para toda perturbación δ_0 y $\delta(t)$ siempre y cuando satisfagan que

$$|\delta_0| \leq \varepsilon \quad \text{y} \quad \|\delta\|_\infty \leq \varepsilon \quad (2.11)$$

para algún ε suficientemente pequeño.

De manera análoga al problema no perturbado, la función $\varphi(t; \delta, \delta_0)$ del problema perturbado (2.10) satisface la siguiente expresión integral

$$\varphi(t; \delta, \delta_0) = \varphi_0 + \delta_0 + \int_{t_0}^t [f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) + \delta(s)] ds, \quad (2.12)$$

luego, al restar (2.12) y (2.7) tenemos que

$$\varphi(a; \delta, \delta_0) - \varphi(t) = z(t; \delta, \delta_0) = \delta_0 + \int_{t_0}^t [f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) - f(s, \varphi(s))] ds + \int_{t_0}^t \delta(s) ds. \quad (2.13)$$

Usando la expresión anterior, podemos demostrar el siguiente resultado de estabilidad.

Teorema 2.3. *Sean los PVI (2.1) y (2.10) bien planteados, es decir con una única solución. Considerando que $\delta(t)$ es continua sobre Ω y que ε en (2.11) es lo suficientemente pequeño, la solución perturbada $\varphi(t; \delta, \delta_0)$ satisface*

$$\|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \leq k(\varepsilon + \tau\|\delta\|_\infty) \quad (2.14)$$

con $k = \frac{1}{1 - \tau K}$. Entonces, de acuerdo a ésta estimación diremos que la solución del problema (2.1) es **estable** con respecto a perturbaciones en sus datos.

Demostración. Basta con acotar la expresión (2.13). En efecto:

$$\begin{aligned} |\varphi(t; \delta, \delta_0) - \varphi(t)| &= \left| \delta_0 + \int_{t_0}^t [f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) - f(s, \varphi(s))] ds + \int_{t_0}^t \delta(s) ds \right|, \\ &\leq |\delta_0| + \int_{t_0}^t |f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) - f(s, \varphi(s))| ds + \int_{t_0}^t |\delta(s)| ds. \end{aligned}$$

Estimemos cada término. Por un lado, la hipótesis sobre la perturbación δ_0 nos proporciona el término $|\delta_0| \leq \varepsilon$. Por otro lado, cómo f es Lipschitz, entonces

$$\int_{t_0}^t |f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) - f(s, \varphi(s))| ds \leq K \int_{t_0}^t |\varphi(s; \delta, \delta_0) - \varphi(s)| ds$$

de donde, al ser $(\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi)$ un función de clase \mathcal{C}^0 , tenemos por norma usual del máximo que

$$\int_{t_0}^t |f(s, \varphi(s; \delta, \delta_0)) - f(s, \varphi(s))| ds \leq K \|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \int_{t_0}^t ds.$$

Por el mismo argumento, encontramos que

$$\int_{t_0}^t |\delta(s)| ds \leq \|\delta\|_\infty \int_{t_0}^t ds,$$

por tanto

$$|\varphi(t; \delta, \delta_0) - \varphi(t)| \leq \varepsilon + K \|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \int_{t_0}^t ds + \|\delta\|_\infty \int_{t_0}^t ds.$$

Por definición, la medida o longitud del subintervalo $[t_0, t]$ es

$$|t - t_0| = \int_{t_0}^t ds \leq \max_{t \in I} |t - t_0| = \tau,$$

entonces

$$|\varphi(t; \delta, \delta_0) - \varphi(t)| \leq \varepsilon + \tau K \|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty + \tau \|\delta\|_\infty,$$

pero como el lado derecho de la desigualdad anterior no depende de t , entonces podemos tomar el máximo del lado izquierdo para obtener

$$\|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \leq \varepsilon + \tau K \|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty + \tau \|\delta\|_\infty,$$

$$(1 - \tau K) \|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \leq \varepsilon + \tau \|\delta\|_\infty,$$

$$\|\varphi(\cdot; \delta, \delta_0) - \varphi\|_\infty \leq \left(\frac{1}{1 - \tau K} \right) (\varepsilon + \tau \|\delta\|_\infty),$$

pues, para $\tau K < 1$ se tiene que $(1 - \tau K) > 0$ y entonces concluimos la prueba tomando $k = \frac{1}{1 - \tau K}$. \square

Con éste resultado podemos ver que *pequeños cambios* en la data (del orden $\mathcal{O}(\varepsilon)$) *producen pequeños cambios en la solución*; aún cuando k pueda ser muy grande. Así, diremos que la solución φ **depende continuamente de la data**; lo cual significa que el PVI *está bien planteado* y es *estable*.

Es de hacer notar que un problema en general puede estar bien planteado, pero *mal condicionado* con respecto al *cálculo computacional*. Esto también es cierto para

los problemas con EDO's, aunque no ocurra con mucha frecuencia. Para entender mejor cuando puede ocurrir este fenómeno, usaremos la expresión (2.13) a fin de estimar la perturbación en φ debida a las perturbaciones.

Dado que δ_0 y $\delta(t)$ entran en los resultados con el mismo orden de magnitud ($\sim \mathcal{O}(\varepsilon)$ para ε lo suficientemente pequeño) en los resultados finales tal como lo indica la estimación dada por el Teorema 2.3, simplificaremos la discusión tomando $\delta \equiv 0$. Sea entonces $\varphi(t; \delta_0)$ la solución al problema perturbado

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u), \\ u(t_0) = \varphi_0 + \delta_0, \end{cases}$$

entonces de (2.13) tenemos por un lado que

$$z(t; \delta_0) = \delta_0 + \int_{t_0}^t [f(s, \varphi(s; \delta_0)) - f(s, \varphi(s))] ds,$$

y por otro lado al aplicar el Teorema del Valor Medio al integrando de ésta última expresión encontraremos que

$$z(t; \delta_0) = \delta_0 + \int_{t_0}^t \frac{\partial f(s, \varphi(s))}{\partial u} z(s; \delta_0) ds. \quad (2.15)$$

Esta ecuación integral es equivalente al PVI:

$$\begin{cases} \frac{dz(t; \delta_0)}{dt} = \frac{\partial f(t, \varphi(t))}{\partial u} z(t; \delta_0), \\ z(t_0; \delta_0) = \delta_0, \end{cases}$$

el cual puede ser resuelto dando

$$z(t; \delta_0) = \delta_0 e^{\int_{t_0}^t \frac{\partial f(s, \varphi(s))}{\partial u} ds}. \quad (2.16)$$

La expresión anterior es una aproximación válida mientras $z(t; \delta_0)$ no llegue a ser demasiado grande, puesto que la aproximación (2.15) no seguirá teniendo validez.

En éste orden de ideas, diremos entonces que los problemas en EDO's estarán *mal condicionados* cuando $\frac{\partial f(t, \varphi(t))}{\partial u}$ es *negativa* para $t \geq t_0$, pues la expresión (2.16) nos dice que el efecto de la perturbación δ_0 decrecerá cuando t se incrementa. Por otro lado, aquellos problemas para los cuales $\frac{\partial f(t, \varphi(t))}{\partial u}$ es *negativa* pero cuya *magnitud es muy grande*, estarán *bien condicionados*; aun cuando no pareciera, esto también será una molestia para muchos de los métodos numéricos. Las ecuaciones en éste último rubro son conocidas con el nombre de *EDO's Stiff*.

2.1.4. Sistemas de EDO's

Los conceptos y resultados que hemos presentado en la sección anterior se pueden generalizar a sistemas de n -EDO's a *primer orden* con la siguiente estructura

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = f_1(t, u_1, u_2, \dots, u_n), & u_1(t_0) = \varphi_{1,0}, \\ \frac{du_2}{dt} = f_2(t, u_1, u_2, \dots, u_n), & u_2(t_0) = \varphi_{2,0}, \\ \vdots \\ \frac{du_n}{dt} = f_n(t, u_1, u_2, \dots, u_n), & u_n(t_0) = \varphi_{n,0}. \end{cases} \quad (2.17)$$

Para extender los resultados, lo que hacemos es ver tal sistema como una sola EDO de primer orden pero con estructural vector-matricial introduciendo la siguiente notación:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}(t, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_1(t, \mathbf{u}) \\ f_2(t, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_n(t, \mathbf{u}) \end{bmatrix}, \quad \text{y} \quad \boldsymbol{\varphi}_0 = \begin{bmatrix} \varphi_{1,0} \\ \varphi_{2,0} \\ \vdots \\ \varphi_{n,0} \end{bmatrix},$$

entonces el sistema (2.17) se escribe como:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \\ \mathbf{u}(t_0) = \boldsymbol{\varphi}_0. \end{cases} \quad (2.18)$$

Al reemplazar el valor absoluto por normas vectoriales, virtualmente todos los resultados precedentes caracterizan éste PVI-vectorial.

Para EDO's de *orden mayor*, el PVI

$$\begin{aligned} u^{(m)} &= f(t, u, u', \dots, u^{(m-1)}), \\ u(t_0) &= \varphi_0, \quad u'(t_0) = \varphi'_0, \dots, u^{(m-1)}(t_0) = \varphi_0^{(m-1)} \end{aligned}$$

puede ser transformado a un sistema de primer orden. Para esto, introducimos los siguientes cambios:

$$u_1 = u, \quad u_2 = u', \quad \dots, \quad u_m = u^{(m-1)}.$$

Estas funciones satisfacen el sistema:

$$\begin{aligned} u_1' &= u_2, & u_1(t_0) &= \varphi_0, \\ u_2' &= u_3, & u_2(t_0) &= \varphi_0', \\ &\vdots & & \\ u_{m-1}' &= u_m, & & \\ u_m' &= f(t, u_1, \dots, u_m), & u_m(t_0) &= \varphi_0^{(m-1)}. \end{aligned}$$

Existen métodos numéricos especiales para EDO's de orden m ; pero el desarrollo extenso de los mismos se ha hecho de manera significativa solamente para $m = 2$, los cuales se corresponden con problemas de aplicaciones de la mecánica Newtoniana via la *segunda Ley de Newton*. EDO's de más orden se resuelven primero convirtiéndolas a un sistema equivalente de primer orden descrito como el anterior. Finalmente señalamos que en la sección siguiente introduciremos conceptos y resultados sobre la estabilidad de soluciones desde el punto de vista más topológico-geométrico.

2.1.5. Ecuaciones diferenciales autónomas

Una ecuación diferencial autónoma es una ecuación de la forma

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$$

donde $\mathbf{f} : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es una función continua definida en un abierto Ω . Supongamos que la función es localmente lipschitz (o de clase \mathcal{C}^1 si se quiere), de modo que se tienen los resultados de la sección anterior. Podemos pensar que se trata de una ecuación como las que vimos antes, pero con la particularidad de que el segundo miembro no depende de la variable temporal explícitamente. Esta particularidad se refleja en las soluciones: Si $\varphi : (a, b) \rightarrow \Omega$ es una solución, entonces para todo valor de $a \in \mathbb{R}$, la función $\psi(t) = \varphi(t + a)$ es otra solución. En particular, la solución general verifica

$$\varphi(t, t_0, \mathbf{u}^0) = \varphi(t - t_0, 0, \mathbf{u}^0)$$

o dicho de otro modo, el instante inicial t_0 es irrelevante, y el resultado de la evolución solo depende de la posición inicial $\mathbf{u}^0 \in \Omega$ y del tiempo transcurrido $t - t_0$. Por esta razón, para una ecuación diferencial autónoma llamaremos **solución general** a la función continua

$$\phi(t, \mathbf{u}^0) = \varphi(t, 0, \mathbf{u}^0)$$

definida para $\mathbf{u}^0 \in \Omega$ y $t \in (0, \tau]$. Tienen particular interés las ecuaciones diferenciales autónomas cuyas soluciones maximales están definidas en \mathbb{R} para todo $\mathbf{u}^0 \in \Omega$. Bajo estas hipótesis, la solución general es la única función

$$\phi : \mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \Omega$$

que verifica las condiciones

$$\frac{d\phi}{dt}(t, \mathbf{u}) = \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{u})) \quad \phi(0, \mathbf{u}) = \mathbf{u}$$

para todo $\mathbf{u} \in \Omega$ y para todo $t \in \mathbb{R}$.

Se dice también que ϕ es el **flujo** o **sistema dinámico** generado por la ecuación diferencial en el abierto Ω . La propiedad fundamental que verifica el flujo de una ecuación diferencial autónoma es la siguiente:

Proposición 2.1. (*Propiedad de grupo.*) *El flujo ϕ definido por la ecuación diferencial $\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ verifica*

$$\phi(t, \phi(s, \mathbf{u})) = \phi(s + t, \mathbf{u})$$

para todo $t, s \in \mathbb{R}$ y para todo $\mathbf{u} \in \Omega$.

Definición 2.1. (**Orbita o trayectoria.**) La órbita de un punto $\mathbf{u} \in \Omega$ es la curva que describe en Ω el punto $\mathbf{u}(t) = \phi(t, \mathbf{u})$ cuando t varía en \mathbb{R} . Si la órbita de $\mathbf{u} \in \Omega$ consta de solo el punto \mathbf{u} entonces es porque $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$ y decimos que \mathbf{u} es un **punto de equilibrio** del sistema que denotaremos por \mathbf{u}^e . Si $\mathbf{f}(\mathbf{u}) \neq \mathbf{0}$, entonces la unicidad de las soluciones implica que $\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) = \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{u})) \neq \mathbf{0}$ para todo $t \in \mathbb{R}$; en este caso decimos que \mathbf{u} (y por lo tanto cualquier otro punto de su órbita) es un **punto regular** del sistema.

Estabilidad de las trayectorias

Generalmente en las aplicaciones, las condiciones iniciales de la evolución de un sistema se miden con cierta imprecisión (error de medida) que dificulta en ciertos casos la predicción. Es de nuestro interés distinguir las soluciones cuyo comportamiento asintótico es el mismo que el de las soluciones por condiciones iniciales suficientemente próximas.

Definición 2.2. (Trayectoria estable). Supongamos que $\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es un flujo generado por la ecuación diferencial $\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$. Diremos que $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ tiene una trayectoria estable en el futuro, cuando para todo $\epsilon > 0$, existe $\delta > 0$ tal que: si $\|\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1\| < \delta$, entonces $\|\phi(t, \mathbf{u}_2) - \phi(t, \mathbf{u}_1)\| < \epsilon$ para todo $t \geq 0$.

Definición 2.3. (Trayectoria asintóticamente estable). Diremos que el punto $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ tiene una trayectoria asintóticamente estable en el futuro, si es estable en el futuro, y además, existe $\rho > 0$ tal que, si $\|\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1\| < \rho$ entonces

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\phi(t, \mathbf{u}_2) - \phi(t, \mathbf{u}_1)\| = 0$$

Observaciones.

1. Es posible definir de manera análoga, las nociones de estabilidad asintótica en el pasado, observando el comportamiento de las soluciones cuando $t < 0$ y cuando $t \rightarrow -\infty$.
2. Un punto $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ tiene una trayectoria inestable (es decir, no estable) si y sólo si, existe $\epsilon > 0$ y una sucesión $\mathbf{u}_n \rightarrow \mathbf{u}$ tal que, para cada $n > 0$ existe $t_n > 0$ que verifica

$$\|\phi(t_n, \mathbf{u}_n) - \phi(t_n, \mathbf{u})\| \geq \epsilon$$

3. **(Punto de equilibrio estable):** si \mathbf{u}^e es un punto de equilibrio, entonces la condición de tener una trayectoria estable en el futuro (o en el pasado) se expresa más simplemente: \mathbf{u}^e es un punto de equilibrio estable si para todo $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que, las trayectorias que en $t = 0$ se encuentran a distancia menor que δ de \mathbf{u}^e se mantienen a distancia menor que ϵ de \mathbf{u}^e para todo $t \geq 0$. Si además de ser estable, existe $\rho > 0$ tal que, si $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^e\| < \rho$ entonces

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t, \mathbf{u}) = \mathbf{u}^e,$$

decimos que \mathbf{u}^e es asintóticamente estable. Es importante resaltar que esta última condición por sí sola no garantiza la estabilidad. Al respecto, en las secciones siguientes presentamos otros conceptos y resultados más específicos para abordar este punto.

2.1.6. Sistemas autónomos no lineales

En esta sección estudiaremos los sistemas no lineales autónomos. Para poder entender el comportamiento de los sistemas no lineales usaremos procedimientos analíticos y geométricos. Aquí combinaremos algunas nociones de los métodos de análisis para sistemas lineales con algunas técnicas cualitativas adicionales que servirán para predecir el comportamiento cualitativo de los no lineales. De esta forma tendremos una noción del diagrama de fases asociado al sistema de EDO's para el análisis dinámico del CSTR.

Primero mostraremos cómo puede aproximarse la solución de un sistema no lineal a un punto de equilibrio por medio de un sistema lineal. Este proceso, conocido como "*linealización*", es uno de los procedimientos que se aplican con mayor frecuencia. Estudiando la aproximación lineal, podemos predecir el comportamiento de las soluciones del sistema no lineal, al menos cerca del punto de equilibrio. Luego expondremos un método cualitativo con el que se puede obtener más información del campo de direcciones del sistema no lineal, solamente observando en qué punto de éste una componente es cero (es decir, dónde es vertical u horizontal el campo), obtendremos las curvas llamadas "*nulclinales*", que subdividen el diagrama de fase. Cuando estas curvas se combinan con la linealización del sistema en un entorno de los puntos de equilibrio, en algunos casos, se puede dar una descripción completa de los comportamientos posibles a largo plazo de las soluciones; es decir el comportamiento de las órbitas del sistema para tiempos muy grandes.

Estados estacionarios y estabilidad

Los estados estacionarios del sistema se corresponden con aquellos valores entorno a los cuales las variables se mantienen invariante con el tiempo. Recordemos que, matemáticamente, los estados estacionarios se corresponden con una solución $\mathbf{u}^e = (u_1^e, u_2^e) \in \Omega$ del PVI que anula el campo vectorial de direcciones \mathbf{f} . Es decir, que $\mathbf{u}^e \in \Omega$ es tal que

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}^e) = \mathbf{0}.$$

Estos estados estacionarios, que hemos denotado por \mathbf{u}^e , son los que establecen el *régimen permanente o no transitorio* del CSTR a medida que transcurre la reacción química y por lo tanto es de interés contar con un método menos abstracto que

el presentado en la sección anterior para establecer la estabilidad y su naturaleza. En términos simples, lo que se quiere saber es si para cualquiera que sea el punto de arranque \mathbf{u}^0 , de variables de estado del sistema, la solución $\mathbf{u}(t)$ correspondiente permanece cerca de tal estado estacionario para todo tiempo t . Existen dos tipos de estabilidad de los estados estacionarios que normalmente observamos en los procesos:

- **Estabilidad simple:**

Geoméricamente se dice que un estado estacionario $\mathbf{u}^e \in \Omega$ del sistema es estable si para cualquier vecindad $V \subset \Omega$ de \mathbf{u}^e existe una vecindad $V_1 \subset V$ tal que cualquier solución $\mathbf{u}(\mathbf{u}^0, t)$ con $\mathbf{u}^0 \in V_1$ está definida y permanece en la vecindad V para todo tiempo $t > 0$. En la siguiente figura se ilustra ésta idea geométrica.

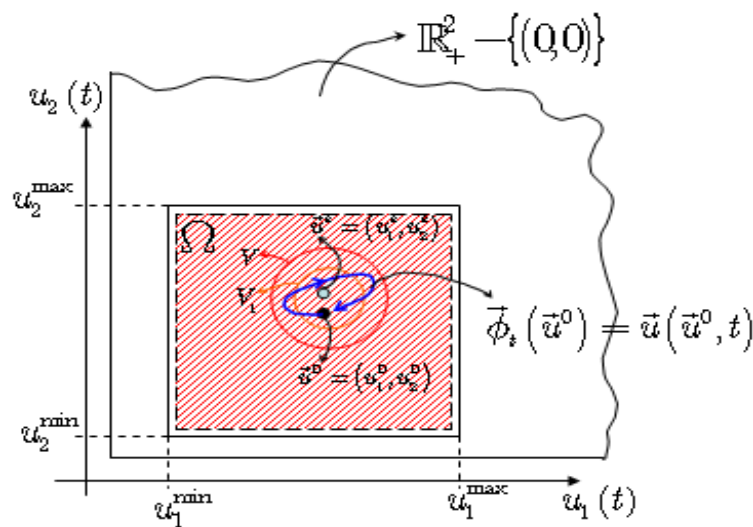


Figura 2.1: Estabilidad de un estado estacionario \mathbf{u}^e .

Analíticamente, la estabilidad que se ilustra en la Figura anterior se plantea de la manera siguiente: \mathbf{u}^e es estable si para cualquier número real $\epsilon > 0$ es posible encontrar un número $\delta(\epsilon) > 0$ tal que para cualquier condición inicial \mathbf{u}^0 con

$$\|\mathbf{u}^0 - \mathbf{u}^e\|_2 < \delta(\epsilon)$$

• **Estabilidad Asintótica:**

Si además de tener las condiciones de estabilidad simple se puede tomar la vecindad V_1 de manera tal que $\mathbf{u}(t) \rightarrow \mathbf{u}^e$ cuando el tiempo crece indefinidamente, es decir $t \rightarrow +\infty$, entonces se dice que el estado estacionario \mathbf{u}^e es asintóticamente estable. En la siguiente Figura se ilustra ésta idea geométrica.

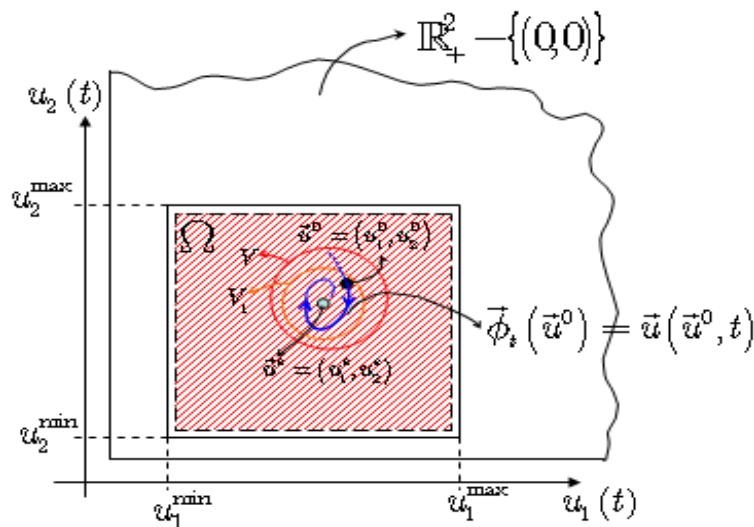


Figura 2.2: Estabilidad asintótica de un estado estacionario \mathbf{u}^e .

Analíticamente, la estabilidad asintótica que se ilustra en la Figura anterior se plantea de la manera siguiente: se dice que el punto \mathbf{u}^e es asintóticamente estable si existe un entorno V de \mathbf{u}^e tal que para $\mathbf{u}^0 \in V_1 \subset V$ se tiene que

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}^e\|_2 = 0$$

El tipo de estabilidad ilustrada en la Figura anterior algunas veces es llamada, por algunos autores, estabilidad neutral y la misma es tipificada por estados estacionarios denominados centros. La estabilidad asintótica es tipificada por estados estacionarios denominados sumideros. Por otro lado, un estado estacionario es inestable si no es estable: los estados estacionarios llamados puntos sillas y puntos nodos proporcionan ejemplos de estados que pueden ser inestables. Es de hacer notar que la estabilidad definida en éstos términos es de naturaleza local: solo concierne al comportamiento del estado dinámico $\mathbf{u}(t)$, relativo al estado inicial \mathbf{u}^0 , cerca del estado estacionario \mathbf{u}^e .

Esto sugiere que podemos considerar una expansión tipo Taylor del campo vectorial de direcciones \mathbf{f} entorno al estado estacionario \mathbf{u}^e para estudiar el comportamiento de las órbitas del sistema. Específicamente, con ésto perturbaríamos el PVI a otro problema cuya solución exacta es válida para el entorno del estado estacionario y además que sea más fácil de calcular. En este sentido, la expansión de Taylor a orden uno proporciona una linealización local del PVI que cumple con el requerimiento planteado.

En base a lo anterior, a continuación daremos un procedimiento que nos sirve para clasificar la naturaleza de los estados estacionarios y su estabilidad, en base a la linealización local del PVI, consistente con las definiciones dadas anteriormente: Consideremos que $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ y que se tiene un PVI como el modelo para el CSTR. Si consideramos que \mathbf{f} es lo suficientemente suave (de clase $\mathcal{C}^1(\Omega)$), entonces cada componente $f_i(\mathbf{u})$, $i = 1, 2$, se aproxima de la siguiente forma:

$$f_i(\mathbf{u}) \approx f_i(\mathbf{u}^e) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}^e) \cdot \nabla f_i(\mathbf{u}^e) + o(\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^e\|) \quad (2.19)$$

donde por definición de punto de equilibrio $f_i(\mathbf{u}^e) = 0$. Por esto, para perturbaciones infinitesimales $\mathbf{v} = \mathbf{u} - \mathbf{u}^e$ en torno al punto de equilibrio, se pueden despreciar los otros términos de la expansión, y el sistema diferencial del PVI (1.9) puede ser aproximado por su forma linealizada

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \bar{\bar{J}}(\mathbf{u}^e)\mathbf{v}, \quad \forall t \in (0, +\infty), \quad (2.20)$$

donde $\bar{\bar{J}}(\mathbf{u}^e) \equiv \bar{\bar{\nabla}}\mathbf{f}(\mathbf{u}^e)$ es la matriz *Jacobiana* del campo vectorial \mathbf{f} evaluada en el punto estacionario \mathbf{u}^e . En efecto, tal matriz viene dada por

$$\bar{\bar{J}}(\mathbf{u}^e) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1}(\mathbf{u}^e) & \frac{\partial f_1}{\partial u_2}(\mathbf{u}^e) \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1}(\mathbf{u}^e) & \frac{\partial f_2}{\partial u_2}(\mathbf{u}^e) \end{pmatrix}$$

La ecuación (2.20) es un sistema diferencial con coeficientes constantes que puede ser resuelto con los métodos usuales de la *teoría lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias*. Los resultados obtenidos así, pueden ser escritos como una suma funciones coseno y senoidales multiplicadas por una función exponencial. El coeficiente de cada exponencial es la parte real de un *autovalor* de la Jacobiana. De allí, si la parte real de

todos los autovalores es negativa, entonces \mathbf{v} tiende a cero. Es posible, por lo tanto, transferir estas propiedades del sistema linealizado (2.20) a el sistema *no lineal* para entender su comportamiento usando el siguiente teorema de *estabilidad linealizada* [34]:

Teorema 2.4 (Hartman-Grobman). *Si $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ es de clase $\mathcal{C}^1(\Omega)$, denotando por λ_i los autovalores de la matriz Jacobiana evaluada en el estado estacionario y por $\Re(\lambda_i)$ la parte real de λ_i , entonces:*

1. *Si $\forall i = 1, 2 \Re(\lambda_i) < 0$, entonces \mathbf{u}^e es **asintóticamente estable**;*
2. *Si $\exists \hat{i}$ tal que $\Re(\lambda_{\hat{i}}) > 0$, entonces \mathbf{u}^e es **inestable**.*

Este criterio también es conocido con el nombre de **estabilidad con respecto a perturbaciones infinitesimales** y es ampliamente utilizado para el análisis de *inestabilidad*. Es decir, si \mathbf{u}^e es inestable con respecto a perturbaciones infinitesimales, entonces también lo es para grandes perturbaciones.

Si \mathbf{u}_e es asintóticamente estable, entonces (2.20) puede ser resuelta para describir la evolución del sistema para pequeños valores iniciales adecuados y escribir una solución analítica para el movimiento de las órbitas entorno al particular estado estacionario.

La clasificación de los puntos estacionarios está entonces fundamentada en el tipo de autovalor que se obtiene de la matriz Jacobiana evaluada en el punto de equilibrio. Para esto, determinamos el *espectro* de la matriz Jacobiana relativa al estado estacionario como

$$\sigma(\bar{J}; \mathbf{u}^e) = \{\lambda \in \mathbb{C}; p(\lambda) = \det(\bar{J}(\mathbf{u}^e) - \lambda \bar{I}) = 0\},$$

en donde $p(\lambda)$ es un polinomio en λ de grado 2. A éste polinomio se le denomina *polinomio característico* y en general se puede tener de mayor grado dependiendo del tamaño del sistema de EDO's; si el sistema es de n -ecuaciones, entonces el polinomio es de grado n . Por otro lado, \bar{I} es la matriz identidad del mismo tamaño que la Jacobiana.

Los autovalores del espectro de la Jacobiana, caracterizan el comportamiento de las órbitas del sistema diferencial no lineal a partir del sistema diferencial lineal dado por la ecuación (2.20), mostrando así las diferentes formas geométricas del flujo ϕ_t

generado por el campo vectorial de direcciones \mathbf{f} sobre el digrama o plano de fase embebido en Ω .

En éste sentido, para el sistema reacción-CSTR se tiene un espectro de la matriz Jacobiana, relativo al estado estacionario \mathbf{u}^e , conformado por dos autovalores, digamos λ_1 y λ_2 , y al respecto se pueden presentar los siguientes casos:

- Si λ_1 y λ_2 son **autovalores reales** y si $\lambda_1 \neq \lambda_2$, entonces la solución de (2.20) puede ser escrita como

$$\mathbf{v}(t) = C_1 \mathbf{w}_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 \mathbf{w}_2 e^{\lambda_2 t} \quad (2.21)$$

donde C_1 y C_2 son constantes de integración, y \mathbf{w}_1 y \mathbf{w}_2 son los *autovectores* de \bar{J} . En particular, si λ_1 y λ_2 son ambos negativos, entonces

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(t) = \mathbf{0} \quad (2.22)$$

y el estado estacionario es llamado **nodo estable**. Por otro lado, si uno de los autovalores es positivo, entonces

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(t) = +\infty \quad (2.23)$$

El estado estacionario es llamado **nodo inestable** si ambos autovalores son positivos y **punto silla** en otro caso. En los casos anteriores, dos de las órbitas se van hacia el estado estacionario y dos salen desde el estado estacionario, por lo cual a estados también se les llaman, respectivamente, **atractores** y **repulsores**. En las Figuras 2.3, 2.4 y 2.5 si ilustra el comportamiento de estos estados estacionarios y las órbitas en su entorno.

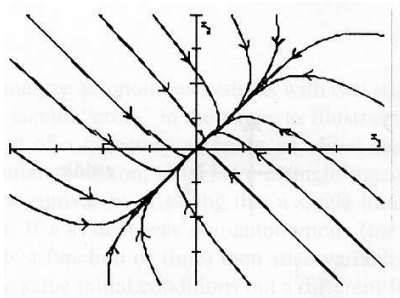


Figura 2.3: Nodo Estable

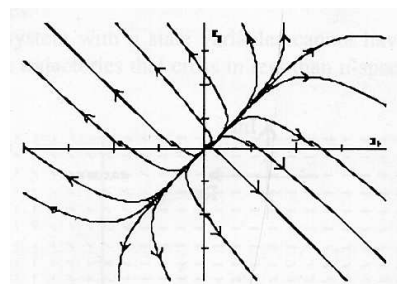


Figura 2.4: Nodo Inestable

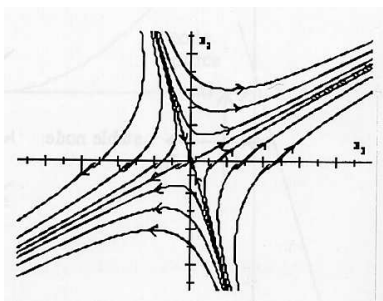


Figura 2.5: Punto Silla

- Si los autovalores son **complejos conjugados**, es decir, $\lambda_1 = \lambda + i\omega$ y $\lambda_2 = \lambda - i\omega$, la solución del PVI (2.20) puede ser escrita como

$$\mathbf{v}(t) = e^{\lambda t} [(C_r \mathbf{w}_r - C_i \mathbf{w}_i) \cos \omega t - (C_r \mathbf{w}_i + C_i \mathbf{w}_r) \sin \omega t] \quad (2.24)$$

donde $\mathbf{w}_r + i\mathbf{w}_i$ es el autovector correspondiente a $\lambda + i\omega$. En particular si

$$\lambda = \Re(\lambda_1) = \Re(\lambda_2) < 0 \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(t) = \mathbf{0} \quad (2.25)$$

el estacionario es llamado **foco estable**. Si, por el contrario,

$$\lambda = \Re(\lambda_1) = \Re(\lambda_2) > 0 \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} |\mathbf{v}(t)| = +\infty \quad (2.26)$$

el estado estacionario es llamado un **foco inestable**. Finalmente, si

$$\lambda = \Re(\lambda_1) = \Re(\lambda_2) = 0 \quad (2.27)$$

entonces $\mathbf{v}(t)$ permanece acotada y el estado estacionario es un **punto centro**.

El comportamiento cualitativo del diagrama de fase que describen las órbitas para el caso de estos puntos se muestra en las Figuras 2.6, 2.7 y 2.8.

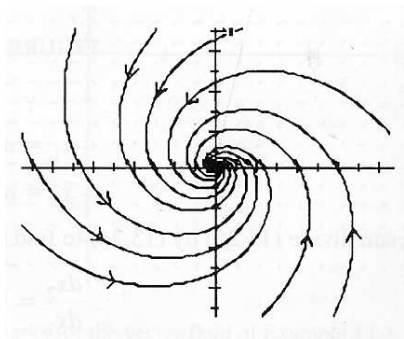


Figura 2.6: Foco Estable

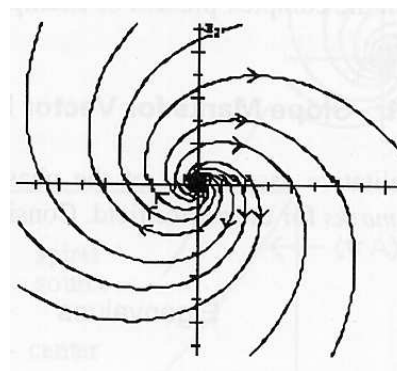


Figura 2.7: Foco Inestable

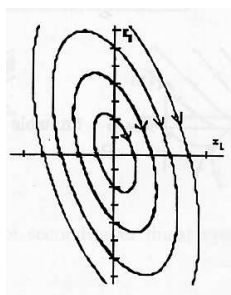


Figura 2.8: Punto Centro

Finalmente señalamos que en muchos sistemas dinámicos, modelados por EDO's, al aplicar estos fundamentos puede obtenerse un conjunto de puntos de equilibrio que igualmente son caracterizados, en términos de los autovalores λ_i , como: *conjunto atractor*, *conjunto repulsor* o, en su efecto, *conjunto de variedades estables o inestables*.

Un caso donde falla la linealización y comentarios importantes

Desafortunadamente, para algunos puntos de equilibrio de ciertos sistemas la información que proporciona la linealización no es suficiente para determinar el comportamiento completo de las soluciones del sistema no lineal cerca del punto de equilibrio. Por ejemplo, consideremos el sistema

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = u_2 - (u_1^2 + u_2^2)u_1, \\ \frac{du_2}{dt} = -u_1 - (u_1^2 + u_2^2)u_2, \end{cases}$$

El origen es un punto de equilibrio para este sistema y su sistema linealizado es

$$\begin{pmatrix} \frac{dv}{dt} \\ \frac{dw}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}$$

Los autovalores de este sistema lineal son $\pm i$ y por tanto se trata de un centro. Todas las soluciones no ceros del sistema linealizado son periódicas. De hecho, cada una de ellas es un círculo concéntrico al origen. Sin embargo, no hay soluciones periódicas para el sistema no lineal. Para conocer la causa, consideremos el campo vectorial como una suma del campo vectorial lineal $\mathbf{v}_1(u_1, u_2) = (u_2, -u_1)$ y el campo vectorial no lineal $\mathbf{v}_2(u_1, u_2) = (-(u_1^2 + u_2^2)u_1, -(u_1^2 + u_2^2)u_2)$. \mathbf{v}_1 corresponde al sistema linealizado. Éste siempre es tangente a círculos con centro en el origen. Por otra parte, $\mathbf{v}_2(u_1, u_2) = (-(u_1^2 + u_2^2)u_1, -(u_1^2 + u_2^2)u_2)$ siempre señala directamente hacia $(0, 0)$ ya que es un múltiplo escalar del campo $(-u_1, -u_2)$.² El resultado de sumar $\mathbf{v}_1(u_1, u_2)$ y $\mathbf{v}_2(u_1, u_2)$ es un campo vectorial que siempre tiene una componente radial negativa. Las soluciones del sistema no lineal se mueven entonces siempre en espiral hacia $(0, 0)$. Note que si cambiamos los signos de los términos de orden superior en el sistema anterior, el resultado es

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = u_2 + (u_1^2 + u_2^2)u_1. \\ \frac{du_2}{dt} = -u_1 + (u_1^2 + u_2^2)u_2. \end{cases}$$

Este sistema tiene la misma linealización cerca de $(0, 0)$, pero ahora las soluciones se mueven en espiral alejándose del origen.

En este ejemplo, las soluciones del sistema no lineal y las del linealizado son aproximadamente las mismas cerca del origen, por lo menos durante un corto intervalo. Sin embargo, como el sistema linealizado es un centro, cualquier perturbación por mínima que sea puede cambiar el comportamiento a largo plazo de las soluciones. Aún aquella causada por la inclusión de los términos no lineales puede convertir al centro en un sumidero o una fuente espiral. Afortunadamente, sólo existen dos situaciones en que el comportamiento a largo plazo de las soluciones cerca de un punto de equilibrio del sistema no lineal y su linealización pueden diferir. Una es cuando el sistema linealizado es un centro. La otra, cuando el sistema linealizado tiene cero

² El número positivo es el escalar $u_1^2 + u_2^2$.

como autovalor. En cualquier otro caso, el comportamiento a largo plazo de las soluciones de un sistema no lineal cerca de un punto de equilibrio es el mismo que para las soluciones de su linealización.

2.1.7. Análisis nulclinal de sistemas no lineales

El proceso de linealización analizado anteriormente nos da un procedimiento efectivo para entender el comportamiento de las soluciones de un sistema no lineal cerca de un punto de equilibrio. Desafortunadamente, la información "local" que proporciona solo puede usarse cerca de puntos de equilibrio. Hasta ahora nuestros únicos procedimientos generales para el estudio del comportamiento de los sistemas no lineales lejos de los puntos de equilibrio son numéricos. Es cierto que el estudio numérico cuidadoso de un sistema puede dar considerable información acerca del comportamiento de las soluciones. Sin embargo, es difícil saber si se han probado las condiciones iniciales suficientes para observar todos los posibles comportamientos de las soluciones. Esta es una razón para combinar análisis cualitativo con análisis numérico tal y cual fue hecho en este trabajo.

A continuación presentamos de forma general un procedimiento cualitativo que puede combinarse con linealización y métodos numéricos de aproximación. El procedimiento recibe el nombre de análisis nulclinal y para describirlo consideraremos, consistentemente con el PVI asociado a la dinámica del CSTR, el sistema no lineal de EDO's siguiente

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = f_1(u_1, u_2), \\ \frac{du_2}{dt} = f_2(u_1, u_2), \end{cases}$$

En primer lugar determinamos los puntos de equilibrio del sistema de ecuaciones no lineales:

$$\begin{aligned} f_1(u_1^e, u_2^e) &= 0, \\ f_2(u_1^e, u_2^e) &= 0, \end{aligned}$$

luego mediante el proceso de linealización hacemos un estudio local del sistema caracterizando los puntos de equilibrio por medio de los autovalores de la matriz jacobiana del sistema no lineal. Es decir, se utiliza el teorema de Hartman-Grobman para caracterizar los puntos de equilibrio, conociendo así el comportamiento de las soluciones

del sistema no lineal cerca de tales puntos. A continuación damos una descripción más completa del comportamiento de las órbitas del sistema, determinando las *curvas nulclinales* a partir del sistema de ecuaciones no lineales y trazando el gráfico de cada una sobre el diagrama de fases $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. De manera más específica, la nulclinal $u_1 = \varphi_1(u_2)$ es el conjunto de puntos $(u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$ donde $f_1(u_1, u_2)$ es cero, es decir la curva de nivel donde $f_1(u_1, u_2)$ es cero. De manera similar, la nulclinal $u_2 = \varphi_2(u_1)$ es el conjunto de puntos (u_1, u_2) donde $f_2(u_1, u_2)$ es cero. Al combinar las nulclinales φ_1 y φ_2 los puntos de equilibrio ocurren en las intersecciones de éstas. Una consecuencia de esto es que las nulclinales pueden dividir el diagrama de fases Ω en varias regiones que debemos estudiar, analizar y caracterizar para obtener el comportamiento del campo de direcciones y por lo tanto del diagrama de fase asociado al sistema de EDO's. Específicamente, estudiamos el signo de las componentes del campo vectorial en cada región definida por las nulclinales para determinar el sentido y la dirección de las órbitas asociadas a una condición inicial de arranque para el sistema de forma global; condiciones iniciales alejadas de los entornos de los estados de equilibrio. Aún más, con este análisis podemos predecir la naturaleza atractora o repulsora de los estados estacionarios y verificar el comportamiento local descrito usando la teoría de linealización con soporte mediante el cálculo numérico de las órbitas.

2.2. Métodos Numéricos

El modelo matemático que describe la dinámica de las principales variables de estado del CSTR, como ya hemos visto, consiste en un sistema autónomo de EDO's no lineales. Sujeto a condiciones iniciales, la teoría cualitativa nos permite establecer que el modelo es un problema matemáticamente bien planteado y además podemos inferir sobre el comportamiento de las soluciones de este. Sin embargo, una construcción explícita de la solución del sistema no se puede hacer. En este orden de ideas, el uso del *análisis numérico* se convierte en la herramienta fundamental para obtener *aproximaciones* adecuadas que sigan cumpliendo con las propiedades cualitativas que posee la solución del problema. De manera específica, el análisis numérico de las ecuaciones diferenciales propone sucesiones de funciones sobre subespacios de dimensión finita tomados del espacio característico de la solución original. En el paso

a una cierta noción de límite, en tales sucesiones, se debe obtener como resultado un acercamiento a la solución del problema original. Por lo tanto, las nociones de convergencia y estabilidad de los métodos numéricos que se proponen deben ser abordadas con sumo cuidado y consistentemente con lo explorado mediante el análisis cualitativo del problema.

Por otro lado, las ecuaciones de equilibrio que resultan del sistema de ecuaciones diferenciales son de naturaleza altamente no lineal. El comportamiento de estos sistemas, el comportamiento cualitativo y estabilidad de tales soluciones frente a perturbaciones en datos pueden ser exploradas mediante *análisis no lineal estandar o no estandar* dependiendo del contexto. No obstante, nuevamente nos encontramos con el problema de explicitar la solución, si existe, de este sistema no lineal de ecuaciones. Por tal razón, las herramientas del análisis numérico nuevamente deben ser utilizadas para obtener una *solución aproximada* del sistema consistentemente con lo explorado desde el punto de vista cualitativo.

Por lo anteriormente expuesto, en esta sección se presentan los principales métodos de análisis numérico que fueron empleados en el trabajo para construir aproximaciones numéricas a las órbitas del sistema de ecuaciones diferenciales que describen la dinámica del CSTR, el cálculo y análisis de estabilidad de los estados estacionarios del sistema. Para esto comenzaremos estudiando el problema de determinar el cero de una función no lineal real a variable real y posteriormente el de aproximar numéricamente la solución de un PVI.

2.2.1. Ecuaciones no lineales y su solución por iteración

El problema de determinar los estados estacionarios del CSTR, como señalamos antes, se reduce al problema de determinar el vector $\mathbf{u}^e \in \bar{\Omega}$ de manera tal que el campo de direcciones \mathbf{f} se anule en ese vector. A su vez, mediante manipulaciones algebraicas sobre las dos ecuaciones que conforman dicho sistema, se puede obtener una sola función de alguna de las dos variables. Con esta función nos planteamos un problema de encontrar sus ceros o raíces en el intervalo de definición de la variable de estado en consideración. La situación aquí es que la función es altamente no lineal y por lo tanto debemos utilizar métodos numéricos para aproximar su raíz. En este orden de ideas, un análisis de este problema debe ser abordado en primer lugar para establecer si las soluciones existen en el intervalo de definición y luego diseñar y

aplicar el método numérico adecuado para el cálculo correspondiente.

Consideremos entonces que g es la función no lineal real a variable real,

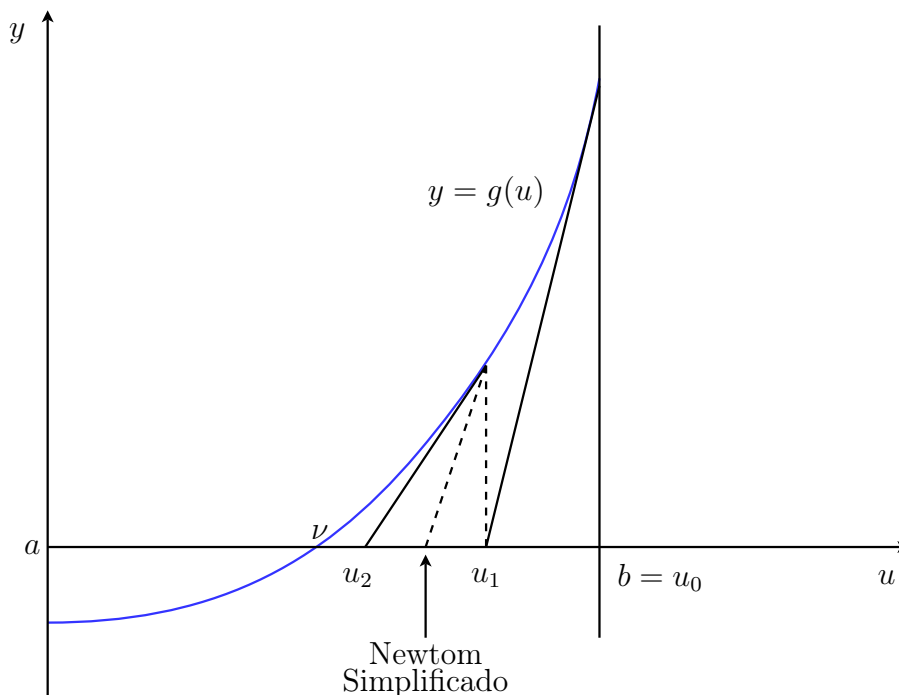
$$g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R},$$

que resulta del problema asociado a determinar los estados estacionarios del modelo matemático. Consideremos las ecuaciones no lineales

$$g(u) = 0 \quad \text{y} \quad g(u) = u,$$

donde es claro que una forma puede obtenerse de la otra mediante un cambio de variables adecuado en la definición de la función g .

Un método tradicional para resolver $g(u) = 0$ es el *método de Newton* (o de las tangentes), que se ilustra en la figura siguiente.



Para encontrar una raíz ν desconocida en un intervalo $[a, b]$, usando Newton, comenzaremos con la aproximación inicial $u_0 = b$ y definimos la siguiente aproximación u_1 con la intersección del eje u y la línea tangente a $g(u)$ en u_0 . Procediendo de ésta forma, obtenemos una sucesión

$$u_n = u_{n-1} - \frac{g(u_{n-1})}{g'(u_{n-1})}, \quad (2.28)$$

la cual, bajo circunstancias favorables, convergerá a ν . El hecho importante del método de Newton es que en cada paso en el procedimiento de aproximación la curva es reemplazada por su línea tangente ("linealización"). Los cálculos se reducen enormemente si usamos $g'(u_0)$ en vez de $g'(u_{n-1})$ en (2.28). Geométricamente, con esta consideración, estamos trazando una *línea paralela* a la tangente original en vez de trazar una nueva tangente. Este método de *Newton simplificado* es equivalente al *método de sustituciones sucesivas* (o aproximaciones sucesivas) que describiremos a continuación.

Ahora consideraremos la ecuación no lineal en la forma de punto fijo

$$u = g(u). \quad (2.29)$$

Resolver esta ecuación significa encontrar las intersecciones de la línea recta $y = u$ con la curva $y = g(u)$. Si g es una *contracción* sobre el intervalo $a \leq u \leq b$, entonces (2.29) tiene una y sólo una solución la cual es límite de la sucesión iterativa $u_n = g(u_{n-1})$ independientemente de como se tome el elemento inicial u_0 en $[a, b]$. Ahora queremos descartar la suposición de contracción porque en general tal situación no se tiene en muchos tipos de problemas prácticos y, en vez de esto, concentrarnos en la posible *monotonía* de la sucesión iterativa. En *iteración monótona* construimos un par de sucesiones, una que converge a la solución decrecientemente y otra crecientemente. Para plantear el primer resultado relacionado con la iteración monótona, introduciremos en primer lugar la siguiente definición

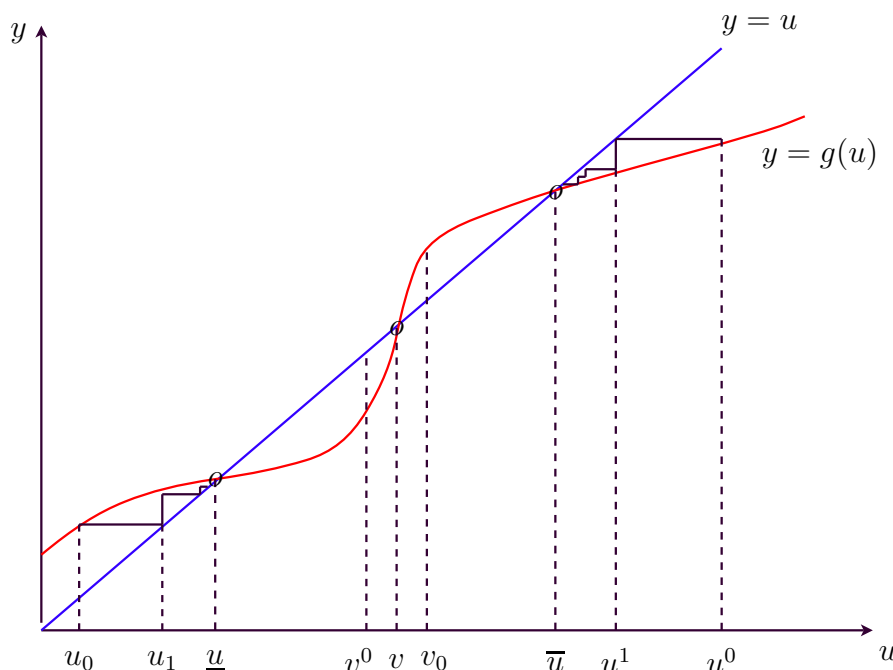
Definición 2.4. El número u_0 se dice que es una **solución inferior** de (2.29) si

$$u_0 \leq g(u_0) \quad (2.30)$$

y u^0 es una **solución superior** de (2.29) si

$$u^0 \geq g(u^0). \quad (2.31)$$

En la siguiente figura ilustramos un gráfico de una función $y = g(u)$ con forma hipotética que se intersecta con la recta $y = u$ en tres puntos \underline{u} , v y \bar{u} .

**Observación:**

Un valor de la abscisa para el cual la línea recta está *por debajo de la curva* es una *solución inferior* y uno para el cual la línea recta está *por encima de la curva* es una *solución superior*. Así, en la Figura anterior, u_0 y v_0 son soluciones inferiores, mientras que u^0 y v^0 son soluciones superiores.

La siguiente proposición de convergencia se tiene

Proposición 2.2. *Sea la solución inferior u_0 y la solución superior u^0 satisfaciendo $u_0 \leq u^0$, y sea g creciente sobre el intervalo cerrado $[u_0, u^0]$. La sucesión*

$$u_n = g(u_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.32)$$

es creciente y converge a la solución minimal \underline{u} de (2.29) sobre $[u_0, u^0]$. La sucesión

$$u^n = g(u^{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.33)$$

es decreciente y converge a la solución maximal \bar{u} de (2.29) sobre $[u_0, u^0]$.

Observaciones:

1. Si iniciamos la iteración (2.33) con la solución superior v^0 en vez de u^0 , las iteradas deben converger hacia abajo a la única solución de (2.29) en el intervalo

$[u_0, v^0]$. Observe que g no es una contracción sobre $[u_0, v_0]$ o $[u^0, u^0]$, de ninguna forma la unicidad puede ser garantizada a menos que se realicen suposiciones adicionales sobre g .

2. La solución superior v^0 es más pequeña que la solución inferior v_0 . Aunque exista una solución de (2.29) en $[v^0, v_0]$, esta no puede obtenerse por iteración monótona. Tal solución es llamada inestable.
3. Si g no es creciente, los esquemas de iteración (2.32) y (2.33) pueden diverger o solamente converger de manera alternante. Sin embargo, la adición de un término lineal grande en ambos lados de (2.29) reduce el problema al caso donde g es creciente. Específicamente, supongamos que tenemos

$$u = h(u),$$

donde lo unico que sabemos es que

$$u_0 \leq h(u_0), \quad u^0 \geq h(u^0) \quad \text{y} \quad u_0 \leq u^0.$$

Sea M la constante más grande a determinar tal que

$$h'(u) + M \geq 0 \quad \text{en} \quad [u_0, u^0].$$

Entonces $h(u) + Mu = u(1 + M)$ es creciente sobre $[u_0, u^0]$ y $u = h(u)$ puede ser reescrita como

$$u = \frac{h(u) + Mu}{1 + M} \doteq g(u)$$

donde g es ahora creciente sobre $[u_0, u^0]$ y

$$u_0 \leq g(u_0), \quad u^0 \geq g(u^0).$$

Para finalizar este párrafo, señalamos que en este trabajo fueron empleados los esquemas de iteración (2.32) y (2.33) mediante un código computacional como métodos numéricos de aproximación en el cálculo de los estados estacionarios del sistema.

2.2.2. Método de Runge Kutta para la resolución numérica de EDO's

Para la construcción del diagrama de fases es necesario el uso de un método numérico de aproximación. En este sentido, en el presente fue empleado el esquema

numérico de Runge Kutta (MRK) por ser uno de los métodos explícitos y/o implícitos que se han probado con buenos resultados en múltiples aplicaciones reales [40, 43]. Este tipo de esquema se puede plantear a partir de expansiones de Taylor³ bajo las hipótesis de regularidad exploradas para PVI en las secciones anteriores. También, en la teoría general de análisis numérico para EDO's, el MRK en un contexto general se enmarca dentro de los *métodos multipasos* a un solo paso de discretización; es decir, de los que sólo requieren como iterado de arranque la condición inicial dada del PVI. Otra razón de uso es su robustez por el uso de técnicas de adaptación de pasos en problemas Stiff y su fácil implementación computacional.

En esta sección, daremos el esquema fundamental del MRK y mencionaremos algunas propiedades sobre su convergencia. Para detalles de un análisis numérico del tema, referimos al lector a las referencias [1] y a las mencionadas arriba.

Esquema de Runge Kutta

Sin pérdida de generalidad, consideraremos la aproximación numérica a la solución del PVI (2.1). La idea del MRK, al igual que otros métodos en diferencias divididas, consiste en obtener *valores aproximados* para la solución del PVI en un conjunto de puntos de malla o de red

$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n < \cdots,$$

y la aproximación en cada t_n se obtiene usando alguno de los valores obtenidos en los pasos anteriores.

Como antes, $\varphi(t)$ denotará la solución exacta del PVI (2.1). Sea entonces $\bar{I} = [t_0, b]$ el intervalo de integración y, correspondientemente, para $h > 0$, sea

$$t_n = t_0 + nh, \quad \text{con } n = 0, 1, \dots, N_h,$$

la sucesión de **nodos de discretización** que definen una *partición* de \bar{I} en subintervalos

$$I_n = [t_n, t_{n+1}].$$

El *ancho*, $h = t_{n+1} - t_n$, de tales subintervalos es llamado **paso de discretización**. Por otro lado, $N_h = N(h)$ es el *máximo entero* tal que:

$$t_{N_h} \leq b, \quad t_{N_h+1} > b.$$

³ La base fundamental para generar métodos en *diferencias finitas* o cocientes incrementales para la aproximación de operadores diferenciales

Si denotamos por $u(t)$ la **solución aproximada** de $\varphi(t)$, entonces $u(t_j) = u_j$, $j = 0, 1, \dots$, denotará la aproximación en el nodo t_j de la solución exacta $\varphi(t_j) = \varphi_j$. De manera similar, f_j denotará el valor $f(t_j, u_j)$ y obviamente $u_0 = u(t_0) \equiv \varphi(t_0) = \varphi_0$.

El esquema iterativo de Runge-Kutta a un paso, que genera una sucesión $\{u_j\}_{j=1,2,\dots}$ de valores aproximados de la solución $\varphi(t)$ del PVI (2.1), en el conjunto de nodos t_j mediante la función aproximante $u(t)$ es el siguiente:

$$\begin{cases} \text{Dado } u_0 = \varphi_0, \\ u_{n+1} = u_n + hF(t_n, u_n, h; f), \quad n \geq 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

donde F es la función incremental definida de la manera siguiente

$$F(t_n, u_n, h; f) = \sum_{i=1}^s b_i K_i, \quad (2.35)$$

$$K_i = f(t_n + c_i h, u_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), \quad i = 1, 2, \dots, s$$

ya s denota el número de *etapas* del método. Los coeficientes $\{a_{ij}\}$, $\{c_i\}$ y $\{b_i\}$ caracterizan el MRK a utilizar y usualmente se toman de un arreglo, generado sistemáticamente, llamado *arreglo de Butcher* [1].

Para el análisis de consistencia, estabilidad y convergencia del MRK, se considera que

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, \dots, s.$$

Si los coeficientes a_{ij} dispuestos en una matriz $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ son iguales a cero para $j \geq i$, con $i = 1, 2, \dots, s$, entonces cada K_i puede calcularse explícitamente en términos de los $(i-1)$ -coeficientes K_1, \dots, K_{i-1} que ya se han determinado. En tal caso el MRK es un *método explícito*. En otro caso, es *implícito* y se debe resolver un sistema de ecuaciones no lineales de tamaño s para calcular los coeficientes K_i ; un método de Newton para sistemas de ecuaciones no lineales puede ser usado de manera adecuada.

El incremento de esfuerzo computacional para los esquemas implícitos hace su uso absolutamente costoso; un costo aceptable es proporcionado por el MRK *semi-implícito*, en el cual $a_{ij} = 0$ para $j > i$ de manera tal que cada K_i es la solución de la ecuación no lineal

$$K_i = f(t_n + c_i h, u_n + h a_{ij} K_i + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j).$$

Entonces, el esquema semi-implícito requiere que s ecuaciones no lineales como la anterior se resuelvan; en efecto se puede hacer uso del método de iteración sucesiva explicado en la sección anterior.

El error local de truncamiento $\mathcal{E}_{n+1}(h)$ en el nodo t_{n+1} para el MRK (2.34) se define mediante la siguiente ecuación residual

$$h\mathcal{E}_{n+1}(h) = \varphi_{n+1} - \varphi_n - hF(t_n, \varphi_n, h; f),$$

donde $\varphi(t)$ es la solución exacta del PVI (2.1). Se dice que el método (2.34) es **consistente** si

$$\mathcal{E}(h) = \max_n |\mathcal{E}_n(h)| \rightarrow 0$$

cuando $h \rightarrow 0$. Se puede demostrar que esto pasa (ver [1]) si y sólo si

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1.$$

Como es usual, diremos que (2.34) es un método de orden p (≥ 1) con respecto a h si $\mathcal{E}(h) = \mathcal{O}(h^p)$ cuando $h \rightarrow 0$.

En cuanto a la **convergencia**, ya que los MRK's son métodos a un solo paso, consistencia implica **estabilidad** y viceversa (ver detalles de la prueba en [1]). Es de hacer notar que aunque la estimación $\mathcal{E}(h)$ pueda obtenerse, su expresión es muy complicada de usar como en todo los casos de métodos tipo multipaso. Por tal razón, solamente comentaremos que si un MRK tiene error local de truncamiento $\mathcal{E}_n(h) = \mathcal{O}(h^p)$, para cualquier n , entonces también su orden o velocidad de convergencia será igual a p .

El siguiente resultado, muy usado en problemas prácticos, establece la relación que existe entre el orden y el número de etapas de los MRK's explícitos.

Proposición 2.3. *El orden de un MRK explícito de s -etapas no puede ser más grande que s . También, no existen MRK's explícitos a s -etapas con orden s si $s \geq 5$.*

Referimos al lector a [22] para la prueba de este resultado y los resultados que daremos a continuación. En particular, para rangos de orden entre 1 y 8, el mínimo número de etapas s_{\min} requerido para arrancar un método de orden correspondiente se muestra a continuación

Orden	$s_{\text{mín}}$
1	1
2	2
3	3
4	4
5	6
6	7
7	9
8	11

Notece que 4 es el número máximo de etapas para el cual el orden del método no es menor que el número de etapas en si. El esquema usado en este trabajo fue el Runge-Kutta a cuarto orden dado por el siguiente método multipaso de 4-etapas:

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4),$$

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, u_n), \\ K_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_1\right), \\ K_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_2\right), \\ K_4 &= f(t_{n+1}, u_n + hK_3). \end{aligned} \tag{2.36}$$

Para concluir la sección, señalamos que en el caso de sistemas de EDO's (caso que nos concierne) el MRK puede extenderse de manera directa. Sin embargo, el orden de un MRK en el caso escalar tratado no necesariamente coincide con el del caso vectorial. En particular, para $p \geq 4$, un método con orden p en el caso de sistemas autónomos,

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}),$$

mantiene el mismo orden p cuando se aplica a la ecuación escalar autónoma $\frac{du}{dt} = f(u)$.

2.3. Teoría de bifurcación

La variación de los parámetros α , β y γ , que intervienen en el modelo matemático del CSTR, pueden causar cambios drásticos en el diagrama de fase. Cualquier valor de estos parámetros en que se presentan estas modificaciones se denominan *valores de bifurcación*. Estudios experimentales han puesto en evidencia que en este caso α es uno de los parámetros críticos que causan este tipo de fenómenos [19]. Por lo tanto, en el presente trabajo dedicaremos atención a las bifurcaciones relacionadas con la variación de éste parámetro manteniendo fijo un valor para β y un valor para γ .

Para sistemas de EDO's no lineales autónomos, como el asociado al modelo matemático del CSTR, la existencia de más de un estado estacionario es posible y diferentes condiciones iniciales de arranque para el sistema pueden estar asociadas a órbitas que vayan a diferentes estados estacionarios. En este sentido se dice que el sistema presenta un comportamiento de *multiestabilidad* [32] conocido como *histéresis del sistema*. Este comportamiento de histéresis puede ser observado en un diagrama de bifurcación de la variable de estado de interés asociada al sistema como función del parámetro.

Por lo anterior, en esta sección presentaremos los conceptos y resultados asociados a la *teoría de bifurcación* que permitan estudiar el comportamiento de histéresis del CSTR.

2.3.1. Aspectos básicos sobre bifurcación en sistemas de EDO's

Primeramente comenzamos denotando por $\boldsymbol{\mu}$ al vector cuyas componentes vienen dadas por los parámetros del sistema. En el caso del CSTR que estamos estudiando, $\boldsymbol{\mu}$ es el vector de \mathbb{R}^3 cuyas componentes son α , β y γ , es decir

$$\mathbb{R}^3 \ni \boldsymbol{\mu} = (\alpha, \beta, \gamma).$$

Con ésto, el sistema de EDO's asociados al modelo del CSTR depende del vector de parámetros $\boldsymbol{\mu}$ y lo denotaremos como

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{u}). \quad (2.37)$$

La ecuación (2.37) representa una *familia de EDO's* y el término bifurcación originalmente fue introducido por Poincaré para describir la *división* de las soluciones de

equilibrio o estados estacionarios de tal familia. Es decir, para estudiar las soluciones, relativas a la variación de $\boldsymbol{\mu}$, de la familia de ecuaciones

$$\mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{u}^e) = \mathbf{0}. \quad (2.38)$$

Cuando $\boldsymbol{\mu}$ varia, el *Teorema de la función implícita* implica que los estados estacionarios \mathbf{u}^e estan descritos por funciones regulares de $\boldsymbol{\mu}$ lejos de aquellos puntos en los cuales la matriz Jacobiana, $\bar{J}(\mathbf{u})$, de $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{u})$ tiene un autovalor cero. La gráfica de cada una de estas funciones es una *rama* del estado estacionario del sistema (2.37). En un estado estacionario $(\mathbf{u}_0^e, \boldsymbol{\mu}_0)$ donde $\bar{J}(\mathbf{u})$ tiene un autovalor cero, varias ramas del estado estacionario $(\mathbf{u}_0^e, \boldsymbol{\mu}_0)$ pueden llegar juntas, entonces se dice que tal estado estacionario es un *punto de bifurcación*.

La bifurcación de un estado estacionario usualmente produce cambios en el tipo de topología de un campo de direcciones asociados a un sistema de EDO's, pero existen muchos otros tipos de cambios que ocurren en las clases de equivalencias de campos de direcciones. En el término bifurcación se incluyen todos estos cambios sin ningún inconveniente y al respecto se tiene la siguiente definición formal.

Definición 2.5. Un valor $\boldsymbol{\mu}_0$ de la ecuación (2.37) para el cual su campo de direcciones $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}}$ no es estructuralmente estable es un **valor de bifurcación** de $\boldsymbol{\mu}$.

La no estabilidad o inestabilidad estructural del campo de direcciones $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}}$, se entiende en el sentido de que pequeñas perturbaciones causan grandes cambios en el comportamiento cualitativo de éste campo.

Un desarrollo detallado sobre la teoría de bifurcación puede ser consultado en [28], [30] y en [40] incluso con un tratamiento numérico muy especial. En este trabajo seguiremos muy de cerca la referencia [19] para nuestro análisis debido a que las aplicaciones estan orientadas a sistemas como el que estamos estudiando. Más aún, debido a que el sistema de ecuaciones de estados estacionarios, $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{0}$, puede ser transformado en una sola ecuación *no lineal* dependiendo unicamente de la temperatura u_2 del sistema y el vector de parámetros $\boldsymbol{\mu} = (\alpha, \beta, \gamma)$ al despejar la concentración u_1 de la primera componente del campo como una relación dependiente de u_2 . Aún más específico, una componente μ_j , con $j = 1, 2, 3$ fijo, del vector $\boldsymbol{\mu}$, se está considerando en este estudio como parámetro crítico y entonces la ecuación de equilibrio para el sistema se expresará como el problema de encontrar el cero de una

función

$$f_{\mu_j} : [u_2^{\min}, u_2^{\max}] \rightarrow \mathbb{R}$$

para todo $\mu_j \in [\mu_j^{\min}, \mu_j^{\max}] \subset \mathbb{R}^+ - \{0\}$ con $j = 1, 2, 3$ fijo. En éste orden de ideas, una definición más técnica sobre el significado de un valor de bifurcación viene dada por (tomada de [19])

Definición 2.6. Sea la familia paramétrica de funciones f_{μ_j} definida en el intervalo $[u_2^{\min}, u_2^{\max}] \subset \mathbb{R}^+ - \{0\}$ para cualquier $\mu_j \in [\mu_j^{\min}, \mu_j^{\max}] \subset \mathbb{R}^+ - \{0\}$ con $j = 1, 2, 3$ fijo. Un punto de bifurcación (u_{20}, μ_{j0}) es aquel en donde la función f_{μ_j} y su primera derivada con respecto a u_2 se hacen iguan a cero, es decir

$$f(u_{20}, \mu_{j0}) = \frac{\partial f}{\partial u_2}(u_{20}, \mu_{j0}) = 0.$$

De la definición anterior podemos notar que, en general, la primera derivada es también el Jacobiano para la función modelo $f_{\mu_j}(u_2) = f(u_2, \mu_j) = 0$. También, el autovalor es simplemente el Jacobiano para la ecuación no lineal $f(u_2, \mu_j) = 0$, por lo tanto el autovalor es cero en el punto de bifurcación tal y como señalamos arriba para el caso general del sistema de EDO's.

Para concluir, señalamos que el número de soluciones de la ecuación no lineal $f_{\mu_j}(u_2) = 0$ puede ser determinado usando la *Teoría de catastrofe* la cual dice que tal ecuación tiene n soluciones si se satisfacen los dos criterios siguientes:

i)

$$f(u_2, \mu_j) = 0 = \frac{\partial f}{\partial u_2} = \frac{\partial^2 f}{\partial u_2^2} = \dots = \frac{\partial^{n-1} f}{\partial u_2^{n-1}} = 0 \quad (2.39)$$

ii) y

$$\frac{\partial^n f}{\partial u_2^n} \neq 0. \quad (2.40)$$

Con esto, entre los tipos de bifurcación que se pueden encontrar para una ecuación uniparamétrica f_{μ_j} , con j fijo, pueden ser:

- a) bifurcación tipo *nodo-silla*;
- b) bifurcación tipo *pitchfork*;
- c) bifurcación tipo *transcrítica*;

- d) bifurcación tipo *Andronov-Poincaré-Hopf*;
- e) bifurcación tipo *conexión silla*;
- f) bifurcación tipo *ciclos límites semi-estables*.

Nuevamente, referimos al lector a [28], [30] y [40] para detalles sobre las condiciones que se requieren para que cada tipo de bifurcación aparezca. En sistemas conformados por un CSTR con chaqueta de enfriamiento, aparecen oscilaciones mantenidas, inducidas por la temperatura de la chaqueta, que pueden confundirse con las bifurcaciones del tipo *Andronov-Poincaré-Hopf*. Sin embargo para el sistema estudiado en éste trabajo no se considera la aparición de este fenómeno por la ausencia de la chaqueta de enfriamiento. Una aplicación interesante de este análisis de bifurcación para CSTR's con chaqueta de enfriamiento puede ser consultado en [37]. Finalmente señalamos que las otros tipos de bifurcaciones son más comunes en estados estacionarios del CSTR y por tal razón serán las de interés en el presente trabajo. Sin embargo, Golubitsky y Keyfitz en [27] demostraron que para el modelo de un CSTR, considerando como variables de estado la concentración y la temperatura, se puede construir un diagrama de bifurcación con $n = 3$ en los criterios citados anteriormente. El diagrama así construido recibe el nombre de *diagrama de histéresis* y en el se puede observar el comportamiento multiestable del CSTR consistente con los tipos de bifurcación distintos a los de *Andronov-Poincaré-Hopf*.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS Y ANÁLISIS

El este Capítulo presentamos los principales resultados teóricos sobre el estudio de existencia y unicidad asociado al PVI (1.9) que describe la dinámica del CSTR presentado en el Capítulo 1. También presentamos los resultados sobre el análisis local y global de las órbitas del sistema. Específicamente, los concernientes a la estabilidad de estados estacionarios o de equilibrio para el CSTR y la histéresis producida por pequeños cambios en el parámetro α . Los resultados son presentados en forma de Proposiciones y la prueba de estos sólo se esquematizará con sustentación en los Preliminares expuestos en el Capítulo 2. Además, por cada resultado haremos comentarios cortos relacionados con el sistema real que estamos estudiando.

3.1. Buen planteamiento del modelo matemático

Con respecto a la existencia, unicidad y estabilidad de la solución del PVI que describe la dinámica del CSTR tenemos el siguiente resultado.

Proposición 3.1. *El problema de Cauchy (1.9) que describe la dinámica del CSTR posee una única solución \mathbf{u} que depende continuamente de la condición inicial \mathbf{u}^0 , definida en el intervalo $[0, \tau]$ con $\tau > 0$ una constante fija.*

La prueba de este resultado es inmediata verificando las condiciones de los Teoremas de existencia, unicidad y estabilidad de soluciones a EDO's, presentados en el Capítulo 2. En efecto, al considerar por cada componente $i = 1, 2$ fija el problema escalar

$$\begin{aligned}\frac{du_i}{dt}(t) &= f_i(u_i(t)), \\ u_i(0) &= u_i^0,\end{aligned}$$

basta verificar que cada función $f_i : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ es continua Lipschitz. Al respecto, la siguiente afirmación se tiene

Afirmación 1. Las derivadas parciales, $\frac{\partial f_i}{\partial u_j}$, $j = 1, 2$, de las funciones a valores reales $f_i : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, 2$, componentes del campo vectorial de direcciones \mathbf{f} , existen, son continuas y están acotadas para toda $\mathbf{u} \in \bar{\Omega}$.

Demostración. Por un lado, gracias a la estructura de cada función f_i la existencia de las derivadas parciales se tiene. En efecto

$$\frac{\partial f_1}{\partial u_1} = -(1 + \alpha k(u_2)), \quad \frac{\partial f_1}{\partial u_2} = -\frac{\alpha u_1}{\left(1 + \frac{u_2}{\gamma}\right)^2} k(u_2),$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial u_1} = \alpha \beta k(u_2), \quad \frac{\partial f_2}{\partial u_2} = -1 + \frac{\alpha \beta u_1}{\left(1 + \frac{u_2}{\gamma}\right)^2} k(u_2).$$

Estas derivadas están bien definidas y para todo punto $\mathbf{u} \in \bar{\Omega}$ están acotadas. Es decir, existen constantes $C_j^i > 0$ con $i, j = 1, 2$ tales que

$$\left| \frac{\partial f_i}{\partial u_j} \right| \leq C_j^i, \quad i, j = 1, 2.$$

Mediante simple manipulaciones algebraicas, considerando el dominio de validez de cada variable de estado y el comportamiento de la función $k = k(u_2)$, encontramos explícitamente que

$$C_1^1 = 1 + e^\gamma, \quad C_2^1 = e^\gamma, \quad C_1^2 = \beta e^\gamma \quad \text{y} \quad C_2^2 = 1 + \beta e^\gamma.$$

□

Este resultado de buen planteamiento nos garantiza que las funciones de concentración y temperatura del sistema físico-químico estudiado, son únicas por cada estado de arranque inicial y que además se mantienen estables frente a pequeñas perturbaciones de estos estados. Esto hace viable y confiable el modelo del CSTR para describir su comportamiento dinámico en términos de las variables de estado y además confiar en las simulaciones numéricas en tiempo real que se realizan mediante la implementación del método de Runge-Kutta.

3.2. Estabilidad de estados estacionarios e histéresis del sistema

Las expresiones que obtuvimos para determinar los estados estacionarios son las siguientes: para $\alpha \in (0, 1)$, $\beta > 0$ y $\gamma > 0$ dadas fijas

$$u_1 = \varphi_1(u_2) = \frac{1}{1 + \alpha k(u_2)} \quad (3.1)$$

y

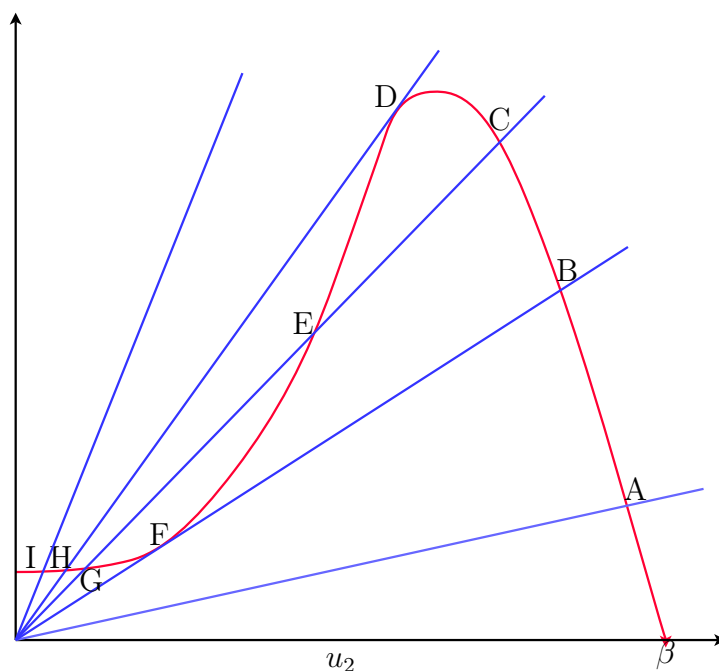
$$g(u_2) = (\beta - u_2)k(u_2) - \delta u_2, \quad (3.2)$$

en donde $\delta = \frac{1}{\alpha}$ es la velocidad de flujo volumétrico adimensional. De la ecuación (3.2) se plantea el problema de encontrar los valores de $u_2 \in [0, \beta]$ tal que

$$F(u_2) = G(u_2), \quad \forall u_2 \in [0, \beta],$$

en donde $F(u_2) = \delta u_2$ y $G(u_2) = (\beta - u_2)k(u_2)$. Fácilmente se puede verificar que G es una curva dominada por el comportamiento de la función $k = k(u_2)$ y que $G(0) = \beta$ y $G(\beta) = 0$. También, por cada variación de α en el intervalo $(0, 1)$, F es una recta de pendiente δ que pasa por el origen y corta a la curva G . Así, las soluciones de los estados estacionarios para la temperatura del CSTR son las intersecciones de la línea recta F y la curva G .

En este trabajo se tomaron valores fijos para los parámetros β y γ siguiendo muy de cerca la referencia [10] y [19]. En este sentido, para una reacción química generica de la forma $A \rightarrow P$, tomamos $\beta = 10$ y $\gamma = 20$. En la siguiente gráfica se ilustran los estados estacionarios del sistema para 5 valores de α tomados en $(0, 1)$, específicamente para $\alpha_1 = 0.07$, $\alpha_2 = 0.04408365873$, $\alpha_3 = 0.02231154832$, $\alpha_4 = 0.0128300117$ y $\alpha_5 = 0.01$.

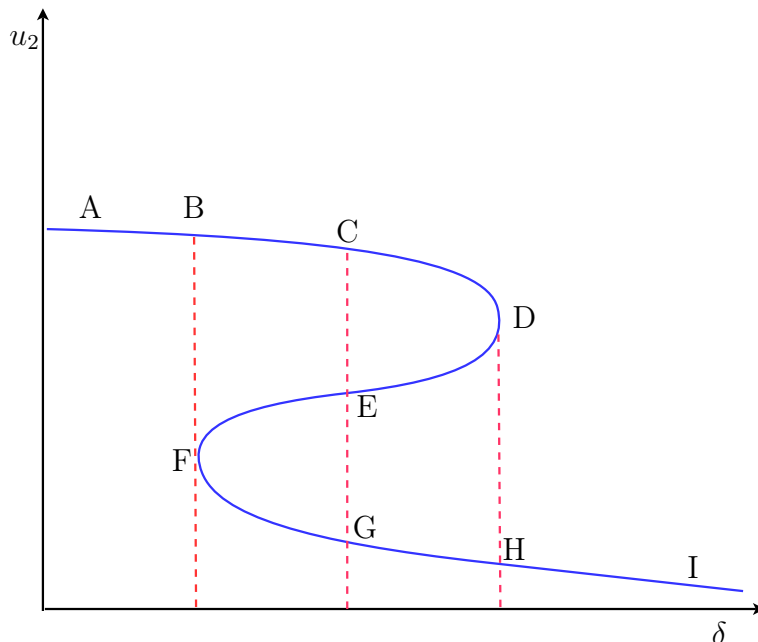


Podemos observar, según los valores de α tomados, que para δ pequeño (o α grande) existe una sola intersección representada por el punto A. Cuando δ se incrementa (disminución de α) pasamos a través de la sucesión continua de puntos A, B, C, D. Si δ es incrementado por encima del valor $\delta^* = \frac{1}{\alpha_4}$ correspondiente al punto D, la única intersección es en un punto cercano al estado estacionario H que posee una temperatura mucho más baja. Del sistema de EDO's se prueba que la relación entre la concentración de reactivo a la concentración de alimentación viene dada por

$$1 - \frac{u_2}{\beta},$$

de modo que u_2 cerca de cero significa que la reacción ocurre de manera muy lenta y muy poco reactivo se ha transformado en producto, mientras que u_2 cerca de β implica una conversión casi completa del reactivo en el producto. No obstante, si procedemos en el sentido para el cual δ disminuye desde valor correspondiente al estado I, pasamos a través de la sucesión continua de puntos I, H, G, F. En el estado estacionario F, una disminución muy pequeña del valor de δ ocasiona un salto repentino al estado estacionario correspondiente al punto B, el cual posee una temperatura mucho más alta. Esto, desde el punto de vista del sistema físico no es deseable y por lo tanto nuestro análisis sugiere que existen regiones de trabajo cercanas al punto estacionario F que ameritan control automático sobre el valor crítico de α para

mantener las variables de estado en un entorno del punto de equilibrio F. Este comportamiento representa la histéresis del CSTR y matemáticamente la bifurcación de los estados estacionarios. Para describir el diagrama de histéresis $\delta - u_2$, siguiendo muy de cerca los resultados de la referencia [27], utilizamos la Teoría de catástrofe con $n = 2$ y encontramos una relación de los estados estacionarios como función de α , este gráfico se ilustra en la siguiente figura



En este diagrama de histéresis se muestra el conjunto de soluciones de la ecuación $\delta u_2 = g(u_2)$, representado por la curva de color azul. Sobre la misma se aprecia la secuencia de estados estacionarios de temperaturas altas A, B, C, D a medida que el valor de δ aumenta; en el estado D, un pequeño aumento en el valor de δ hace que se salte al estado H y se continúe en estados de temperaturas bajas tal como en el punto I. Análogamente, comenzando en estados de temperaturas bajas, tal como en el punto I, la disminución del valor de δ da la secuencia de estados I, H, G, F; a partir del punto F, una pequeña disminución del valor de δ hace que se llegue a estados de temperaturas altas tales como en el punto B. Esto parece sugerir que un estado estacionario tal como E no pueda ser alcanzado por un aumento o disminución del valor de δ ; físico-químicamente no es sorprendente que los estados estacionarios en el lazo interno de D a F sean inestables, mientras que los otros estados estacionarios sean estables.

Para verificar las afirmaciones anteriores, recurrimos al análisis local y global de los estados estacionarios. Al respecto, en la tabla siguiente se muestra el signo de los autovalores correspondientes a la linealización del sistema de EDO's en torno a cada punto estacionario señalado en las gráficas anteriores; todos estos autovalores son reales.

α	A		B		C		D		E		F		G		H		I		
	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	λ_1	λ_2	
α_1	-	-																	
α_2			-	-							-	-							
α_3					-	-			+	-			-	-					
α_4							-	-							-	-			
α_5																	-	-	

De la tabla anterior, y según la teoría de análisis local, podemos inferir "a priori" que todos los estados estacionarios excepto el E son puntos *nodos atractores*; siendo el E un *punto silla*. Sin embargo, los diagramas de fase construidos por simulaciones numéricas mediante el MRK de cuarto orden muestran que algunos de los estados identificados como nodos atractores no presentan esta característica en todo su entorno, tal es el caso de los estados estacionarios D y F.

En las siguientes figuras se muestran los diagramas de fase del sistema para los cinco valores de α tomados, en los cuales se puede apreciar lo dicho anteriormente sobre los puntos D y F.

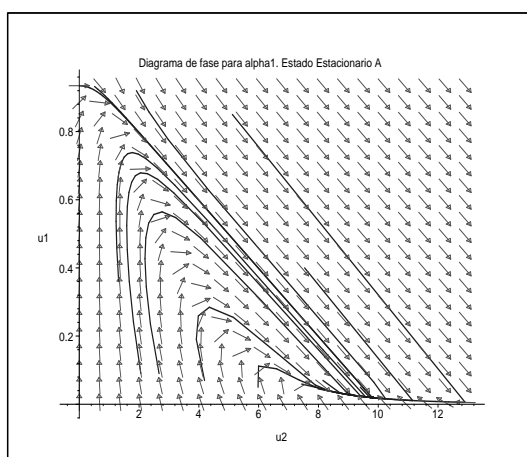


Figura 3.1: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_1 .

Para α_1 se observa en el diagrama que el sistema presenta un solo punto esta-

cionario, el punto A. Este punto según los signos de los autovalores mostrados en la tabla anterior, se caracteriza como un nodo atractor, y el campo vectorial obtenido mediante simulación numérica con MRK de cuarto orden corroboran este resultado.

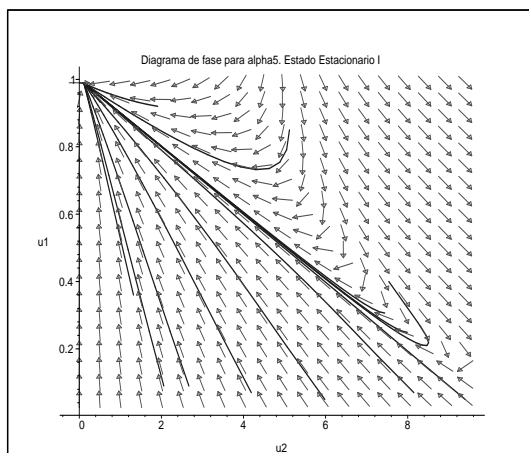


Figura 3.2: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_5 .

De manera similar, el valor de α_5 hace que el sistema tenga un solo punto estacionario, el punto I, el cual también se aprecia en el diagrama de fase como un nodo atractor, tal como lo sugieren los signos de los autovalores mostrados en la tabla anterior.

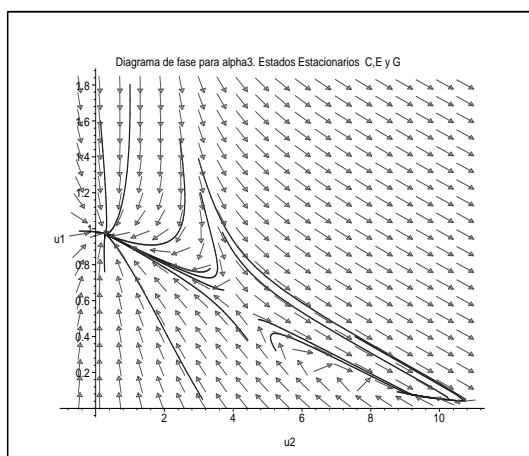


Figura 3.3: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_3 .

Para el valor de α_3 , se obtienen tres estados estacionarios, los puntos C, E y G, los cuales se observan en el diagrama de fase. En este diagrama se puede apreciar que

los puntos C y G son nodos atractores como lo indican los signos de sus autovalores correspondientes (mostrados en la tabla anterior) y el punto E efectivamente es un punto silla y se notan algunas trayectorias que así lo indican.

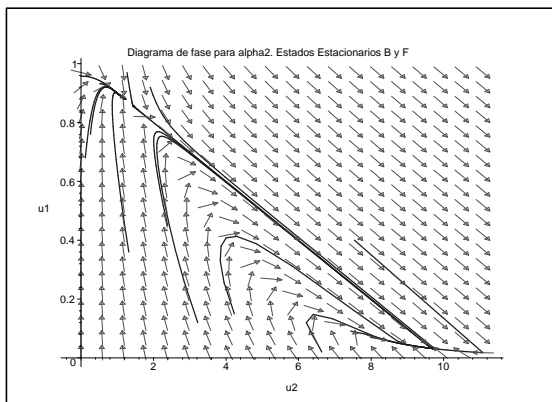


Figura 3.4: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_2 .

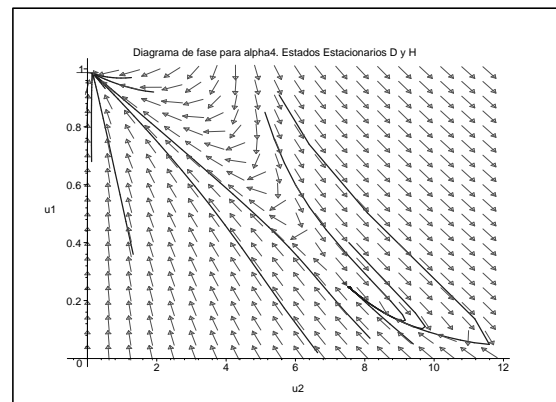


Figura 3.5: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_4 .

Para los valores de α_2 y α_4 , el sistema presenta dos estados estacionarios; en el primer caso los puntos son B y F, y para el otro los puntos son D y H. En los diagramas de fase se observan a los puntos B y H como nodos atractores, tal como lo sugieren los signos de sus autovalores correspondientes; sin embargo, en los mismos diagramas se aprecian que los puntos D y F presentan, en una parte de su entorno, un comportamiento como nodos atractores, pero en otra parte del entorno se comportan como punto silla; esta característica observada en el diagrama de fase contradice lo que indican los signos de los autovalores de estos puntos, y sugiere la existencia de puntos conocidos como nodos-silla, en los cuales la teoría de linealización falla, como se describió en el Capítulo 2.

En las simulaciones numéricas, del campo vectorial del sistema, se aprecia que el estudio local de algunos estados estacionarios, como es el caso de los estados D y F, no es suficiente para describir correctamente el comportamiento de los mismos. Por otro lado, la necesidad de describir la dinámica de las órbitas del sistema que parten de condiciones iniciales alejadas de los estados estacionarios nos conlleva a realizar un análisis global del sistema.

En las siguientes gráficas se muestran simulaciones numéricas de algunas órbitas del sistema para los 5 casos de variación del parámetro α que se vienen estudiando.

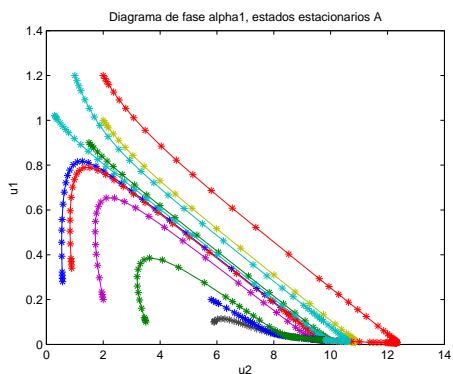


Figura 3.6: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_1 .

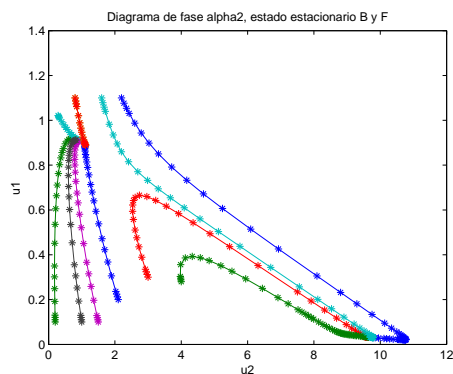


Figura 3.7: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_2 .

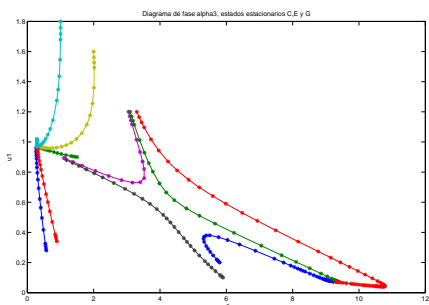


Figura 3.8: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_3 .

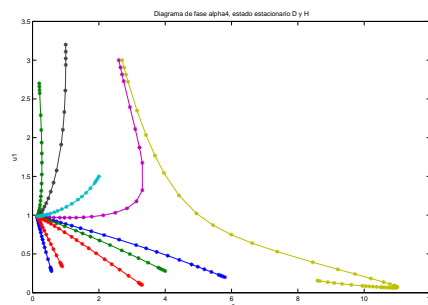


Figura 3.9: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_4 .

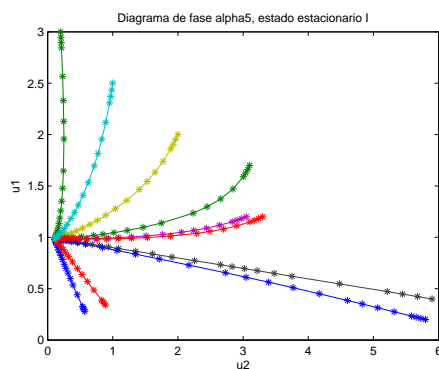


Figura 3.10: Diagrama de Fase del CSTR para el caso α_5 .

En todas las gráficas se aprecia el comportamiento descrito en los campos vectoriales. En los casos para α_1 y α_5 se observa que todas las órbitas del sistema son atraídas por los únicos puntos estacionarios; de igual manera para el caso de α_3 se muestra que las órbitas del sistema son atraídas por los estados estacionarios C y G, y que el estado E es un punto silla. Para los casos de α_2 y α_4 se aprecia que los estados estacionarios B y H son nodos atractores y los estados D y F atraen las órbitas que parten de condiciones iniciales en ciertas regiones del diagrama de fase y por el contrario, las órbitas que comienzan en otras regiones no son atraídas por estos puntos, por lo que no pueden ser clasificados como nodos atractores.

Para verificar el comportamiento entorno a los puntos D y F empleamos la teoría de iteración monótona obteniendo el siguiente resultado. Para esto consideramos el problema de iteración de punto fijo equivalente a (3.2):

$$u_2 = g_\alpha(u_2), \quad (3.3)$$

en donde, para $0 < \alpha < 1$ fijo,

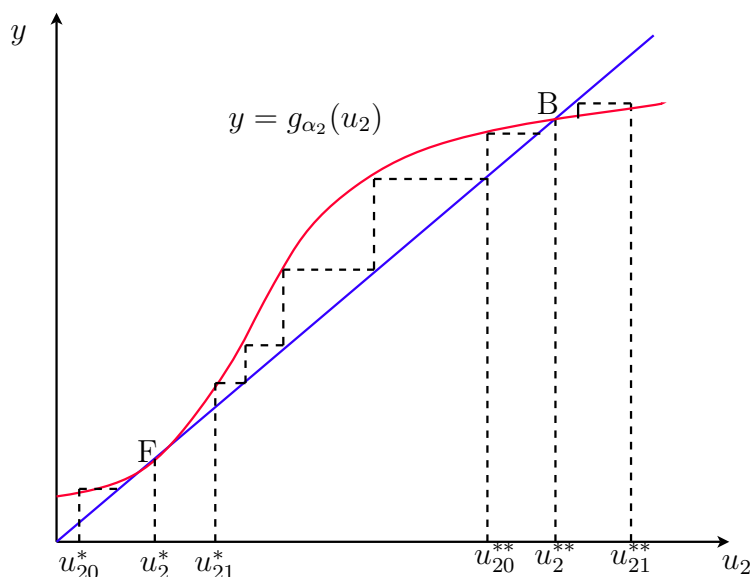
$$g_\alpha : [0, \beta] \rightarrow \mathbb{R}$$

es la función definida por

$$g_\alpha(u_2) = \frac{\alpha\beta}{\frac{1}{k(u_2)} + \alpha}.$$

Puede verificarse que la familia de funciones g_α es monótona creciente gracias a que $k(u_2)$ es creciente para todo $u_2 \in [0, \beta]$, según se señaló en la Capítulo 1.

Para el caso de α_2 la siguiente gráfica ilustra la iteración monótona de punto fijo



Como se muestra en la gráfica anterior, denotaremos por u_2^* y u_2^{**} las soluciones minimal y maximal respectivamente del problema (3.3). Además, ambas soluciones son las temperaturas correspondientes a los estados estacionarios F y B del sistema.

Por la definición 2.4 y el comportamiento de la función g_{α_2} , todo $u_2 \in [0, u_2^*]$ es una solución inferior y de manera similar, todo $u_2 \in [u_2^{**}, \beta]$ es una solución superior. Usando la Proposición 2.2, la sucesión

$$u_{2,n} = g_{\alpha_2}(u_{2,n-1})$$

es creciente en el intervalo $[0, u_2^*]$ y la sucesión

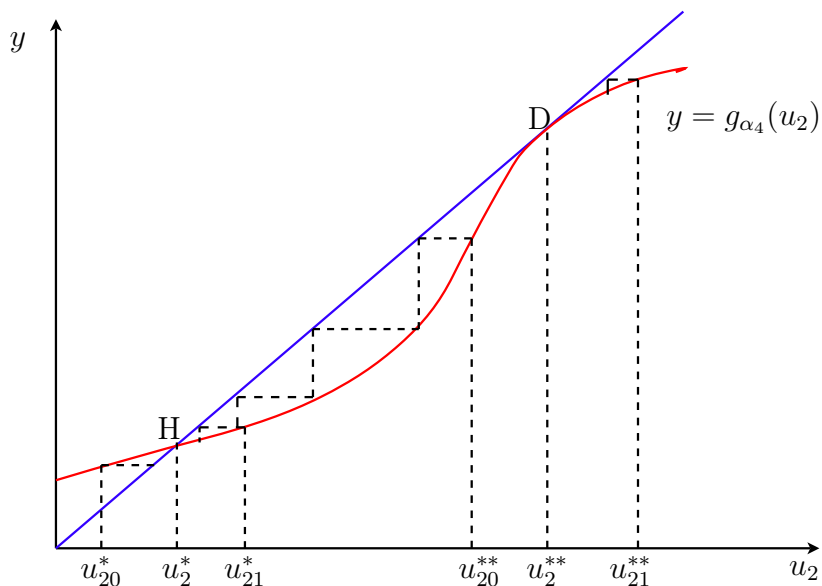
$$u_2^n = g_{\alpha_2}(u_2^{n-1})$$

es decreciente en el intervalo $[u_2^{**}, \beta]$. Esto implica que:

- Si tomamos un punto inicial a la izquierda de la solución minimal, u_2^* , la sucesión convergerá al estado estacionario F.
- Si tomamos un punto inicial a la derecha de la solución minimal u_2^* (o equivalentemente a la izquierda de la solución maximal u_2^{**}), la sucesión convergerá al estado estacionario B.
- Si tomamos un punto inicial a la derecha de la solución maximal, u_2^{**} , la sucesión convergerá al estado estacionario B.

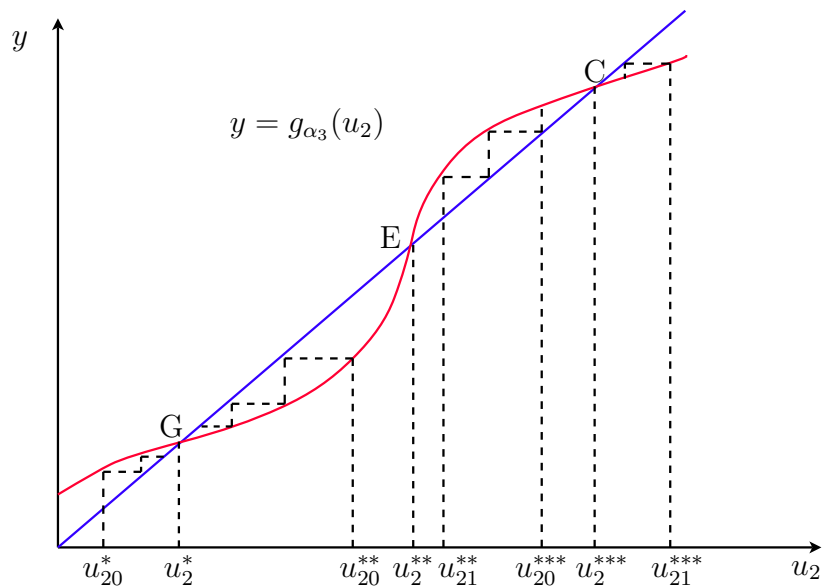
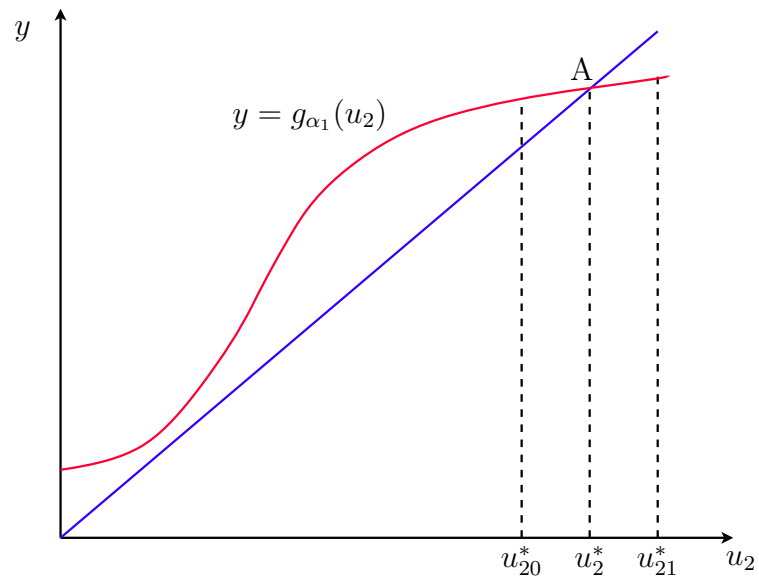
Este análisis indica que el estado estacionario F atrae las soluciones del sistema en una parte de su entorno y en otra parte las repele, dándole la característica de un punto nodo-silla. De igual forma se corrobora que el estado estacionario B es atractor.

Para el caso de α_4 la siguiente gráfica ilustra la iteración monótona de punto fijo

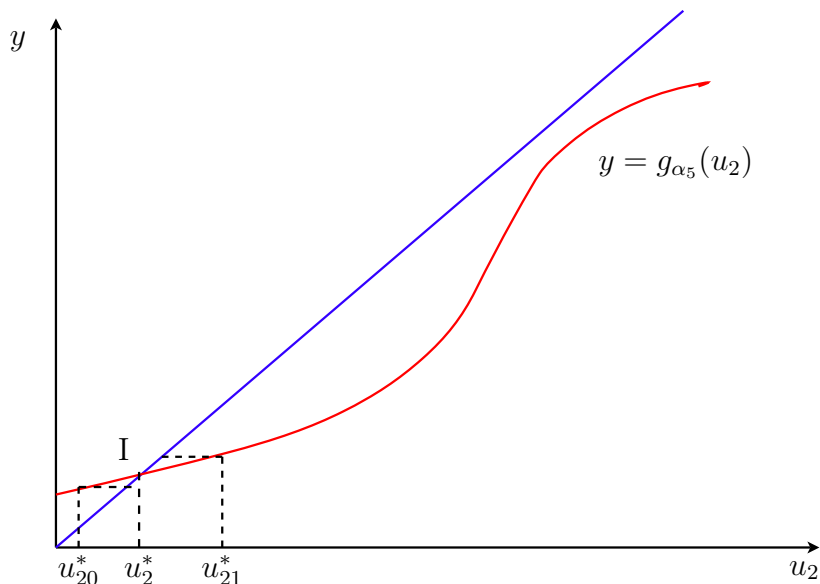


Un análisis similar al anterior indica que el estado estacionario D atrae las soluciones del sistema en una parte de su entorno y en otra parte las repele, dándole la característica de un punto nodo-silla. De igual manera se corrobora que el estado estacionario H es atractor.

Para los casos α_i , con $i \in \{1, 3, 5\}$, el análisis de iteración monótona de punto fijo es similar y corrobora el comportamiento de los estados estacionarios correspondientes en cada caso. Las gráficas siguientes ilustran el proceso de iteración para estos casos.



Con este análisis demostramos, en el caso para α_3 , que el estado estacionario E nunca será alcanzado como se evidenció en el diagrama de histéresis; en efecto el estado estacionario E es repulsor.



Por otra parte, se observa en las simulaciones numéricas que algunas órbitas arrancan en una condición inicial y se van directamente a un punto estacionario, otras órbitas comienzan en una condición inicial que puede estar cercana o alejada de las órbitas anteriores y parecen alejarse del estado estacionario durante algún tiempo hasta que finalmente la trayectoria cambia y se dirigen al punto estacionario. Lo observado sugiere la existencia de regiones en el diagrama de fase en las que las componentes del campo vectorial cambian de signo, y éstas determinan el comportamiento de las órbitas de manera global.

Para comprobar la existencia de regiones dentro del diagrama de fases se realizó el estudio nulclinal del campo vectorial. Las ecuaciones nulclinales que determinan los estados de equilibrio, obtenidas del sistema no lineal de ecuaciones, son las siguientes

$$u_1 = \varphi_1(u_2) = \frac{1}{1 + \alpha k(u_2)} \quad \text{y} \quad u_1 = \varphi_2(u_2) = \frac{u_2}{\alpha \beta k(u_2)}.$$

φ_1 representa la nulclinal u_1 y φ_2 representa de manera implícita la nulclinal u_2 . A lo largo de la nulclinal φ_1 la primera componente del campo de dirección es cero y en consecuencia el campo vectorial es perpendicular al eje u_1 . Similarmente, a lo largo de la nulclinal φ_2 la segunda componente del campo de dirección es cero, por lo que el campo vectorial es perpendicular al eje u_2 .

Fácilmente se verifica que

$$\lim_{u_2 \rightarrow 0^+} \varphi_1(u_2) = \frac{1}{1 + \alpha} \quad \text{y} \quad \lim_{u_2 \rightarrow +\infty} \varphi_1(u_2) = \frac{1}{1 + \alpha e^\gamma},$$

y que

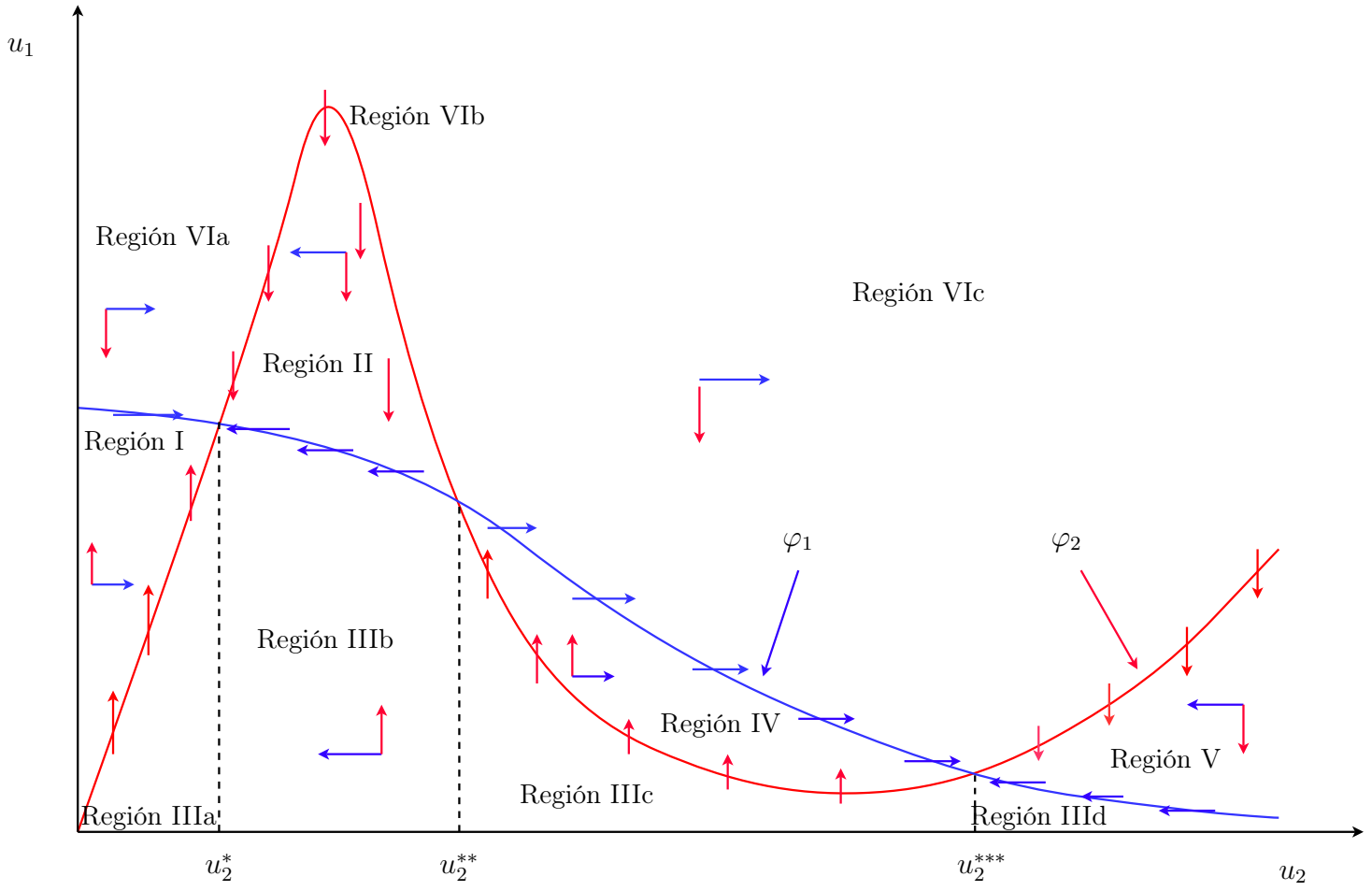
$$\lim_{u_2 \rightarrow 0^+} \varphi_2(u_2) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{u_2 \rightarrow +\infty} \varphi_2(u_2) = +\infty.$$

La intersección de estas curvas nos proporcionan los estados estacionarios que posee el sistema. Además, las nulclinales dividen el diagrama de fase en regiones.

Para el caso específico del sistema con α_3 , el diagrama de fase queda dividido en VI regiones definidas por los siguientes conjuntos de \mathbb{R}^2 :

$$\begin{aligned} \text{Región I} &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < \varphi_1(u_2), \quad 0 < u_2 < u_2^*\} \\ \text{Región II} &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_1(u_2) < u_1 < \varphi_2(u_2), \quad u_2^* < u_2 < u_2^{**}\} \\ \text{Región III}_a &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : 0 < u_1 < \varphi_2(u_2), \quad 0 < u_2 < u_2^*\} \\ \text{Región III}_b &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : 0 < u_1 < \varphi_1(u_2), \quad u_2^* < u_2 < u_2^{**}\} \\ \text{Región III}_c &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : 0 < u_1 < \varphi_2(u_2), \quad u_2^{**} < u_2 < u_2^{***}\} \\ \text{Región III}_d &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : 0 < u_1 < \varphi_1(u_2), \quad u_2^{***} < u_2 < \beta\} \\ \text{Región IV} &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < \varphi_1(u_2), \quad u_2^{**} < u_2 < u_2^{***}\} \\ \text{Región V} &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_1(u_2) < u_1 < \varphi_2(u_2), \quad u_2^{***} < u_2 < \beta\} \\ \text{Región VI}_a &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < 1, \quad u_2^* < u_2 < u_2^{**}\} \\ \text{Región VI}_b &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < 1, \quad \text{máx } \varphi_2(u_2) < u_2 < u_2^{**}\} \\ \text{Región VI}_c &= \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_1(u_2) < u_1 < 1, \quad u_2^{**} < u_2 < u_2^{***}\}. \end{aligned}$$

En la siguiente figura se ilustran las nulclinales, las tres intersecciones correspondientes a los tres estados estacionarios, las regiones definidas anteriormente y las direcciones que toman las componentes del campo en cada Región.



Se tiene el siguiente resultado

Proposición 3.2.

1. Para todo $(u_1, u_2) \in I \cup IV$

$$\frac{du_1}{dt} > 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} > 0.$$

2. Para todo $(u_1, u_2) \in II \cup V$

$$\frac{du_1}{dt} < 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} < 0.$$

3. Para todo $(u_1, u_2) \in III = \bigcup_{i \in \{a,b,c,d\}} III_i$

$$\frac{du_1}{dt} > 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} < 0.$$

4. Para todo $(u_1, u_2) \in VI = \bigcup_{i \in \{a,b,c\}} VI_i$

$$\frac{du_1}{dt} < 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} > 0.$$

La prueba de este resultado es inmediata. Basta con tomar un punto (u_1, u_2) en cada región y verificar el signo de la derivada de las funciones u_1 y u_2 haciendo uso de las componentes del campo vectorial. (ver detalles en apéndice A).

Con el resultado anterior vemos que las soluciones presentan el siguiente comportamiento en cada región:

- En la región I, las soluciones se mueven hacia arriba y hacia la derecha. Toda solución en esta región se va directamente al estado estacionario G.
- En la región II, las soluciones se mueven hacia abajo y hacia la izquierda. Las soluciones en esta región pueden irse directamente al estado estacionario G o pasar a la región III_b.
- En la región III = III_a ∪ III_b ∪ III_c ∪ III_d, las soluciones se mueven hacia arriba y hacia la izquierda. En esta región pueden ocurrir varias cosas: en primer lugar, si la solución se encuentra en la sub-región III_a pasa a la región I y se va al estado estacionario G; si está en la sub-región III_b puede irse directo al punto estacionario G o puede entrar a la sub-región III_a; si la solución se encuentra

en la sub-región III_c puede entrar a la sub-región III_b o pasar a la región IV y finalmente si la solución está en la sub-región III_d puede irse directamente al estado estacionario C o pasar a la sub-región III_c .

- En la región IV, las soluciones se mueven hacia arriba y hacia la derecha. Toda solución en esta región puede ir directamente al estado estacionario C o pasar a la región VI_c .
- En la región V, las soluciones se mueven hacia abajo y hacia la izquierda. Toda solución en esta región puede ir directamente al estado estacionario C o pasar a la región III_d .
- En la región $VI = VI_a \cup VI_b \cup VI_c$, las soluciones se mueven hacia abajo y hacia la derecha. En esta región pueden ocurrir varias cosas: en primer lugar, si la solución se encuentra en la sub-región VI_a puede ir al estado estacionario G o pasar a la región II o pasar a la región VI_b ; si está en la sub-región VI_b puede entrar a la región II o pasar a la sub-región VI_c ; si la solución se encuentra en la sub-región VI_c puede irse al estado estacionario C o entrar a la región V.

El comportamiento descrito en el análisis anterior se valida con las simulaciones que se muestran en la figura a continuación.

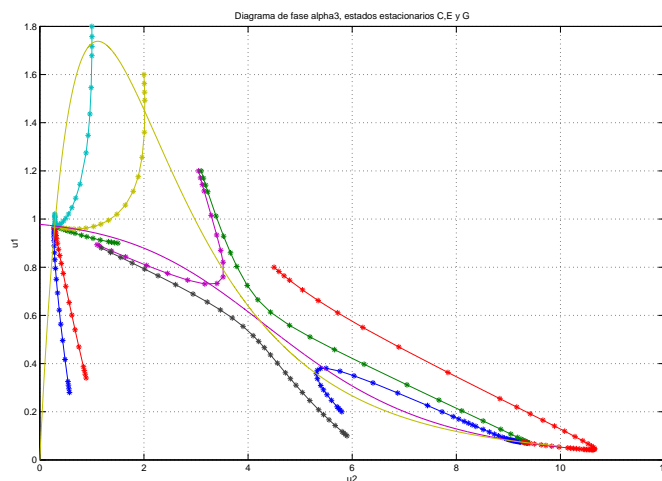


Figura 3.11: Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_3 .

Para los otros casos, α_i con $i \in \{1, 2, 4, 5\}$, el análisis es similar y se muestran en las gráficas siguientes.

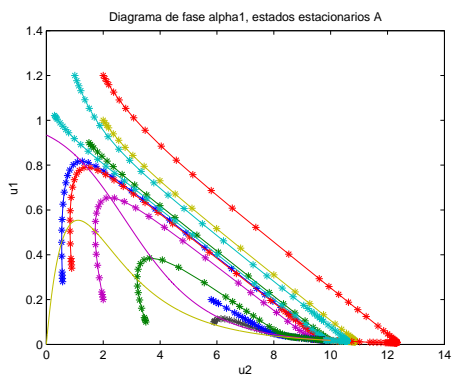


Figura 3.12: Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_1 .

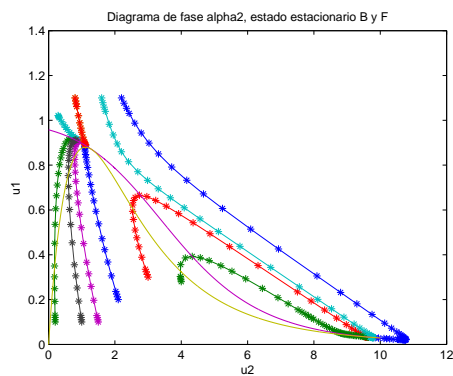


Figura 3.13: Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_2 .

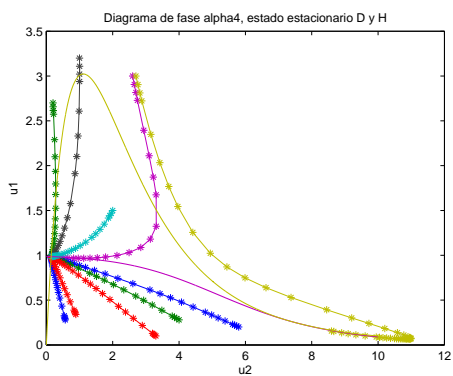


Figura 3.14: Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_4 .

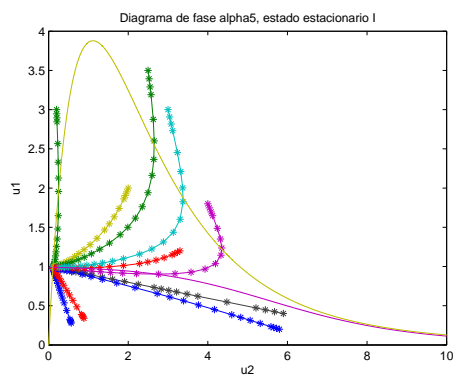


Figura 3.15: Diagrama de Fase del CSTR con nulclinas. Caso α_5 .

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En el presente trabajo se analizó la dinámica de un reactor químico de tanque perfectamente agitado (o CSTR) en el que se lleva a cabo una reacción química genérica del tipo $A \rightarrow B$. Para esto, se planteó un modelo matemático de dos ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) altamente no lineales en las variables de estado, adimensionales, concentración del reactivo A y temperatura del sistema.

En el modelo matemático planteado para describir la dinámica del CSTR se garantiza la existencia y unicidad de la solución con dependencia continua de la condición inicial. Esto hace viable al modelo para describir el comportamiento dinámico del CSTR.

Dentro del estudio del comportamiento dinámico del sistema, se encontró que se pueden presentar de uno a tres estados estacionarios dependiendo del parámetro α que está relacionado con el flujo volumétrico del reactivo A . Con un diagrama de histéresis se evidenciaron valores críticos para el parámetro α que al ser ligeramente perturbados ocasionan que un estado estacionario desaparezca o se bifurque.

En los casos en los que se tiene un solo estado estacionario se demostró, empleando la teoría local de linealización y la de iteración monótona de punto fijo, que son nodos atractores de las soluciones del sistema. Para los casos en los que se tienen dos estados estacionarios se demostró que uno es nodo atractor y, mediante simulaciones numéricas, se evidenció la presencia de puntos de bifurcación tipo nodo-silla que pueden ser confundidos con nodos atractores si se emplea solamente el estudio local de linealización. Para el caso en el que se presentan tres estados estacionarios se demostró, empleando la teoría local de linealización y la de iteración monótona de punto fijo, que dos de ellos son nodos atractores de las soluciones del sistema y el otro es un punto silla.

Mediante simulaciones numéricas se constató la existencia de regiones en el diagrama de fase que rigen el comportamiento de las órbitas de manera global. El análisis nulclinal del campo vectorial de direcciones para el sistema permitió caracterizar estas regiones determinando que las componentes de este campo cambian de signo de una región a otra. Esta caracterización permite predecir correctamente el recorrido de las órbitas en el diagrama de fase y el estado estacionario al cual se dirigen.

Se recomienda extender este tipo de análisis a sistemas reactivos no adiabáticos como los CSTR con sistemas de enfriamiento o chaqueta de enfriamiento, a fin de estudiar estados estacionarios que presentan otro tipo de bifurcación.

APÉNDICE A

A continuación daremos mas detalles sobre la prueba de la siguiente proposición enunciada en el Capitulo 3.

Proposición A.1.

1. Para todo $(u_1, u_2) \in I \cup IV$

$$\frac{du_1}{dt} > 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} > 0.$$

2. Para todo $(u_1, u_2) \in II \cup V$

$$\frac{du_1}{dt} < 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} < 0.$$

3. Para todo $(u_1, u_2) \in III = \bigcup_{i \in \{a,b,c,d\}} III_i$

$$\frac{du_1}{dt} > 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} < 0.$$

4. Para todo $(u_1, u_2) \in VI = \bigcup_{i \in \{a,b,c\}} VI_i$

$$\frac{du_1}{dt} < 0 \quad y \quad \frac{du_2}{dt} > 0.$$

Demostración. La prueba de este resultado es inmediata. Basta con tomar un punto (u_1, u_2) en cada región y verificar el signo de la derivada de las funciones u_1 y u_2 haciendo uso de las componentes del campo vectorial, en efecto,

- Región $I = \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < \varphi_1(u_2), \quad 0 < u_2 < u_2^*\}$

Para el campo f_1

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= 1 - u_1 - \alpha u_1 k(u_2) \\ &> 1 - \varphi_2(u_2) - \alpha \varphi_2(u_2) k(u_2) \\ &= 1 - \frac{u_2}{\beta} \left(\frac{1}{\alpha k(u_2)} \right) \\ &> 1 - \frac{u_2^*}{\beta} \left(\frac{1}{\alpha} e^{-u_2^*} + 1 \right) > 0 \end{aligned}$$

ya que

$$\frac{du_2^*}{\beta} \left(\frac{1}{\alpha k_1} \right) < 1$$

por lo tanto se tiene que $\frac{du_1}{dt} > 0$.

Análogamente para el campo f_2 se tiene que $\frac{du_2}{dt} > 0$. En efecto,

$$\begin{aligned} \frac{du_2}{dt} &= -u_2 - \alpha\beta u_1 k(u_2) \\ &> -u_2^* - \alpha\beta\varphi_2(u_2)k(u_2) \\ &= -u_2^* + u_2^* = 0. \end{aligned}$$

- Región $II = \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_1(u_2) < u_1 < \varphi_2(u_2), u_2^* < u_2 < u_2^{**}\}$

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= 1 - u_1 - \alpha u_1 k(u_2) \\ &< 1 - \varphi_1(u_2) - \alpha\varphi_1(u_2)k(u_2) \\ &= 1 - \frac{1}{(1 + \alpha k(u_2))} (1 + \alpha k(u_2)) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto se tiene que $\frac{du_1}{dt} < 0$.

Para el campo f_2 se tiene que $\frac{du_2}{dt} < 0$. En efecto;

$$\begin{aligned} \frac{du_2}{dt} &= -u_2 - \alpha\beta u_1 k(u_2) \\ &< -u_2 - \alpha\beta\varphi_2(u_2)k(u_2) \\ &= -u_2 \\ &< 0 \end{aligned}$$

- Región $III_a = \{(u_1, u_2) \in \Omega : 0 < u_1 < \varphi_2(u_2), 0 < u_2 < u_2^*\}$

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= 1 - u_1 - \alpha u_1 k(u_2) \\ &> 1 - \varphi_2(u_2) - \alpha \varphi_2(u_2) k(u_2) \\ &= 1 - \frac{u_2}{\beta k(u_2)} \left(\frac{1}{\alpha} - 1 \right) \end{aligned}$$

luego, como $\frac{u_2}{\beta k(u_2)} \left(\frac{1}{\alpha} - 1 \right) < 1$ entonces se tiene que $\frac{du_1}{dt} > 0$.

Para el campo f_2 tenemos que $\frac{du_2}{dt} < 0$. En efecto;

$$\begin{aligned} \frac{du_2}{dt} &= -u_2 - \alpha \beta u_1 k(u_2) \\ &< -u_2 + u_2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

- Para las regiones III_b , III_c y III_d se prueba de manera similar que $\frac{du_1}{dt} > 0$ y $\frac{du_2}{dt} < 0$.

- Región $IV = \{(u_1, u_2) \in \Omega : \varphi_2(u_2) < u_1 < \varphi_1(u_2), u_2^{**} < u_2 < u_2^{***}\}$.

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= 1 - u_1 - \alpha u_1 k(u_2) \\ &< 1 - \varphi_1(u_2) - \alpha \varphi_1(u_2) k(u_2) \\ &= \left(1 - \frac{1}{(1 + \alpha k(u_2))} (1 + \alpha k(u_2)) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto se tiene que $\frac{du_1}{dt} < 0$.

Para el campo f_2 se tiene que $\frac{du_2}{dt} > 0$. En efecto;

$$\begin{aligned}\frac{du_2}{dt} &= -u_2 - \alpha\beta u_1 k(u_2) \\ &> -u_2 + \alpha\beta\varphi_2(u_2)k(u_2) \\ &= -u_2 + u_2 \\ &= 0\end{aligned}$$

- En la región V se tiene que $\frac{du_1}{dt} < 0$ y $\frac{du_2}{dt} < 0$.

La prueba es exácta a la realizada en las regiones II y III_a .

- Para las regiones VI_a, VI_b y VI_c se utilizan argumentos similares a los utilizados en los casos anteriores para probar que $\frac{du_1}{dt} < 0$ y $\frac{du_2}{dt} < 0$.

□

REFERENCIAS

- [1] R. Sacco A. Quarteroni and F. Saleri. *Numerical Mathematics*. Texts in Applied Mathematics, Springer-Verlag, New York, 2000.
- [2] J. Rivero A. Tineo. *Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*. Publicación de la Universidad de los Andes. Mérida-Venezuela, 2002.
- [3] W. H. Ray A. Uppal and A. B. Poore. Chem. Engrg. Sci, 31(1976), 205.
- [4] W. H. Ray A. Uppal and A. B. Poore. Chem. Engrg. Sci, 29(1974), 967.
- [5] H. Amann. *Ordinary Differential Equations: An Introduction to Non-linear Analysis*. De Gruyter. Walte, 1990.
- [6] W. W. Farr an R. Aris. Chem. Engrg. Sci, 41(1986), 1385.
- [7] R. Aris. *Mathematical Modelling Techniques*. Dover Publications, INC. New York-(USA), 1994.
- [8] R. Aris. *Análisis de Reactores*. Editorial Alhambra,España, 1998.
- [9] R. Aris and N. R. Amundson. Chem. Engrg. Sci, 7(1958), 121.
- [10] R. Aris and N. R. Amundson. Chem. Engrg. Sci, 7(1958), 132.
- [11] R. Aris and N. R. Amundson. Chem. Engrg. Sci, 7(1958), 148.
- [12] V. Balakotaiah and D. Luss. Chem. Engrg. Commun, 13(1981), 111.
- [13] V. Balakotaiah and D. Luss. Chem. Engrg. Sci, 37(1982), 1611.
- [14] V. Balakotaiah and D. Luss. Chem. Engrg. Sci, 38(1983), 1709.
- [15] V. Balakotaiah and D. Luss. Chem. Engrg. Commun, 19(1982), 185.
- [16] V. Balakotaiah and D. Luss. Chem. Engrg. Sci, 37(1982), 433.

- [17] V. Balakotaiah and D. Luss. *Chem. Engrg. Sci*, 39(1984), 865.
- [18] R. Ball and B. F. Gray. *Ind. Engrg. Chem. Res*, 34(1998), 3726.
- [19] W. Bequette. *Process Dynamics*. Prentice Hall International, 1973.
- [20] O. Bilous and N. R. Amundson. *Aiche J.*, 1(1958), 513.
- [21] M. Braun. *Ecuaciones Diferenciales y sus Aplicaciones*. Grupo Editorial Iberoamérica. México-DF, 1990.
- [22] J. Butcher. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*. Wiley, Chichester, 1987.
- [23] N. Levinson E. Coddington. *Theory of Ordinary Differential Equations*. McGraw-Hill, New York-USA, 1995.
- [24] I. R. Epstein and J. A. Pojman. *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*. Oxford University Press, New York, 1998.
- [25] L Ferguson. **What can be approximated by polynomials with integer coefficients**. *The American Mathematical Monthly*, 113(5):403–414, 2006.
- [26] R. J. Field and M. Burger. *Oscillations and Travelling Waves in Chemical Systems*. Wiley, New York, 1985.
- [27] M. Golubitsky and B.L. Keyfitz. **A qualitative study of the steady-state solutions for a continuous flow stirred tank chemical reactor**. *SIAM Journal of Mathematic Analysis*, 11:316–339, 1980.
- [28] J. Guckenheimer and P. Holmes. *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Applied Mathematical Sciences, Springer-Verlag, New York, 1983.
- [29] G.Ñ. Mercer H. S. Sidhu, M. I.Ñelson and R. O. **Dynamical analysis of an elementary $X+Y \rightarrow P$ reaction in a continuously stirred tank reactor**. *Journal of Mathematical Chemistry*, 28(4):553–375, (2000),pp.

-
- [30] J.H. Hubbard and B.H. West. *Differential Equations: A Dynamical Systems Approach*. Texts in Applied Mathematics, Springer-Verlag, New York, 1995.
- [31] I. Irribarren. *Cálculo Diferencial en Espacios Normados*. EQUINOCCIO. Ediciones de la Universidad Simón Bolívar (USB). Caracas-Venezuela, 1980.
- [32] S. Lynch. *Dynamical System with Applications using Maple*. Editorial Birkhäuser. Boston-(USA), 2001.
- [33] R. K. Miller and A.Ñ. Michel. **Ordinary Differential Equations**. Academic Press, New York, 1982.
- [34] A. Romano N. Bellomo, L. Preziosi. *Mechanics and Dynamical Systems with Mathematica*. Editorial Birkhäuser. Boston-(USA), 2000.
- [35] R.L. Devaney P. Blanchard and G.R. Hall. *Ecuaciones Diferenciales*. International Thomson Editores. México-DF, 1999.
- [36] E. Penney. *Ecuaciones Diferenciales Elementales y Problemas con Condiciones en la Frontera*. Prentice Hall, Tercera Edición, Mexico, 1994.
- [37] M. F. Pérez and R. Font. **Regular Self-oscillating an Chaotic Dynamics of a Continuous Stirred Tank Reactor**. Computers and Chemical Eng., 26:889–890, 2002.
- [38] J. B. Planeaux and K. F. Jensen. Chem. Engrg. Sci, 41(1986), 1497.
- [39] I. Stakgold. *Green's Functions and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons, INC. New York, 1998.
- [40] A. M. Stuart and A. R. Humphries. *Dynamical System and Numerical Analysis*. Cambrige Monographs on Aplied and Computational Mathematics. CAMBRIDGE University Press, USA, 1998.
- [41] M. Kubicek V. Hlavacek and J. Jelinek. Chem. Engrg. Sci, 25(1970), 1441.
- [42] C. van Heerden. Ind. Engrg. Chem., 45(1953), 1242.

- [43] M. Golubitsky y M. Dellnitz. *Álgebra lineal y ecuaciones diferenciales, con uso de MATLAB*. International Thomson, México, 2001.
- [44] Ya. B. Zeldovich. I. Zh. Tekh. Fiz., 11(1941), 493.