



**FACULTAD DE CIENCIAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICAS**

**CONTROL OPTIMAL Y ESTABILIDAD DE PROCESOS
SOBRE BIORREACTORES**

**TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE LICENCIADA EN
MATEMÁTICAS**

Participante : Marietta Andrea Gómez Frez
Profesor Guía : Ph.D. Julio César Rodríguez.

Valparaíso, 2016

Dedicatoria:

Dedicada en especial a mis hijos, por el sacrificio que esto conlleva, ya que sin el apoyo y comprensión de ellos esto no se hubiese llevado a cabo.

Agradecimientos

Agradezco a mi Profesor guía por su apoyo incondicional y constante en el desarrollo de ésta tesis y por el esfuerzo para alcanzar mis metas y recordar que es una etapa más en mi vida en donde se afianza mi vocación sirviendo a otros. Por ello debo agradecer a Dios lo que ha ocurrido y agradecer a quienes hicieron posible tanto material como espiritualmente que haya terminado mi carrera. Y aunque no es fácil escribir en pocas líneas mi sentir, aprovecho esta oportunidad para decir: Gracias Padres queridos, gracias hijos, gracias Profesor Julio César.

Al Instituto de Matemática de la Universidad de Valparaíso, por brindarme la oportunidad de continuar estudios.

A Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico por el Apoyo Financiero a través del Proyecto Fondecyt Nro. 1130538, bajo la dirección del Profesor Guía Dr. Julio César Rodríguez.

Valparaíso-Chile, Marzo de 2016

Marietta Andrea Gómez Frez

Resumen

Esta Tesis se desarrolla en el contexto de la Teoría de Control y estabilidad. El principal objetivo del trabajo es presentar un análisis de optimalidad y estabilidad de procesos sobre biorreactores cuya dinámica esta regida por un sistemas de control.

Inicialmente establecemos los principales elementos matemáticos utilizados en este trabajo, los cuales provienen de la Teoría de Control y Estabilidad. En particular, conceptos tales sistemas de control, controlabilidad, control optimal, Principio del Máximo de Pontryaguin, y estabilidad, son introducidos y utilizados para alcanzar los objetivos propuestos. Seguidamente, discutimos diversos aspectos relacionados al estudio de problemas de control optimal sobre biorreactores del tipo SBR, y tiempo mínimo de cierto bioproceso. Finalmente, presentamos un análisis sobre el problema de estabilidad de un proceso sobre Quimiostato, cuya dinámica puede ser descrito por un sistema de control. El estudio realizado constituye una base ordenada para establecer nuevos resultados que permitan abordar diversos problemas de biorectores en el contexto de control optimal y estabilidad.

Contents

Agradecimientos	ii
Resumen	iv
Introducción	1
1 Preliminares	3
1.1 Procesos sobre Bioreactores	3
1.2 Sistemas de Control	13
1.3 Controlabilidad	18
1.4 Control Optimal	18
1.5 Elementos de la Teoría de Estabilidad	29
2 Control Optimal	34
2.1 Control optimal de procesos sobre de Bioreactores SBR	34
2.1.1 Formulación	36
2.1.2 Controlabilidad	39
2.1.3 Análisis sobre el plano	41
2.2 Proceso para el tratamiento de agua en un bioreactor SBR	51
2.3 Tiempo mínimo de un bioproceso	56

3 Estabilidad en el Quimiostato	61
3.1 Competición de especies sobre el Quimiostato	61
3.2 Estabilidad	64
3.2.1 Análisis local	64
3.2.2 Análisis global	66
3.3 Término de rendimiento	68
Conclusiones	70
Bibliografía	72

Introducción

Esta tesis se desarrolla en el marco de la Teoría Matemática de Control, estabilidad y biorreactores. El principal objetivo del trabajo es presentar un análisis de las propiedades de optimalidad y estabilidad para algunos procesos sobre cierto tipo de biorreactores; para tal finalidad utilizamos herramientas de Control Optimal, y estabilidad tales como el Principio del máximo de Pontryagin, su formalismo Hamiltoniano asociado, y Teoría de estabilidad.

Los principales elementos matemáticos utilizados provienen de la teoría geométrica de control, control de bioprocesos, y teoría de estabilidad; conectados a través de la dinámica asociada a cada tipo de biorreactor. En particular, conceptos tales como sistemas de control, controlabilidad, funciones de crecimiento, Principio del máximo de Pontryaguin, etc., son introducidos y utilizados para alcanzar los objetivos propuestos. Es importante destacar que la teoría de control de bioprocesos tiene enormes aplicaciones en una gama amplia de problemas en áreas de la ciencia como Física, Química y Biotecnología, debido a su potencialidad como herramienta de análisis en problemas sobre optimalidad de bioprocesos. Diversos autores han analizado continuamente problemas provenientes del estudio de procesos sobre biorreactores, con la finalidad de desarrollar teorías sistemáticas que permitan obtener respuestas a diversas interrogantes provenientes de la industria y recursos naturales, [25], [26], para algunos aspectos relacionados al análisis de procesos en biorreactores.

La presente tesis está organizada en 3 capítulos, a continuación entregamos una breve descripción de las secciones que la componen:

1. Preliminares.

Este capítulo, contiene algunos resultados de la Teoría de Control Geométrico y biorreactores estrechamente relacionados al problema en estudio. Se introducen nociones elementales de reactores secuenciales por lotes, funciones de crecimiento asociados con un bioproceso. Se explican en detalle algunos conceptos sobre sistemas de control y las propiedades de controlabilidad y control optimal, destacándose el Principio del máximo de Pontryaguin, clasificando los diversos tipos de trayectorias extremales provenientes desde tal principio de optimalidad. Son introducidos los elementos de la teoría de estabilidad necesarios para la comprensión de la tesis.

2. Control Optimal sobre biorreactores.

En este capítulo, inicialmente establecemos la formulación de un problema de control optimal de un proceso cuya dinámica esta descrita por un sistema de control, el cual esta asociado a un bioproceso

correspondiente a especies en competición por un simple recurso. Finalmente, analizamos la propiedad de tiempo optimal de un proceso cuya dinámica indica la interacción de nutrientes y microorganismos en proceso de fermentación.

3. Estabilidad en el Quimiostato.

En este capítulo, discutimos el problema de estabilidad para un proceso sobre biorreactores.

CONCLUSIONES.

Esta sección contiene conclusiones sobre el trabajo de tesis, indicando su relación con otros problemas de aplicación provenientes de la teoría desarrollada en esta tesis.

Chapter 1

Preliminares

1.1 Procesos sobre Bioreactores

El estudio de procesos bioquímicos ha sido evaluado por varios autores. En particular, procesos de optimización [26]. Un esfuerzo importante se ha hecho por la comunidad de la ingeniería química para desarrollar teorías generales y sistemáticas para analizar el problema de síntesis de procesos. Esta tarea resulta ser mucho más compleja para el caso de sistemas biológicos. Una razón de ello es la dificultad de encontrar un modelo simple pero preciso para representar a todas las dinámicas importantes de organismos que interactúan en un biosistema viviente.

Los procesos biológicos por lo general se pueden clasificar en dos tipos de sistemas: a) microbiológico, y b) reacciones basadas en enzimas-. En términos simples, reacciones microbiológicas - reacciones definen reacciones en las que una degradación del sustrato se asocia con el crecimiento de ciertos organismos, mientras que, la reacción enzimática puede ser vista como una reacción química con crecimiento específico.

En el campo de los procesos químicos y biológicos, la optimización de una planta tiene importantes ventajas prácticas. Ellos pueden estar relacionados con la economía (tanques más pequeños o reactores de formas adaptadas a las limitaciones de rendimiento permiten su construcción y minimización de su operación), o el rendimiento (más pequeña o más adecuada configuración de los reactores conduce a la maximización de las tasas de conversión) o, una vez más, con el espacio disponible (los tanques más pequeños incluso más caros que otra configuración habilita la planta para ocupar menos espacio). Ante el aumento de los costos energéticos y la creciente competencia global en términos de precio y calidad, la tendencia en la industria química se está desplazando hacia la fabricación en las plantas

de proceso por lotes [80]. También existe una mayor conciencia sobre los problemas ambientales, y en muchos casos se dicta el proceso de operación. La necesidad de hacer que los productos de la manufactura sea realizada benigna ha allanado el camino para la ruta biológica hacia la manufactura y los biorreactores pueden funcionar a presiones ambientales y temperaturas, con la mayoría de los casos incluyendo operación libre de disolventes orgánicos. Sin embargo, la tendencia en estos procesos es operar en el denominado modo de proceso por lotes para mantener condiciones de esterilidad y para flexibilidad.

La noción de reacción química [15], es muy útil para describir procesos sobre biorreactores, dada a continuación

Definición 1. *Una reacción química es aquella operación que tiene por objeto distribuir los átomos de ciertas moléculas (reaccionantes y reactantes) para formar otras moléculas nuevas (productos).*

Una reacción química tiene en cuenta: i) condiciones de presión, temperatura y composición necesarias para que los materiales ingresen en estado de reacción, ii) características termodinámicas y cinéticas de la reacción, iii) fases (sólido, líquido o gaseoso) que se encuentran presentes en la reacción.

Características de Bioreactores

Un sistema de biorreactor, usualmente, se puede descomponer en diferentes escalas, ya sea temporal y/o espacial.

Como es conocido, cada célula individual es también un reactor en su propio sentido donde una serie complicada de reacciones tienen lugar. Estas reacciones ocurren simultáneamente, pero están reguladas por controles celulares internos. Estos controles facultan a la célula para modificar las velocidades de las reacciones dentro de su red de reacción y las capacidades de producción basados en el medio ambiente y la disponibilidad nutricional.

Un elemento importante, sobre biorreactores es dado por la siguiente noción,

Definición 2. *Un bioproceso es cualquier proceso que utiliza células vivas completas o sus componentes (por ejemplo, enzimas, cloroplasto) para efectuar cambios físicos o químicos deseados. En otras palabras, un bioproceso consta de un cultivo de células en un biorreactor, que es un proceso capaz de crear un entorno de crecimiento óptimo.*

El proceso de crecimiento de los organismos unicelulares acompañados de un aumento en el número de células que se conoce comúnmente como la biomasa. Asociados a este crecimiento tenemos la absorción de nutrientes y la generación de productos, que, si se excreta puede alterar el pH y otras condiciones del medio circundante. La fuente de carbono que sirve como el nutriente primario para

la célula, es conocida como sustrato. Por otra parte, cualquier cambio en las propiedades del sistema puede alterar las reacciones que tienen lugar dentro de la célula, en vista que las células utilizan sustrato y nutrientes del medio circundante; esto afecta la operación de un biorreactor el cual es un sistema altamente interactivo, [40].

Los biorreactores pueden ser clasificados por su forma o por su modo de operación. A continuación describimos algunos detalles,

BIORREACTORES POR SU FORMA: pueden ser reactores en forma de tanque o reactores tubulares, como muestra la Figura 1.1.

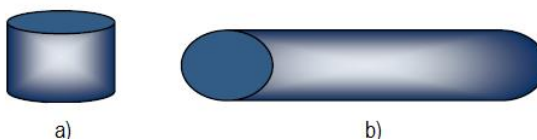


Figure 1.1: Tipos de reactores por su forma: a) tanque, b) tubular

BIORREACTORES POR SU MODO DE OPERACIÓN: Basado en el medio ambiente, se selecciona el modo de funcionamiento del bioreactor y puede ser operado por lotes. En el modo de operación continuo el sustrato se añade de forma continua en el sistema y los productos son eliminados simultáneamente desde el sistema. Mientras en modo por lotes, todos los sustratos se añaden al principio, pero ningún producto se retira hasta que finalice la operación. La operación de alimentación por lotes es una donde el sustrato se añade a intervalos de tiempo particulares durante el curso del lote, y el producto se retira sólo al final. Aunque los procesos continuos ofrecen ventajas tales como una mayor productividad y facilidad de operación en comparación con los procesos por lotes, tienen ciertas desventajas asociadas, tales como fallas de los equipos, la infección por otros microorganismos, y mutaciones espontáneas en la cepa [51]; se prefieren los modos de proceso por lotes, ya que tienen la ventaja de evitar excesiva alimentación de sustrato que puede inhibir el crecimiento de microorganismos. Los modos de operación por lotes sufren de ciertas desventajas debido a la necesidad de esterilizar el equipo después de cada lote. En esta configuración el modo de alimentación por lotes ofrece una flexibilidad operativa y es preferida sobre el modo continuo de funcionamiento. Debido a su importancia práctica, esta tesis se centra en el modo de alimentación discontinua de operación del biorreactor.

Existen varias formas de operación de un reactor químico, cada uno de los cuales responde a las necesidades de una situación específica. Los siguientes tipos de reactores son de nuestro interés, [52]:

- reactor Discontinuo. Es un tipo de reactor cuyo funcionamiento consiste en adicionar al inicio del proceso los reactivos (materiales) de una vez en el interior del reactor, se lleva a las condiciones de presión y temperatura requeridas y se espera el tiempo necesario para que se de la reacción. Posteriormente, se descarga el contenido (productos de la reacción y los reactantes no convertidos). Por lo tanto, durante el tiempo de operación, propiamente dicho, no ingresa ni sale flujo de materia del reactor, y en consecuencia la masa total de la mezcla de reacción se mantiene constante. También es conocido como reactor tipo Batch, ver Figura 1.2.

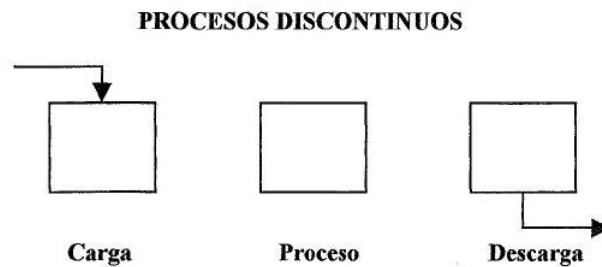


Figure 1.2: Operación de un reactor discontinuo

- reactor Continuo. Es un tipo de reactor en el cual mientras tiene lugar la reacción química al interior del mismo, ingresa y sale (se retiran los productos de la reacción) un flujo de material de forma continua durante todo el período de operación, ver Figura 1.3.

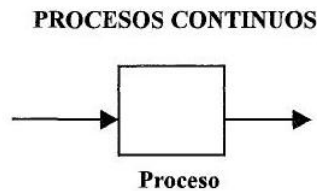


Figure 1.3: Operación de un reactor continuo

- reactor Semicontinuo. Es un tipo de reactor entre los dos tipos de reactores anteriores, consiste en introducir un reactivo de forma discontinua (todo de una vez), y añadir el segundo reactivo de forma continua durante el período de la reacción. En este caso, la masa total de la mezcla de reacción no se mantiene constante, ver Figura 1.4.

A continuación damos algunos aspectos adicionales de dos de los tipos de reactores descritos anteriormente.

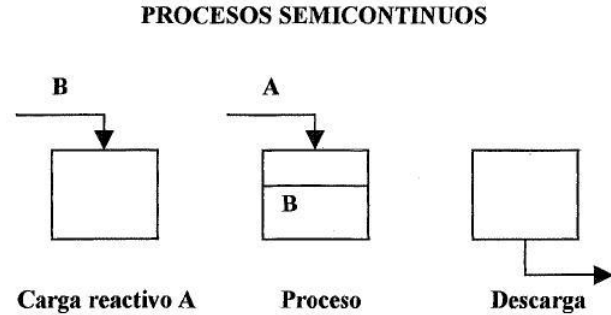


Figure 1.4: Operación de un reactor semicontinuo

Reactor secuencial por lotes

Un reactor secuencial por lotes, conocido usualmente por su sigla en inglés SBR (Sequential Batch reactor), es típicamente, un tanque el cual es llenado con micro-organismos biológicos capaces de degradar algún sustrato indeseable. El método consiste entonces en una secuencia de ciclos compuesto por tres fases, como se ilustra la Figura 1.5:

- Fase 1 : Llenar el reactor con agua ha ser tratada (La planta tratadora se encuentra a nivel mínimo de operación, el agua residual Q_{in} ingresa al reactor SBR por un tubo de entrada, este contiene sustrato s y se comienza a mezclar el contenido del reactor.
- Fase 2 : Esperar que la concentración indeseable de sustrato decrezca hasta una concentración dada (menor).
- Fase 3 : Vaciar el reactor desde el *limpiar* agua, dejando el lodo al interior.

En la próxima sección, describimos en detalle un tipo de reactor que será usado en esta tesis.

Modelación sobre biorreactores

Los modelos son las componentes clave de muchos algoritmos de control avanzados. La operación de los procesos, planificación, optimización y control de todos incluyen un modelo en forma explícita [67]. Recordemos que, un modelo es una representación matemática de un proceso físico, que trata de captar la relación entre las entradas y salidas para un sistema en estudio.

Los modelos Fundamentales , se basan en la física subyacente en el sistema y por lo general la estructura del modelo preferido para el desarrollo de las representaciones de proceso para el sistema de control

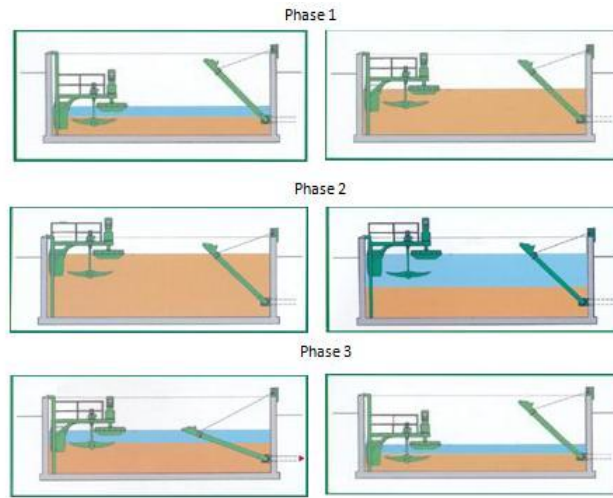


Figure 1.5: Fases de un típico proceso SBR

basado en el modelo [99] . Estos modelos se han desarrollado mediante la aplicación de los balances de materia y energía en los estados o las componentes y también pueden incluir una descripción de los procesos de flujo y transporte de fluidos que ocurren en el sistema. Un número de modelos fundamentales se han desarrollado para modelar procesos que van desde una sola célula [16], [49], [68], a uno dado que incluyen detalles acerca de la dinámica de sistema por el que se construyó el modelo. La descripción matemática fundamental puede dar lugar a un modelo con un gran número de ecuaciones y muchos parámetros que deben ser estimados. Muchos de estos parámetros se puede obtener experimentalmente o de los datos reportados previamente que están en la literatura .

En muchos casos, el sistema real puede ser complejo y los fenómenos subyacentes no son lo suficientemente bien entendidos para desarrollar un modelo fundamental. En este los modelos empíricos son útiles y los datos reales de la planta se utilizan para captar la relación entre las entradas y salidas del proceso utilizando un marco matemático tales como Redes Neuronales Artificiales [1], [6], [20], [72], [82], y los parámetros que describen el modelo son identificados mediante análisis de regresión de los datos del proceso, [54].

Se desarrollan modelos mixtos, mediante la combinación de los modelos fundamentales y empíricos, utilizando así los beneficios de ambos. Los modelos mixtos se han utilizado para modelar reactores de polimerización en el que los balances de masa conocidos para los reactivos se modelaron usando modelos fundamentales, en tanto que, las tasas desconocidas de las reacciones que tienen lugar son modelados usando modelos empíricos [5], [89] . En algunos casos también se han utilizado modelos mixtos para determinar los parámetros variables en el tiempo que modelan el comportamiento del

proceso no lineal [18]. Otro enfoque como se sugiere por [61], es utilizar un modelo fundamental para capturar la dinámica del proceso clave y luego utilizar un modelo empírico para capturar el error de modelado entre el modelo y la planta real.

Herramientas de la teoría de control pueden ser usados en conjunto con un modelo matemático para obtener perfiles de las variables del sistema para satisfacer un objetivo predefinido . Esto reduce el esfuerzo experimental, así como el tiempo requerido para optimizar el sistema , que se traduce en ahorros económicos .

El objeto central de un proceso biotecnológico es la célula. Una célula viva es un sistema muy complejo que se define a menudo como la unidad biológica autónoma más pequeña. Sus principales tareas son mantenerse con vida, reproducirse y administrarse.

Las propiedades de la autonomía de las células permite pensar en el cultivo de células disociadas fuera de su entorno natural. Dicha célula es encontrada en muchas aplicaciones en la industria de la biotecnología. De hecho, los cultivos de células de bacterias, levaduras o animales permite la síntesis de numerosos productos de interés la alimentación o el sector farmacéutico: vacunas, antibióticos, anticuerpos, vino, cerveza, alcoholes industriales, levaduras o enzimas para la tecnología de los alimentos. Sin embargo, estas aplicaciones requieren el uso de un biorreactor. De hecho, un sistema de este tipo favorece el crecimiento celular mediante la creación de un buen ambiente. Se monitoriza y controla las condiciones ambientales de células como las tasas de flujo de gas, la temperatura, el pH, el nivel de oxígeno disuelto y velocidad de agitación.

Un biorreactor típico consiste en los siguientes procesos de control: el pH es supervisado a través de una sonda de pH y controlado por la adición de ácido o base en el reactor, se controla la temperatura por termopar y gracias a un intercambiador de calor controlado, oxígeno disuelto se observa por una sonda la velocidad de agitación, el flujo de aire y la composición del gas. Además de estas consideraciones ambientales, estrategias de cultivo pueden ser utilizadas para controlar la disponibilidad de nutrientes.

Los distintos tipos de modelos de bioprocesos se distinguen de acuerdo a su interpretación biológica o su nivel de complejidad. Un modelo puede ser:

- (i) Lineal o no lineal: Un modelo lineal tiene que satisfacer el principio de superposición, es decir, cualquier combinación lineal de las entradas del modelo y las condiciones iniciales de estado corresponde con la misma combinación lineal de los estados o las salidas, si las funciones del sistema se pueden representar en su totalidad por las ecuaciones lineales, entonces el modelo es conocido como un modelo lineal. Si una o más de estas funciones se representan con una

ecuación no lineal, entonces el modelo es un no lineal. En realidad, muchos de los modelos para bioprocesos son no lineales.

- (ii) Estático o dinámico: Los modelos dinámicos son típicamente representados por expresiones matemáticas como ecuaciones diferenciales para describir la evolución dinámica de las variables de estado (como el crecimiento celular, el consumo de sustrato o la formación de producto).

Otras características para los modelos de bioprocesos. En primer lugar, un modelo puede ser estructurado o no estructurado, dependiendo de si se describen características intracelulares de la célula (reacciones metabólicas, procesos celulares, etc) se considera la célula como una entidad sin estructura interna. En segundo lugar, un modelo puede ser segregado o no segregado en función de si se considera o no la heterogeneidad de la población celular, la posición en el ciclo celular.

Se utilizan modelos estructurados para describir con más detalle la complejidad intrínseca del sistema. Como consecuencia de ello, por lo general presentan un alto número de ecuaciones con muchas variables de estado y parámetros a ser medidos e identificados; por esta razón, son particularmente difíciles de usar en herramientas de proceso como sensores de software o controladores. Sin embargo, son muy útiles para la comprensión del proceso. Por otro lado, los modelos no estructurados consideran sus subprocesos intracelulares, células vivas independientemente; se centran en el comportamiento del proceso y por lo general involucran sólo las señales más significativas (conocidas como especies macroscópicas, por ejemplo, sustratos, de biomasa y productos). Por lo tanto, sólo unos pocos estados se consideran lo que hace que el modelo más fácil de identificar y utilizar en los controladores y sensores de software.

En un modelo segregado, la heterogeneidad de la población es tomada en cuenta; un modelo de este tipo puede tomar en consideración el ciclo celular o distinguir diferentes estados celulares. En cuanto a modelos no segregados, suponen un medio de cultivo con una población celular homogénea. Una vez más, los modelos segregados requieren un mayor grado de complejidad, pero son más realistas que los no segregados que se centran más en el modelo de la simplicidad.

Un enfoque muy general para describir la dinámica de un bioproceso ha sido propuesta por Bastin y Dochain (1990). Consiste en el sistema de balance de masa para las especies macroscópicas involucradas en un esquema de reacción, tal esquema es un conjunto de reacciones irreversibles que describen los principales fenómenos que ocurren en el cultivo.

Los fenómenos de transporte de conjuntos de términos se divide en tres partes: el plazo de dilución, los caudales de alimentación externas y los ritmos de paso gaseosos.

La dilución corresponde al cociente de la velocidad de flujo de la fase líquida entrante por unidad de volumen. De acuerdo con la estrategia del cultivo considerado, la tasa de dilución variará.

Para un proceso por lotes, no se añade sustrato durante el cultivo, todos los sustratos están presentes desde el principio del cultivo en una cantidad suficiente con el fin de asegurar el crecimiento de células, el flujo de ingreso y salida, y la dilución son nulos.

El principal reto en modelización radica en la selección de una pseudo-estequiometría y una buena estructura del modelo. Una vez que se determina un pseudo-estequiometría, una estructura cinética del modelo tiene que ser elegido. La velocidad de reacción varía con el tiempo y por lo general se ve influida por muchos factores ambientales físicoquímicas y biológicas como sustrato, la biomasa y las concentraciones de productos, así como el pH, temperatura, concentración de oxígeno disuelto o varios inhibidores de crecimiento microbiano.

Los modelos cinéticos más utilizados son dados por las leyes de tipo Monod , que son expresiones racionales similares a las leyes descritas en la Tabla 2.1 (Birol et al., 1998; Cruz et al., 1999; Tsuneda et al., 2002; Ghaly et al., 2005). Estas estructuras cinéticas permiten reproducir diferentes comportamientos como las limitaciones de las componentes ($\lim_{\xi_i \rightarrow 0} \mu(\xi_i) = 0$), saturaciones ($\lim_{\xi_i \rightarrow \infty} \mu(\xi_i) = \text{constante}$), inhibiciones ($\lim_{\xi_i \rightarrow \infty} \mu(\xi_i) = 0$) así como las influencias de los factores ambientales (Bastin un Dochain , 1990) . Sin embargo , muchos modelos son capaces de reproducir los mismos comportamientos. Por ejemplo, las leyes de Monod o Ming (Tabla 2.1) son capaces de modelar la limitación por un sustrato , mientras que las leyes (Jerusaliwski y Engambervediev) del modelo Haldane tienen inhibición por un componente . Por otra parte, otras estructuras cinéticas son capaces de representar los mismos comportamientos , como la ley de Tessier cuyos modelos limitan las componentes, mientras que la ley de la Aiba et al. las inhibe. Esta profusión de leyes similares hace difícil la elección de un modelo de estructura cinética apropiada.

Tabla 2.1: Tasas de crecimiento específicas	
	estructura
Monod	$\mu(S) = \mu^* \frac{S}{K_M + S}$
Tessier	$\mu(S) = \mu^* (1 - e^{-\frac{S(t)}{K_M}})$
Ming	$\mu(S) = \mu^* \frac{S^2}{K_M + S^2}$
Aiba et al	$\mu(P) = \mu^* e^{-K_i P(t)}$
Haldane	$\mu(S) = \frac{\mu^* S(t)}{K_M + S(t) + \frac{S^2(t)}{K_I}}$
Jerusaliwski and Engambervediev	$\mu(P) = \mu^* \frac{K_I}{K_I + P}$

No existe ninguna regla sistemática a fin de determinar el mejor modelo. Por otra parte, la identificación de sus parámetros biológicos puede llevar mucho tiempo. De hecho, estas estructuras son no

lineales y, en la mayoría de los casos, no linealizables. Por lo tanto, no existe un método sistemático para determinar una primera estimación única de los diferentes parámetros, lo que haría más fácil la identificación.

Funciones de Crecimiento Microbiológico

Existen diversos tipos de funciones que gobiernan el crecimiento de especies biológicas, llamadas también Leyes de crecimiento (Cinética de crecimiento). Describimos, aquí dos tipos de funciones de crecimiento comúnmente usados: El modelo de saturación de sustrato (Ley Monod) y el modelo de inhibición del sustrato (Ley Haldane).

LEY DE CRECIMIENTO MONOD Y HALDANE

La Ley Monod [64], usa la cinética identificada por Michaëlis–Menten para cinéticas enzimáticas. Esta Ley de crecimiento en términos de la concentración de sustrato C_S (algunas veces denotado simplemente por S (en g/L) esta dada por la función

$$\mu(C_S) = \frac{\mu_{\max} C_S}{K_S + C_S}, \quad (1.1)$$

donde μ_{\max} indica la razón de crecimiento específico maximal, y K_S es la constante de semi-saturación o constante Monod, también denotada en la literatura por K_M , ver Figura 1.6.

La Ley Monod es capaz de explicar las dos fases principales del crecimiento de un microorganismo. A saber: a) Crecimiento ilimitado (exponencial), para valores altos del sustrato $S \gg K_M$, la razón de crecimiento es entonces constante igual a la razón de crecimiento maximal μ_{\max} ; seguido de, b) El crecimiento limitado (la fase de desaceleración del crecimiento de la concentración celular durante la dinámica del proceso de crecimiento), para valores pequeños del sustrato. En esta situación, la razón del crecimiento es aproximadamente proporcional al sustrato.

La ley Haldane [42], puede ser usada para representar un sustrato inhibiendo la razón de crecimiento a valores altos. El crecimiento inhibido del sustrato puede ser descrito por

$$\mu(s) = \mu_{\max} \frac{s}{K_S + s + \frac{s^2}{K_I}} \quad (1.2)$$

donde K_I es una constante de inhibición, y K_S es la afinidad conocida también como constante de saturación. Los valores de K_S nos expresan la relación de afinidad que tiene la biomasa y sustrato (mientras más pequeño sea el valor de K_S , mayor será la afinidad de la enzima por el sustrato). La cinética de crecimiento Monod es un caso especial de la cinética con inhibición del sustrato. Su ecuación

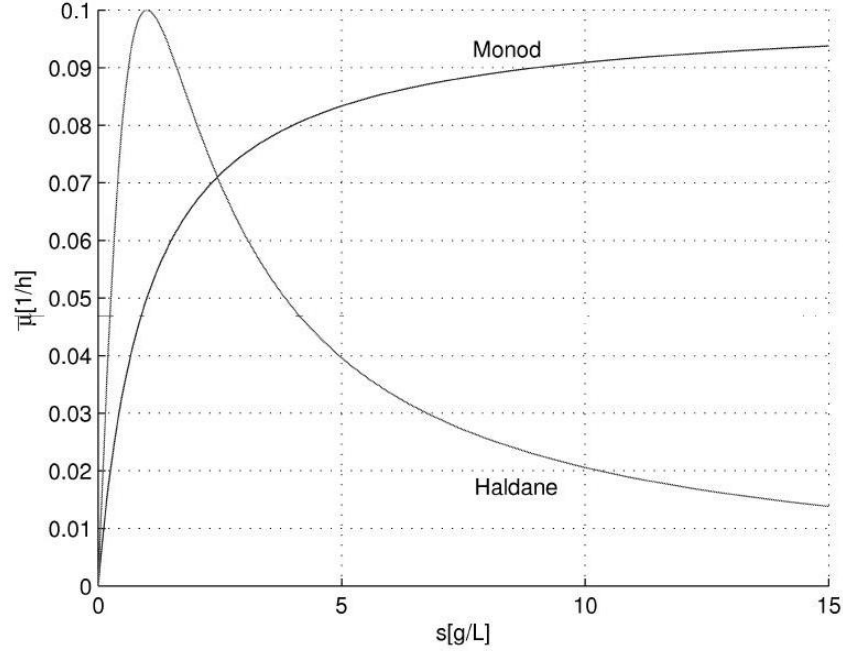


Figure 1.6: Razón de crecimiento específico μ como una función de la concentración del sustrato S

es derivada desde la ecuación (1.2) cuando el término inhibición en el denominador es descuidado, así cuando $K_I \rightarrow \infty$. La razón de crecimiento es inversamente proporcional a la razón de crecimiento a altas concentraciones. En la Figura 1.6, se muestra este tipo de función de crecimiento, junto con la Ley Monod.

1.2 Sistemas de Control

En esta sección introduciremos algunas nociones de la Teoría de control necesarias para la comprensión de los capítulos siguientes.

Como es conocido, en la teoría de ecuaciones diferenciales se estudian ecuaciones dependiendo de un parámetro tales como

$$\dot{x} = f(x, u), \quad x(0) = x_0, \quad (1.3)$$

donde el parámetro $u : [0, +\infty) \rightarrow U \subset \mathbb{R}^m$.

Los sistemas de control son ecuaciones diferenciales dadas en la forma (1.3) donde $x \in M$ representa

el estado físico del sistema sobre el espacio M , $f : M \times U \rightarrow M$ es una función regular en el sentido que existan las soluciones de (1.3), y $u(t) \in U \subset \mathbb{R}^m$ representa el ingreso desde el mundo exterior, llamado *control*. Aquí, el conjunto U es llamado conjunto de valores de los parametros de un control u .

Cuando el control u es fijado la ecuación $\dot{x} = f(x, u)$ define un sistema dinámico y, el sistema de control (1.3) puede ser visto como una familia de ecuaciones diferenciales parametrizadas por el control como parámetro.

En el contexto de la Teoría de control, la clase de sistemas de control afín permite modelar una amplia gama de aplicaciones provenientes de biorreactores, y en donde la variable de control juega un rol fundamental, [2], [35].

Definición 3. *El sistema de control (1.3) es llamado sistema de control afín si el tiene la forma*

$$\Gamma : \quad \dot{x}(t) = f_0(x(t)) + \sum_{i=1}^m u_i(t) f_i(x(t)) \quad (1.4)$$

donde $x(t) \in M$; $f_0, f_1, \dots, f_m : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, y $u : [0, +\infty) \rightarrow U$ dado por $t \mapsto u(t) = (u_1(t), \dots, u_m(t))$ tiene coordenadas u_i cada una de las cuales es una función medible; f_0 es usualmente llamado *drift*, mientras f_i para $i \geq 1$ son llamados *campos vectoriales de control* (*campos vectoriales controlados*).

Cuando $f_0 \equiv 0$ (es decir, el drift esta ausente) el sistema (1.4) es llamado “*sin drift*” o drift nulo. En general, no existe una expresión explicita para las trayectorias de (1.4). Sin embargo, una rica teoría matemática ha sido desarrollada para esta clase de sistemas.

Como será discutido posteriormente, la noción de corchete de Lie entre dos campos de vectores permite obtener un nuevo campo de vectores. Explicitamente,

Definición 4. *Sean $f_1, f_2 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ dos campos de vectores, llamamos corchete de Lie entre f_1 y f_2 , al campo de vectores denotado por $[f_1, f_2]$, y definido por*

$$[f_1, f_2](x) = Jf_1(x) \cdot f_2(x) - Jf_2(x) \cdot f_1(x),$$

donde $Jg(x)$ denota la matriz Jacobiana de la función g evaluada en el punto $x \in \mathbb{R}^n$.

Definición 5. *Para cualquier $T > 0$ y cualquier $x \in \mathbb{R}^n$, llamamos conjunto alcanzable desde el punto x en exactamente T unidades de tiempo vía las trayectorias del sistema Γ , al conjunto denotado por $\mathcal{A}_\Gamma(x, T)$ y definido por*

$$\mathcal{A}_\Gamma(x, T) = \{\varphi(T) : \varphi(\cdot) \text{ es una trayectoria de } \Gamma, \varphi(0) = x\}.$$

El conjunto alcanzable para tiempo no más grande que $T \geq 0$ esta definido como

$$\mathcal{A}_\Gamma(x, \leq T) = \bigcup_{0 \leq t \leq T} \mathcal{A}_\Gamma(x, t).$$

El conjunto alcanzable desde un punto $x \in \mathbb{R}^n$ vía las trayectorias de un sistema Γ , denotado por $\mathcal{A}_\Gamma(x)$, es el conjunto de todos los puntos terminales $\varphi(T)$, $\forall T \geq 0$, vía todas las trayectorias de Γ comenzando en x , es decir,

$$\mathcal{A}_\Gamma(x) = \bigcup_{T \geq 0} \mathcal{A}_\Gamma(x, \leq T).$$

Seguidamente presentamos algunos ejemplos para tener una mayor comprensión de los conceptos discutidos anteriormente.

Exemplo 6. Considere un automovil cuyo espacio de estados esta determinado su centro de masa $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ y ángulo de orientación θ perteneciendo a la circunferencia unitaria S^1 relativo a la dirección posición del eje x_1 , como se muestra en la Figura 1.7.

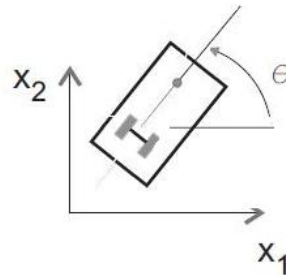


Figure 1.7: Estado de un automovil a parquear.

Entonces el espacio de estados esta constituido de puntos $q = (x, \theta)$ sobre $\mathbb{R}^2 \times S^1$.

Para determinar la dinámica que describe el movimiento del auto, consideremos dos tipos de movimiento: lineal y rotacional. Así, si suponemos que podemos movernos hacia adelante y hacia atrás con la misma velocidad lineal fijada $u_1 \in \mathbb{R}$, entonces la dinámica que describe el movimientos con velocidad lineal u_1 esta dada por el sistema

$$\dot{q} = u_1 f_1(q), \quad f_1(q) = (\cos \theta, \sin \theta, 0)^\top \quad [\text{movimiento lineal}] \quad (1.5)$$

Suponiendo también que podemos mover el automovil alrededor de su centro de masa con alguna velocidad angular fijada $u_2 \in \mathbb{R}$, la dinámica que describe la rotación con una velocidad angular u_2 esta dada por el sistema

$$\dot{q} = u_2 f_2(q), \quad f_2(q) = (0, 0, 1)^\top \quad [\text{movimiento rotacional}] \quad (1.6)$$

Por lo tanto, combinando ambos tipos de movimiento en una manera admisible, la dinámica que describe nuestro modelo esta regido de acuerdo con las ecuaciones (1.5) y (1.6). Podemos describir estas dos ecuaciones como un único sistema de control afin con drift nulo (sistema de control afin), en la forma

$$\dot{q} = u_1 f_1(q) + u_2 f_2(q), \quad q \in \mathbb{R}^2 \times S^1, u \in U \quad (1.7)$$

donde los campos vectorials f_1 y f_2 son dados por (1.5) y (1.6) como antes, $U \subset \mathbb{R}^2$ es el rango de valores del parametro de control $u = (u_1, u_2)$.

En la Figura 1.8, mostramos cuatro movimientos con la misma amplitud y se indica un movimiento prohibido. El campo vectorial f_1 genera el movimiento atras/adelante, y el campo vectorial f_2 genera

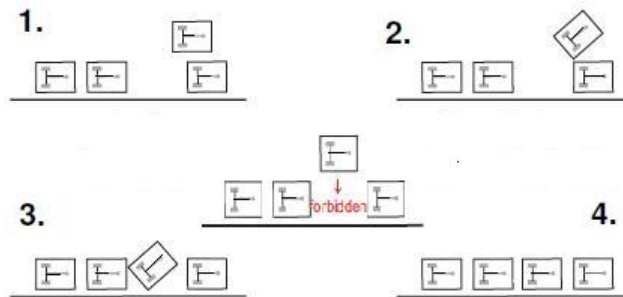


Figure 1.8: Maniobra típica para parqulear un automovil.

la rotación horaria/antihoraria, mientras el campo vectorial $[f_1, f_2](q) = (\sin \theta, -\cos \theta, 0)^\top$ dado por el corchete de Lie genera la dirección de movimiento en la dirección perpendicular a la orientación del automovil.

Note que bajo la dinámica (1.7) podemos llevar el automovil desde la posición inicial $(x_{1_0}, x_{2_0}, \theta_0)$, con ambas velocidades, a cualquier posición final $(x_{1_{end}}, x_{2_{end}}, \theta_{end})$, alternando movimientos lineales y rotaciones. Así, cualquier punto en $\mathbb{R}^2 \times S^1$ puede ser alcanzado por medio de trayectorias asociadas a los campos vectoriales f_1 y f_2 .

La siguiente definición será de mucha importancia a lo largo de nuestro trabajo,

Definición 7. Un algebra de Lie es un espacio vectorial \mathfrak{g} dotado con la aplicación bilineal $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ que satisface las siguientes propiedades:

1. Antisimetría: $[x, y] + [y, x] = 0$
2. Identidad de Jacobi: $[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$

Para campos de vectores diferenciables f y g definimos recursivamente:

$$(\text{ad}^0 f, g) = g, \text{ y } (\text{ad}^{k+1} f, g) = [f, (\text{ad}^k(f, g)).$$

Dado $p \in \mathbb{R}^n$ denotamos por $\mathcal{L}(p) = \text{span}\{f_0, f_1, \dots, f_m\}(p)$ el algebra de Lie generada por todos los corchetes de Lie de campos de vectores f_0, f_1, \dots, f_m en el punto p , correspondientes al sistema de control afín (1.4); y $\mathcal{L}_0(p) = \text{span}\{f_1, \dots, f_m\}(p)$. También denotado simplemente por \mathcal{L} y \mathcal{L}_0 , respectivamente.

Un criterio de accesibilidad para sistemas de control es dado en el siguiente teorema,

Teorema 8. Si el algebra de Lie del sistema de control (1.3) es de rango completo en p , es decir, $\dim \mathcal{L}(p) = n$, entonces el conjunto alcanzable desde p en tiempo a lo más T tiene interior no vacío. En este caso el sistema (1.3) es llamado accesible desde p .

Demostración: Ver [94] para detalles. □

El Teorema 9 establece una relación entre \mathcal{L}_0 y el conjunto accesible en tiempo T , via trayectorias del sistema.

Teorema 9. *Supongamos que el sistema (1.3) es diferenciable, entonces tenemos:*

- (a) *Si $\dim \mathcal{L}_0(x_0) = n$, entonces el conjunto alcanzable $\mathcal{A}_T(x_0)$ tiene interior no vacío para cualquier $T > 0$.*
- (b) *Si $\dim \mathcal{L}_0(x_0) < n$, entonces $\text{Int} \mathcal{A}_T(x_0) = \emptyset$ para cualquier $T > 0$.*

Exemplo 10. *Considere una nave espacial con dos pares de jets situado de tal manera que el momento angular es paralelo a los ejes principales de la nave, tal como se muestra en la Figura 1.9.*

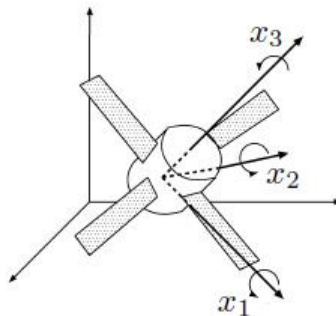


Figure 1.9: Una nave espacial con dos jets.

Las ecuaciones del movimiento toman la forma de un sistema de control afín con dos controles, dado por

$$\Gamma_1 : \quad \dot{x}(t) = f(x(t)) + u_1(t)g_1(x(t)) + u_2(t)g_2(x(t)).$$

donde

$$f = (a_1x_2x_3, a_2x_3x_1, a_3x_1x_2)^\top, \quad g_1 = (1, 0, 0)^\top, \quad y \quad g_2 = (0, 1, 0)^\top,$$

y $a_1 = (I_2 - I_3)/I_1$, $a_2 = (I_3 - I_1)/I_2$, y $a_3 = (I_1 - I_2)/I_3$ son constantes dadas en función de los momentos de inercia I_1, I_2 y I_3 .

Usando la definición de corchete de lie, y algunos calculos se puede verificar que

$$[f, g_1](x) = -(0, a_2x_3, a_3x_2)^\top, \quad [f, g_2](x) = -(a_1x_3, 0, a_3x_1)^\top, \quad [g_1, [g_2, f]](x) = (0, 0, a_3)^\top.$$

Así, asociado al sistema Γ_1 tenemos que

$$\mathcal{L}(x) = \text{span}\{f, [f, g_1], [f, g_2]\}(x), \quad y \quad \mathcal{L}_0(x) = \text{span}\{[f, g_1], [f, g_2], [g_1, [g_2, f]]\}(x).$$

Por lo tanto, $\dim \mathcal{L}_0(x) = 3$ si y solamente si $\dim \mathcal{L}(x) = 3, \forall x \in \mathbb{R}^3$, equivalentemente, $a_3 \neq 0$. Así por el Teorema 8 podemos concluir que el sistema Γ_1 es accesible si y solo si el momento de inercia de la nave espacial a lo largo de los ejes, con dos pares de jets, son diferentes. Esto es, $I_1 \neq I_2$ y $I_3 \neq 0$.

1.3 Controlabilidad

Controlabilidad es una propiedad básica de sistemas de control y representa un indicador de la habilidad de controlar. Iniciamos nuestro estudio con la siguiente

Definición 11. Decimos que el sistema de control (1.3) es controlable sobre \mathbb{R}^n , si para cualesquier dos puntos $p_1, p_2 \in \mathbb{R}^n$ existe un control $u(\cdot)$ y un tiempo $T > 0$ tal que la correspondiente solución del sistema de control, denotada por $\varphi(\cdot, u, p)$, permite dirigir el estado p_1 hacia el estado p_2 en T unidades de tiempo, esto es, $\varphi(T, p_1, u) = p_2$.

Algunas veces es útil conocer la noción de controlabilidad de un sistema, en términos de la noción de conjunto alcanzable. A saber,

Definición 12. Un sistema de control (1.3) (denotado también por Γ), se dice controlable si para cualesquiera par de puntos x_0 y x_1 sobre el espacio de estados \mathbb{R}^n , el punto x_1 puede ser alcanzado desde x_0 vía una trayectoria de Γ para tiempo no negativo, esto es,

$$x_1 \in \mathcal{A}_\Gamma(x_0), \quad \text{para cualquier } x_0, x_1 \in \mathbb{R}^n.$$

Ejemplo 13. Considere el sistema de control

$$\Gamma: \quad \dot{z} = f(z) + ug(z), \quad z = (x, y), \quad u \in \mathbb{R}$$

donde

$$f(z) = (0, x^2)^\top, \quad y \quad g(z) = (1, 0)^\top.$$

Se puede verificar que el conjunto alcanzable $\mathcal{A}_\Gamma(0, 0)$ está contenido en el conjunto $\{(x, y), y > 0\} \cup \{(0, 0)\}$. Por lo tanto, el sistema no es controlable.

1.4 Control Optimal

En esta sección describimos brevemente los elementos de la teoría de control optimal para la comprensión de los próximos capítulos. Esta teoría control optimal tiene importantes aplicaciones en ciencias e ingenierías, [65], [70].

El problema estándar de control optimal es descrito como sigue: dado cualesquiera par de puntos x_0, x_1 sobre el espacio de estados M , minimizar entre todos los controles admisibles $u = u(t)$, $t \in [t_0, T]$ el funcional de costo

$$J = \int_{t_0}^T L(x(t), u(t)) dt \tag{1.8}$$

para el cual la correspondiente solución $x(t) := \varphi(t, x_0, u)$ del problema de Cauchy asociado al sistema de control (1.3) satisface la condición de frontera $x(T) = x_1$. Aquí, el integrando $L : M \times U \rightarrow \mathbb{R}$, usualmente llamado Langrangiano o costo de ejecución satisface las mismas afirmaciones de regularidad que el lado derecho en (1.3). Usualmente, en esta tesis el espacio de estados M es un conjunto abierto de \mathbb{R}^n .

En otras palabras, el problema de control optimal estándar es dado por,

$$\left. \begin{array}{ll} \min_u & \int_{t_0}^T L(x(t), u(t)) dt \\ \text{sujeto a} & \dot{x} = f(x, u) \\ & x(t_0) = x_0, x(T) = x_1 \end{array} \right\} \quad (1.9)$$

para $x_0 \in M$, $x_1 \in M$ y $T > 0$ conocidos. El tiempo $T > 0$ esta fijado, sin embargo T en algunas situaciones es libre.

Existen diversos tipos de criterios de costo. A saber,

a) Tipo Bolzano:

$$J = \left(\int_{t_0}^T L(x(t), u(t)) dt \right) + K(x(T))$$

donde L es llamado costo de ejecución y la función continua $K : M \rightarrow \mathbb{R}$ es llamada costo final, el cual representa la penalidad para el estado final $x(T) = x_1$.

b) Tipo Lagrange:

$$J = \int_{t_0}^T L(x(t), u(t)) dt$$

No existe costo terminal.

c) Tipo Mayer: $J = K(x(T))$. No existe costo de ejecución.

Notemos que usualmente $(t_0, x(t_0))$ son conocidos inicialmente. Sin embargo, con respecto a la condición final $(T, x(T))$ usualmente uno o ambos puede ser libre o fijado, o necesita pertenecer a algún subconjunto \mathcal{S} del espacio $[t_0, +\infty) \times \mathbb{R}^n$. A saber, $(T, x(T))$ puede pertenecer a:

a) $\mathcal{S} = [t_0, +\infty) \times \{x_1\}$ con x_1 fijado. En este caso el problema optimal correspondiente es llamado punto final fijado, tiempo libre.

b) $\mathcal{S} = \{T\} \times \mathbb{R}^n$ con T fijado. El problema optimal asociado es llamado problema optimal con punto final libre, y tiempo final fijado.

Por lo tanto, existen múltiples versiones de problemas de control optimal dependiendo de: a) si el tiempo final esta fijado o no (si el tiempo T es libre, minimizar entre todos los caminos que alcanza el punto x_1 en algún tiempo final T); b) Ningún punto final es especificado, en este caso en lugar de x_1 conocemos un subconjunto $\mathcal{T} \subset M$ al cual debe pertenecer el punto final $x(T)$; c) con costo final, esto es, la posición final es penalizada por un término $K(x(T))$.

PROBLEMA DE TIEMPO-OPTIMAL

Dado un par de puntos $x_0 \in M$, $x_1 \in \mathcal{A}_\Gamma(x_0, \leq T)$, el problema de tiempo-optimal consiste en minimizar el tiempo de movimiento desde x_0 hacia x_1 a través de controles admisibles del sistema de control (1.3), esto es,

$$\min \left(\int_0^T dt = T \right).$$

sujeto a: $\dot{x} = f(x, u)$, $x \in \mathbb{R}^n$, $u \in U$,

$$x(0) = x_0, \quad x(T) = x_1, \quad \text{fijados,}$$

Recordemos que un control u^* minimiza el funcional de costo si

$$J(u^*(\cdot), t_0, x_0) \leq J(u(\cdot), t_0, x_0), \quad \forall u(\cdot) \in U$$

cuando tal control $u^*(\cdot)$ existe, es llamado control optimal, y la correspondiente trayectoria es llamada trayectoria optimal. Ahora, si u^* maximiza el funcional de costo J , entonces

$$J(u^*(\cdot), t_0, x_0) \geq J(u(\cdot), t_0, x_0), \quad \forall u(\cdot) \in U,$$

y en éste caso J es llamado funcional de réditos.

La existencia de trayectorias optimales depende de la regularidad del sistema de control (1.3) y el funcional de costo J . Para analizar la existencia de controles optimales tenemos el siguiente clásico resultado

Teorema 14 (Filippov). *Considere el sistema de control (1.3) con parámetros de control $u(t)$ sobre el conjunto $U \subset \mathbb{R}^m$ compacto. Supongamos que existe un subconjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^n$ tal que $f(x, u) = 0$ para $x \notin K$, $u \in U$. Más aún, suponga que el conjunto de velocidades*

$$f(x, U) := \{f(x, u) \mid u \in U\}, \quad x \in \mathbb{R}^n,$$

es convexo. Entonces los conjuntos alcanzables $\mathcal{A}_T(x_0)$ y $\mathcal{A}_{\leq T}(x_0)$ son compactos para cualquier $T > 0$ y condición inicial x_0 en \mathbb{R}^n .

Demostración: Ver [50] para detalles. □

La existencia del control en problemas de tiempo–optimal es dado por el siguiente

Corolario 15. *Bajo las hipótesis del Teorema 14, para cualesquiera puntos $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $x_1 \in \mathcal{A}(x_0)$ el problema de tiempo–optimal tiene una solución.*

Principio del Máximo de Pontryagin (PMP)

La teoría de control optimal ha emergido con la formulación del bien conocido Principio del Máximo de Pontryagin (PMP), el cual constituye una condición necesaria de primer orden, para el análisis de la optimalidad de problemas de control optimal. Ver [78]. Antes de establecer el PMP, primero introducimos algunos elementos de la teoría de control.

Definición 16. *Llamamos Hamiltoniano asociado al problema de control optimal (1.9) sobre el espacio de estados \mathbb{R}^n , a la función*

$$\mathcal{H}^{p_0} : T^*(\mathbb{R}^n) \times U \longrightarrow \mathbb{R}$$

dependiente de un parámetro $p_0 \leq 0$, definido por la fórmula

$$\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t)) = p_0 L(x(t), u(t)) + \xi(t)(f(x(t), u(t))), \quad (1.10)$$

para todo $\xi(t) = (x(t), p(t)) \in T^(\mathbb{R}^n) = \mathbb{R}^n \times (\mathbb{R}^n)^*$, donde $(\mathbb{R}^n)^*$ denota el espacio dual de \mathbb{R}^n .*

La función vectorial absolutamente continua $\xi(t) = (x(t), p(t))$ es también llamada campo de covectores no nulo a lo largo de la trayectoria $x(t)$.

Observación 17. *Puesto que $p(t)$ es un elemento de $(\mathbb{R}^n)^*$ podemos escribir $p(t)$ como un vector fila sobre \mathbb{R}^n . De aquí, $\xi(t)(f(x(t), u(t))) = \langle p(t), f(x(t), u(t)) \rangle$, con $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denotando el producto interno estándar sobre \mathbb{R}^n . También, la función Hamiltoniana \mathcal{H}^{p_0} determina un único campo vectorial el cual es denotado usualmente por \vec{H}^{p_0} .*

Para el problema de tiempo–optimal el Hamiltoniano es dado por

$$\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t)) = p_0 + \langle p(t), f(x(t), u(t)) \rangle, \quad p(t) \in (\mathbb{R}^n)^*, \quad u \in U.$$

Ahora, podemos establecer el PMP. A saber,

Teorema 18 (PMP). (*Principio del Máximo de Pontryagin*). *Suponga que la función de control $u^* : [0, T] \rightarrow U \subseteq \mathbb{R}^m$ es un control optimal admisible para (1.9), y sea $x^* : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ la correspondiente solución generada por u^* sobre el intervalo $[0, T] \subset \mathbb{R}$ el cual transfiere $x(0)$ hacia $x(T)$. Entonces existe una constante $p_0 \leq 0$ y una función vectorial absolutamente continua $\xi : [0, T] \rightarrow T^*(\mathbb{R}^n)$, $t \mapsto \xi(t) = (x(t), p(t))$ con $(p_0, p(t)) \neq (0, 0)$, la cual es una curva integral del campo vectorial Hamiltoniano $\vec{H}^{p_0}(\cdot, u)$ definido sobre el intervalo $[0, T]$ tal que satisface las siguientes condiciones:*

(i) $x(t)$ es la proyección de $\xi(t)$ para todo $t \in [0, T]$. Además $\xi(t)$ no es idénticamente nula para todo t sobre $[0, T]$ cuando $p_0 = 0$.

(ii)

$$\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u^*(t)) = \sup_{u(t) \in U \subseteq \mathbb{R}^m} \mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t)), \quad (1.11)$$

para casi todo t sobre $[0, T]$.

(iii) La función $t \mapsto \mathcal{M}^{p_0}(\xi(t)) := \sup_{u(t) \in U \subseteq \mathbb{R}^m} \mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t))$ es constante para casi todo t en $[0, T]$.

Más aún, si el tiempo final T es libre entonces $\mathcal{M}^{p_0}(\xi(t)) = 0$.

Además, $p(t)$ satisface la siguiente ecuación:

$$\dot{p}(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}^{p_0}}{\partial x}(x^*(t), p(t), u^*(t)), \quad (\text{ecuación adjunta}) \quad (1.12)$$

para casi todo $t \in [0, T]$.

Definición 19. El Hamiltoniano correspondiente a la curva integral $\xi(t) = (g(t), p(t))$ del campo vectorial $\vec{H}^{p_0}(\xi, u)$ definido por

$$\mathcal{M}^{p_0}(x(t), p(t)) = \sup_{u(t) \in U} \mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t))$$

es llamado Hamiltoniano maximal.

Observación 20. Si en el problema de control optimal (1.9), consideramos condiciones de frontera más generales para una trayectoria $x(t)$, digamos:

$$x(0) \in N_0, \quad x(T) \in N_1,$$

con $N_0, N_1 \subset M$, entonces un control optimal u^* satisface todas las condiciones del PMP, y adicionalmente tenemos $(\dim N_0 + \dim N_1)$ condiciones extras para el punto inicial y terminal. A saber: el covector adjunto $p(t)$ debe ser ortogonal a N_0 en $x(0)$ y ortogonal a N_1 en $x(T)$ en los instantes de tiempo 0 y T , respectivamente; esto es,

$$\begin{aligned} p(0) \perp T_{x(0)}N_0 &\Leftrightarrow \langle p(0), T_{x_0}N_0 \rangle = 0, \\ p(T) \perp T_{x(T)}N_1 &\Leftrightarrow \langle p(T), T_{x_1}N_1 \rangle = 0. \end{aligned}$$

donde $T_x N$ denota el espacio tangente a N en el punto $x \in N$. Estas condiciones son llamadas condiciones de transversalidad. En el caso que $x(T)$ no se encuentre restringido tenemos que $p(T) = 0$, la cual es en este caso la condición de transversalidad.

El ítem (iii) del PMP establece que, si $(x(t), p(t), u(t))$ es un triple para el problema de control optimal (1.9) entonces

$$\mathcal{H}^{p_0}(x(t), p(t), u(t)) = \text{const}, \quad t \in [0, T], \quad (1.13)$$

esto es, $\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t))$ es constante a lo largo de la trayectoria optimal y esta constante es igual a cero si T no está fijado.

Notemos que si $u(t)$ yace en el interior de U entonces $\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t))$ alcanza su máximo si y solamente si

$$\frac{\partial \mathcal{H}^{p_0}}{\partial u}(\xi^*(t), u^*(t)) = 0. \quad (1.14)$$

Observación 21. En problemas de control optimal, para el cual estemos considerando un funcional del tipo Bolzano, se cumple que $p(T) = \frac{\partial K}{\partial x}(x^*(T))$, adicionalmente a las condiciones (i)–(iii) del PMP.

No damos aquí una prueba del (PMP), pero el lector interesado puede consultar [2], [78], y referencias inherentes. En términos generales el (PMP) establece que si existe un control optimal el mismo esta asociado a curvas extremales del problema de control optimal. En orden a clarificar su formulación discutimos a seguir algunos aspectos importantes relacionados a dicho principio de optimalidad.

Definición 22. Una curva absolutamente continua $\xi(t)$ es llamada curva extremal si existe un control u^* definido sobre $[0, T]$ tal que $\xi(t)$ es una curva integral de $\vec{H}^{p_0}(\cdot, u^*)$ el cual satisface (i), (ii) y (iii) del Teorema 18. Dependiendo del parámetro constante p_0 tenemos los siguientes tipos de extremales:

- (a) Si $p_0 \neq 0$, entonces $\xi = (x^*(t), p(t))$ es llamada curva **extremal normal** o **regular** y $x^*(t)$ trayectoria extremal normal. Puesto que el par (p_0, ξ) puede ser multiplicado por cualquier número positivo, podemos siempre normalizar $p_0 < 0$, precisamente asumiremos aquí que $p_0 = -1$ en el caso normal;
- (b) Si $p_0 = 0$, entonces $\xi = (x^*(t), p(t))$ es llamada curva **extremal abnormal** y x^* trayectoria extremal abnormal.

Observación 23. Notemos que la definición de extremal abnormal no depende del costo (1.8) depende únicamente de la dinámica. De hecho, si $p_0 = 0$ entonces el costo desaparece en (1.10).

A partir del Hamiltoniano asociado al problema de control optimal (1.9) es posible definir las función

$$\psi(t) = p(t) (f(x(t), u(t)))$$

Como es conocido, el PMP no da ninguna información con respecto al control optimal en el caso que ψ sea nula. En este caso, si $\psi(t) = 0$ en algún intervalo de tiempo, decimos que la trayectoria extremal contiene un arco singular. Así, si $[t_1, t_2]$ es un intervalo de tiempo donde la trayectoria optimal contiene un arco singular, tenemos

$$\psi(t) = 0, \text{ para todo } t \in [t_1, t_2] \tag{1.15}$$

El control correspondiente a un arco singular es llamado *control singular*.

Note también que, la aplicación del PMP a problemas de control optimal (1.9) deja dos tipos de controles, llamados: control singular y control bang–bang. La diferencia depende del hecho un control singular pertenece al interior de U mientras que un control bang–bang toma valores sobre la frontera del rango de control U .

Exemplo 24. Consideremos el problema de control optimal sobre \mathbb{R}^2 dado por,

$$\left. \begin{aligned} \min J = & \min_u \int_{t_0}^T L(x(t), u(t)) dt \\ \text{sujeto a:} & \\ \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} + u(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ & (x(t_0), y(t_0)) = (0, 1), \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

donde el funcional de costo de ejecución esta dado por

$$J((x_0, y_0), u(\cdot)) := x(T) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^T u^2(t) dt,$$

con el tiempo $T > 0$ fijado.

Supongamos que $u^*(t)$ es un control optimal. La función Hamiltoniana correspondiente es dada por

$$\mathcal{H}^{p_0}(\xi(t), u(t)) = \frac{1}{2} p_0 u^2(t) + p_1(t) x_2(t) + p_2(t) u(t), \quad p_0 \geq 0, p(t) \in (\mathbb{R}^2)^*, \quad u \in U.$$

Ahora, como $u^*(t)$ es un control optimal entonces desde el PMP la ecuación adjunta (1.12) deja el sistema adjunto

$$\begin{cases} \dot{p}_1^*(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}^{p_0}}{\partial x}(z^*(t), p^*(t), u^*(t)) = 0 \\ \dot{p}_2^*(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}^{p_0}}{\partial y}(z^*(t), p^*(t), u^*(t)) = p_1^*(t) \end{cases}$$

sujeto a $p(T) = (p_1(T), p_2(T)) = (1, 0)$, puesto que estamos considerando un funcional del tipo Bolzano.

De aquí, obtenemos $p_1(t) = 1$ and $p_2(t) = (T - t)$. Por otro lado, $\frac{\partial \mathcal{H}^{p_0}}{\partial u}(z^*(t), p^*(t), u^*(t)) = u^*(t) + p_2(t) = 0$. Entonces, $u^*(t) = -p_2(t) = t - T$.

Método de Green

El método de Green, introducido por Miele [62], es un método alternativo al principio del máximo de Pontryagin de la Teoría de Control Óptimo [55], [79], que permite el estudio de problemas de control optimal sobre el plano.

Consideramos el sistema bidimensional de la forma

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= A_1(x(t)) + B_1(x(t)) u(t), \\ \dot{x}_2(t) &= A_2(x(t)) + B_2(x(t)) u(t), x(0) = x^0, \end{aligned} \quad (1.17)$$

donde $x = (x_1, x_2)$, mientras que u es un control medible a valores escalares con $|u(t)| \leq 1$. Las funciones $A_i, B_i, i = 1, 2$, son continuamente diferenciables en el plano. Una solución asociado al control u será denota por $\varphi(t, u, x^0)$.

El problema de control optimal es dado como sigue: minimizar el funcional de costo

$$\int_0^{t_f} L(\varphi(\tau; u, x_0)) d\tau,$$

sujeto a la dinámica (1.17), donde t_f (en realidad, $t_f(u)$) es un valor pequeño no negativo de t tal que $\varphi(t_f; u, x_0) = x^f$ y x^f es un estado final llamado objetivo. Aquí, L se supone que es una función continuamente diferenciable de valor real. De particular interés es el caso $L \equiv 1$, en el cual el estudio se reduce al problema de tiempo óptimal.

Definamos los conjuntos:

$$R(x^0) = \{x \in E^2 : x = \varphi(t, u, x^0), t \in [0, \infty), u \text{ admisible}\}$$

y

$$R(x^f) = \{x \in E^2 : x = \varphi(-t, u, x^f), t \in [0, \infty), u \text{ admisible}\}$$

donde $\varphi(-t, u, x^f)$ denota una solución de

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= -A_1(x(t)) - B_1(x(t))u(t), \\ \dot{x}_2(t) &= -A_2(x(t)) - B_2(x(t))u(t), x(0) = x^f. \end{aligned}$$

En palabras, $R(x^0)$ es el conjunto de puntos que se pueden alcanzar a partir de x^0 , mientras que $R(x^f)$ es el conjunto de puntos desde los que se puede alcanzar x^f .

Obviamente, si existe una solución para el problema de control óptimo para (1.17) tenemos que existe un arco de la trayectoria que conecta x^0 con x^f y debe estar en $R(x^0) \cap R(x^f)$. Además, si $R(x^0) \cap R(x^f) \neq \phi$, habrá un control admisible u con una trayectoria del sistema correspondiente x^0 y x^f .

Usualmente, es importante tener un método constructivo para determinar $R(x^0) \cap R(x^f)$. Notemos que, el conjunto formado por las trayectorias $\varphi(t, 1, x^0)$, $\varphi(t, -1, x^0)$, $\varphi(-t, 1, x^f)$, y $\varphi(-t, -1, x^f)$ constituyen el borde.

Sea $y \in E^2$, $|\alpha| \leq 1$, y definamos el vector

$$\xi(\alpha, y) = (A_1(y) + \alpha B_1(y), A_2(y) + \alpha B_2(y))$$

El conjunto de posibles direcciones con una solución de (1.17) puede asumir en el punto y que está dado por $\{\xi(\alpha, y) : |\alpha| \leq 1\}$

Sea

$$\Delta(y) = -B_2(y) A_1(y) + A_2(y) B_1(y). \tag{1.18}$$

Observe que $\Delta(y) \neq 0$ implica que y no es un punto solución de (1.17) para cualquier control admisible. Definimos $\theta(\alpha, y)$ como el ángulo trazado por $\xi(\sigma, y)$ con σ variando continuamente desde -1 a α . El ángulo se denomina positivo si se traza en un sentido contrario al sentido de las agujas del reloj y negativo si es en sentido de las agujas del reloj.

Exemplo 25. Considere el sistema

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1 + x_2 u, & |u(t)| &\leq 1, \\ \dot{x}_2 &= x_2 + x_1 u, & x^0 &= (2, 0), \quad x^f = (1, 0). \end{aligned}$$

Entonces las soluciones asociadas al control $u = 1$ y $u = -1$ son dadas por (ver Figura 1.10):

$$\begin{aligned} \varphi(t; 1, x^0) &= \begin{cases} e^{2t} + 1, \\ e^{2t} - 1, \end{cases} & \varphi(t; -1, x^0) &= \begin{cases} e^{2t} + 1, \\ 1 - e^{2t}, \end{cases} \\ \varphi(-t; 1, x^f) &= \begin{cases} \frac{1}{2}(e^{-2t} + 1), \\ \frac{1}{2}(e^{-2t} - 1), \end{cases} & \varphi(-t; -1, x^f) &= \begin{cases} \frac{1}{2}(e^{-2t} + 1), \\ \frac{1}{2}(1 - e^{-2t}), \end{cases} \end{aligned}$$

mientras $\Delta(x) = x_2^2 - x_1^2$.

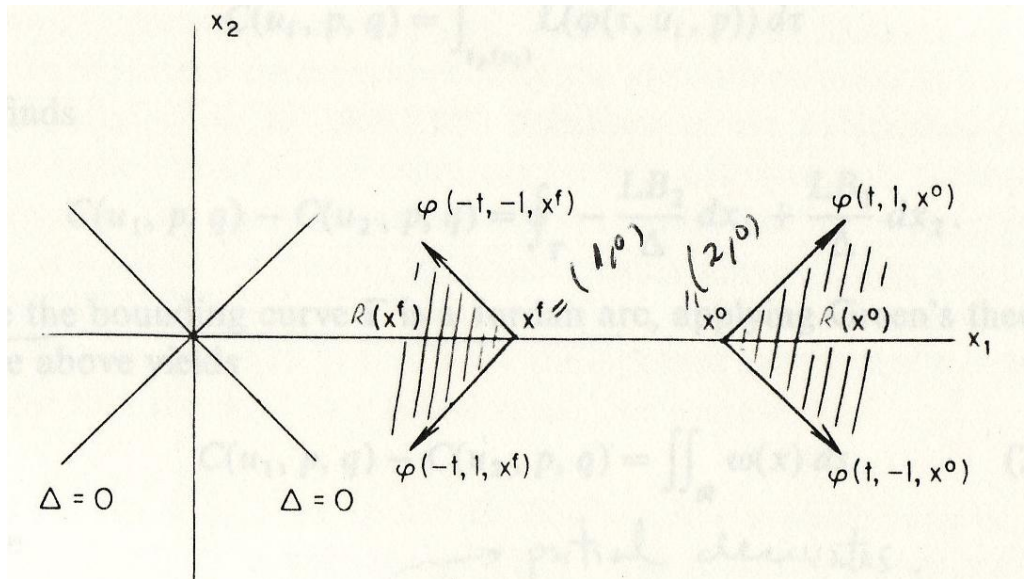


Figure 1.10:

Sea $\Delta(x) \neq 0$ para $x \in R(x^0) \cap R(x^f)$. Notemos que $\{\varphi(t, u, p) : t_p(u) \leq t \leq t_q(u)\}$ es un arco de una trayectoria admisible para (1.17) que conecta dos puntos p y q en $R(x^0) \cap R(x^f)$; es decir, $\varphi(t_p, u, p) = p$, mientras que $\varphi(t_q, u, p) = q$. El funcional costo puede ser expresado como una integral

de línea a lo largo de este arco multiplicando la primera ecuación de la fórmula (1.17) por $-L(x)B_2(x)$, la segunda por $L(x)B_1(x)$, sumando y dividiendo por $\Delta(x)$ para obtener

$$\int_{t_p}^{t_q} L(\varphi(\tau, u, p)) d\tau = \int_p^q -\frac{LB_2}{\Delta} dx_1 + \frac{LB_1}{\Delta} dx_2,$$

donde se toma la integral de línea a lo largo del arco de $\varphi(t, u, p)$ juntando p a q .

Supongamos ahora que $\varphi(t, u_1, p)$ y $\varphi(t, u_2, p)$ son dos soluciones diferentes de (1.17), cada uno una p con q en $R(x^0) \cap R(x^f)$ al no tener puntos comunes distintos de p y q . Sea Γ la curva cerrada formada por estos arcos de trayectoria. Supongamos que atravesamos Γ en un sentido contrario a las agujas del reloj siguiendo primero el arco de $\varphi(t, u_1, p)$ de p a q y el siguiente arco de $\varphi(t, u_2, p)$ de q a p . Denotando

$$C(u_i, p, q) = \int_{t_p(u_i)}^{t_q(u_i)} L(\varphi(\tau, u_i, p)) d\tau$$

tenemos que

$$C(u_1, p, q) - C(u_2, p, q) = \oint_{\Gamma} -\frac{LB_2}{\Delta} dx_1 + \frac{LB_1}{\Delta} dx_2$$

como la curva límite Γ es una curva de Jordan, aplicando el teorema de Green's resulta

$$C(u_1, p, q) - C(u_2, p, q) = \iint_{\mathfrak{R}} \omega(x) ds, \quad (1.19)$$

donde

$$\omega(x) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{LB_1}{\Delta} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{LB_2}{\Delta} \right)$$

y \mathfrak{R} es la región encerrada por Γ .

Exemplo 26. Considere el problema de control

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= 1 + x_2 u, & x^0 &= (0, 2), & |u(t)| &\leq 1, \\ \dot{x}_2 &= x_2 - u, & x^f &= (0, 3), \end{aligned}$$

sujeto a minimizar $\int_0^{t_f} 1 d\tau$. Notemos que

$$\begin{aligned} \Delta(x) &\equiv 1 + x_2^2 \\ \omega(x) &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{x_2}{1 + x_2^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{-1}{1 + x_2^2} \right) = \frac{2x_2}{(1 + x_2^2)^2} \end{aligned}$$

Sea C_1 cualquier arco que une x^0 con x^f en $R(x^0) \cap R(x^f)$ y C_2 sea el arco formado por las trayectorias $\varphi(t; -1, x^0)$ y $\varphi(-t; 1, x^f)$, como se muestra en la Figura (1.11).

Puesto que $\omega(x) > 0$ en $R(x^0) \cap R(x^f)$ uno encuentra que el costo a lo largo de la curva C_1 menos el costo a lo largo de C_2 es positivo; es decir, la curva C_2 es mejor que C_1 . Esto es cierto para cualquier trayectoria admisible de C_1 ; es decir, C_2 es el arco óptimal.

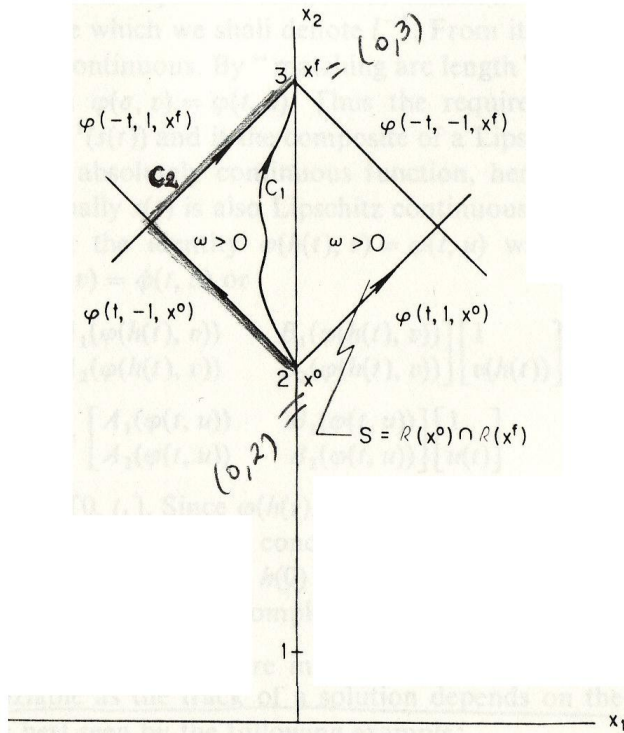


Figure 1.11:

En enfoque del teorema de Green's, está motivado por la consideración de dos caminos que son soluciones admisibles de las ecuaciones diferenciales y unen dos puntos dados p y q y tienen sólo estos puntos en común. Consiste en la comparación de la optimalidad relativa de trayectorias sin calcular explícitamente las soluciones óptimas. En concreto, se utiliza (1.19) para obtener un arco óptimo en $R(x^0) \cap R(x^f)$.

Exemplo 27. Considere el problema de minimizar $\int_0^{t_f} L(x(\tau)) d\tau$, donde

$$L(x) = x_1 + bx_2 - 2b \ln(x_1 + x_2),$$

sujeto a

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= x_1(t) + x_2(t) u(t), \\ \dot{x}_2(t) &= x_2(t) + x_1(t) u(t) \end{aligned} \tag{1.20}$$

con $x^0 = (1, 0)$ y $x^f = (3, 0)$ y $|u(t)| \leq 1$.

Notemos que,

$$\omega(x) = \frac{-x_2 - bx_1 + 2b}{x_1^2 - x_2^2},$$

mientras $\Delta(x) = x_2^2 - x_1^2$, y la región $R(x^0) \cap R(x^f)$ esta representada como se muestra en la Figura 1.12. Considere primero $-1 \leq b \leq 1$, en este caso $\omega = 0$. Por comparación se tiene que la trayectoria

óptima es dada como se muestra en la Figura 1.12. Si $|b| < 1$, entonces $|u(t)| < 1$ a lo largo de la trayectoria con $\{x : \omega(x) = 0\}$. Si $b = 1$, este arco es realizado con el control u satisfaciendo $|u(t)| = 1$. Si $|b| > 1$, entonces no existe un control, satisfaciendo $|u(t)| \leq 1$, lo que conduce a una trayectoria que tiene una coincidencia sobre $\{x : \omega(x) = 0\}$. Este es el caso en el que los ceros de ω son tales que el arco óptimo no es realizable como la trayectoria de una solución admisible y el método no permite concluir nada.

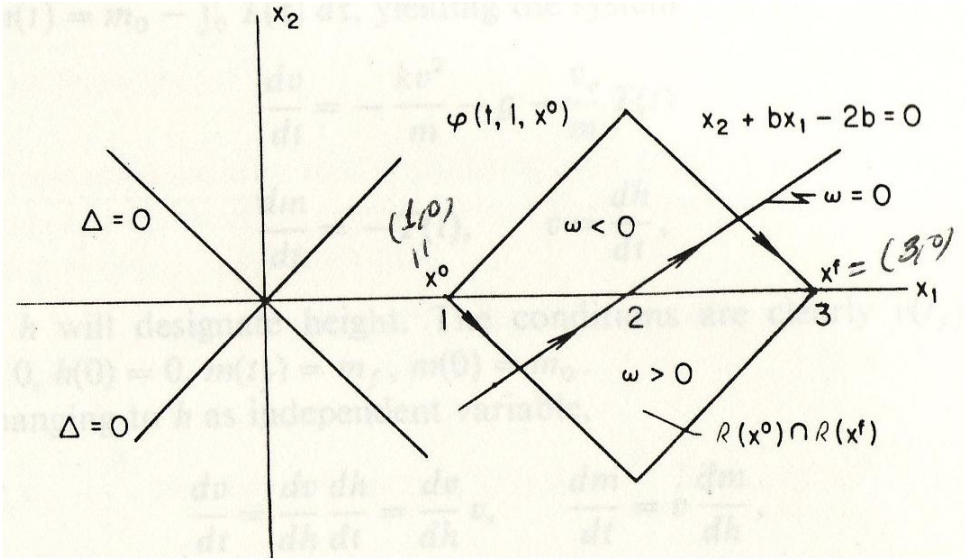


Figure 1.12:

1.5 Elementos de la Teoría de Estabilidad

Se sabe que para ecuaciones diferenciales lineales, no presentan mayor dificultad en su estudio, lo que no ocurre para ecuaciones diferenciales no lineales, pues no siempre se encuentra soluciones explícitas, i.e. se abandona toda pretensión de resolver las ecuaciones diferenciales en sentido tradicional y uno se concentra, en vez de eso, en obtener información cualitativa sobre el comportamiento general de las soluciones. De hecho, muchos sistemas físicos, y las ecuaciones que la describen, son no lineales por la propia naturaleza del fenómeno en cuestión. La teoría cualitativa de las ecuaciones diferenciales fue iniciada por Poincaré hacia 1880, en relación con sus trabajos en mecánica celeste, y desde entonces ha merecido interés creciente en matemática pura y aplicada.

La teoría de ecuaciones diferenciales lineales ha sido objeto de profundos estudios a lo largo de los últimos 200 años y es un campo muy bien conocido ya y muy completo. por el contrario, no se sabe casi nada del carácter general acerca de las ecuaciones diferenciales no lineales.

Para un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales es importante averiguar acerca de su estabilidad, pues ésta representa un estado que perdura en el tiempo. En esta sección, recordamos algunos elementos provenientes de la teoría de estabilidad, y métodos para el estudio de sistemas no lineales, los cuales serán de utilidad a lo largo de nuestro trabajo, [7]. Lyapunov y Poincaré, convirtieron la no linealidad en un objeto de estudio y aportaron métodos y conceptos fundamentales en el estudio de las ecuaciones diferenciales no lineales.

Consideremos el sistema

$$\dot{x} = f(x), \quad x(0) = y_0, \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (1.21)$$

donde f es continua sobre \mathbb{R}^n , e $y_0 \in \mathbb{R}^n$ es una condición inicial.

Denotamos por \mathcal{S}_{y_0} el conjunto de todas las soluciones $x = \phi(t; y_0)$ del sistema (1.21) pasando por el punto y_0 .

Definición 28. Sea E un subconjunto abierto de \mathbb{R}^n y sea $f \in C^1(E)$. Para $y_0 \in E$, sea $\phi(t, y_0)$ la solución de (1.21) definido sobre su intervalo maximal $I(y_0)$. Entonces para todo $t \in I(y_0)$ el conjunto de aplicaciones $\phi_t : E \rightarrow E$ definido por

$$\phi_t(y_0) = \phi(t, y_0)$$

es llamado flujo de (1.21), también definido como el flujo del campo vectorial $f(x)$.

Definición 29. Un punto $z_0 \in \mathbb{R}^n$ es llamado un punto de equilibrio o punto crítico de (1.21) si $f(z_0) = 0$. Un punto de equilibrio z_0 es llamado un punto de equilibrio hiperbólico de (1.21) si ninguno de los autovalores de la matriz $Df(z_0)$ tiene parte real cero. El sistema lineal con la matriz $A = Df(z_0)$ es llamado la linealización de (1.21) en z_0 .

El matemático e ingeniero ruso A. M. Liapunov, en su tesis doctoral de 1882, estableció criterios para analizar la estabilidad de sistemas.

Definición 30. Sean f e $V : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ funciones de clase C^1 sobre \mathbb{R}^n y ϕ_t el flujo de (1.21), para $x \in \mathbb{R}^n$ la derivada de la función $V(x)$ a lo largo de la solución $\phi_t(x)$ es dada por

$$\dot{V}(x) = \left. \frac{d}{dt} V(\phi_t(x)) \right|_{t=0} = DV(x)f(x)$$

Si $V(x)$ es negativa en \mathbb{R}^n entonces $V(x)$ decrece a lo largo de la solución $\phi_t(y_0)$ que pasa por $y_0 \in \mathbb{R}^n$ en $t = 0$. Además, sobre \mathbb{R}^2 , si $\dot{V}(x) \leq 0$ con igualdad en $x = 0$ tenemos que para un pequeño c , la familia de curvas $V(x) = c$ constituye una familia de curvas cerradas, encerrando el origen y las trayectorias de (1.21) cruzan esta curva desde el exterior a su interior con creciente t .

A continuación establecemos la noción de estabilidad,

Definición 31. Decimos que el origen es estable en el sentido de Lyapunov para el sistema (1.21) si para cada $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que para cada x_0 con $\|x_0\| < \delta$ y toda las soluciones $\phi(\cdot) \in \mathcal{S}_{x_0}$ se cumplen las siguientes condiciones:

- i) $\phi(\cdot)$ es continua para $t \in [0, +\infty)$ y
- ii) $\|\phi(t)\| < \epsilon, \forall t \geq 0$.

Según la definición 31 la noción de estabilidad significa que la trayectoria del sistema siempre permanece dentro de un “cilindro” cuya base tiene radio ϵ , siempre que el estado inicial este sobre una esfera de radio δ . Ver Figura 1.13.

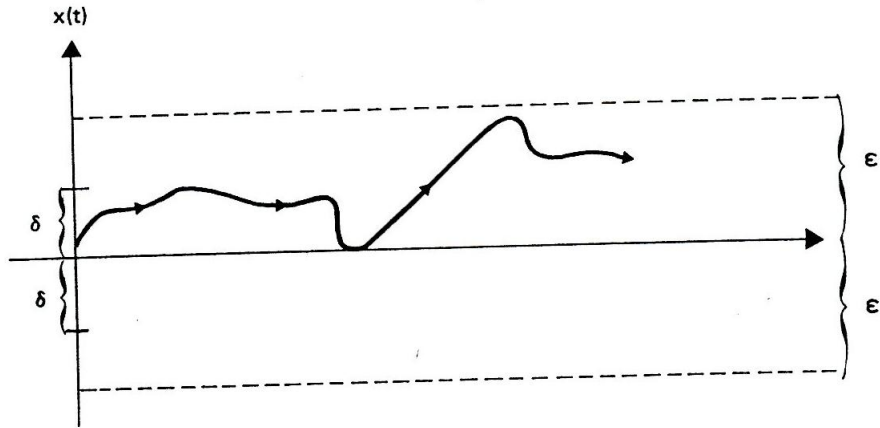


Figure 1.13: Estabilidad en el sentido de Lyapunov.

Observación 32. Si $f = f(x, t)$, es decir, el sistema no es autonomo, entonces el número δ depende del tiempo inicial t_0 .

Definición 33. Decimos que el origen es localmente asintoticamente estable (en el sentido de Lyapunov) para (1.21) si se cumplen las siguientes condiciones:

- i) (1.21) es estable en el origen y,
- ii) existe $\delta_0 > 0$ tal que

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\phi(t)\| = 0$$

para cada x_0 tal que $\|x_0\| < \delta_0$ y todas las soluciones $\phi(\cdot) \in \mathcal{S}_{x_0}$.

El origen es llamado globalmente asintoticamente estable si δ_0 puede ser tomado tan grande como se desee. Cuando el punto de equilibrio $x = 0$ para el sistema (1.21) satisface la condición (ii) decimos que x es un atractor del sistema.

Observación 34. Las definiciones 31 y 33 pueden ser enunciadas para cualquier posición de equilibrio z_0 , esto es $f(z_0) = 0$. La elección de $z_0 = 0$ no implica pérdida de generalidad.

Exemplo 35 (Oscilador de Van der Pol). Considere la ecuación conocida como ecuación de Van der Pol:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} - \lambda(1 - x^2)\frac{dx}{d\tau} + x = 0 \quad (1.22)$$

Esta ecuación juega un papel muy importante en el desarrollo de la teoría de las oscilaciones no lineales y en el análisis cualitativo de ecuaciones diferenciales. La ecuación (1.22), expresada de forma más compacta, queda

$$\ddot{x} - \lambda(1 - x^2)\dot{x} + x = 0 \quad (1.23)$$

Esta ecuación de segundo orden se puede expresar como un sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden. Si tomamos $x_1 = x$ y $x_2 = \dot{x}$, y sustituimos en (1.23), se tiene que

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -x_1 + \lambda(1 - x_1^2)x_2 \end{cases} \quad (1.24)$$

Este sistema tiene un único punto de equilibrio en $(0, 0)$, que es independiente del valor del parámetro de control λ . Sin embargo, la dinámica en las proximidades del punto de equilibrio sí es dependiente de λ . Para realizar el análisis de la estabilidad de $(0, 0)$ se ha de calcular la matriz jacobiana en dicho punto:

$$J(0, 0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \lambda \end{bmatrix}$$

cuyo polinomio característico es

$$\gamma^2 - \lambda\gamma + 1 = 0$$

por lo que los autovalores son

$$\gamma_{1,2} = \left(\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4} \right) / 2$$

De este modo, la estabilidad del punto de equilibrio queda así caracterizada:

nodo estable	$-\infty < \lambda \leq -2$
foco estable	$-2 < \lambda < 0$
centro	$\lambda = 0$
foco inestable	$0 < \lambda < 2$
nodo inestable	$2 \leq \lambda < \infty$

Teorema 36. Sea E un subconjunto abierto de \mathbb{R}^n conteniendo z_0 . Supongamos que $f \in C^1(E)$, $f(z_0) = 0$ y que existe una función $V \in C^1(E)$ satisfaciendo $V(z_0) = 0$ y $V(x) > 0$ si $x \neq z_0$. Entonces:

- Si $\dot{V}(x) \leq 0$ para todo $x \in E$, z_0 es estable.
- Si $\dot{V}(x) < 0$ para todo $x \in E - \{z_0\}$, z_0 es asintóticamente estable.
- Si $\dot{V}(x) > 0$ para todo $x \in E - \{z_0\}$, z_0 es inestable.

Demostración: a) No perdemos generalidad si asumimos que el punto de equilibrio $x_0 = 0$ elegimos $\epsilon > 0$ suficientemente pequeño que $\overline{N_\epsilon(0)} \subset E$ y sea m_ϵ el mínimo de la función continua $V(x)$ sobre el conjunto compacto

$$S_\epsilon = \{x \in \mathbb{R}^n / |x| = \epsilon\}.$$

Entonces ya que $V(x) > 0$ para $x \neq 0$, se sigue que $m_\epsilon > 0$. Ya que $V(x)$ es continua y $V(0) = 0$, se sigue que existe un $\delta > 0$ tal que $|x| < \delta$ implica que $V(x) < m_\epsilon$.

Si $\dot{V}(x) \leq 0$ para $x \in E$, se sigue que $V(x)$ es decreciente a lo largo de las trayectorias de (1.21). Así, si ϕ_t es el flujo de (1.21), se sigue que para todo $z_0 \in N_\delta(0)$ y $t \geq 0$ tenemos:

$$V(\phi_t(z_0)) \leq V(z_0) < m_\epsilon.$$

Ahora supongamos que para $|z_0| < \delta$ hay un $t_1 > 0$ tal que $|\phi_{t_1}(z_0)| = \epsilon$; es decir, tal que $\phi_{t_1}(z_0) \in S_\epsilon$. Entonces ya que m_ϵ es el mínimo de $V(x)$ sobre S_ϵ , esto implicaría que

$$V(\phi_{t_1}(z_0)) \geq m_\epsilon$$

lo cual contradice la igualdad arriba. Así para $|z_0| < \delta$ y $t \geq 0$ se sigue que $|\phi_t(z_0)| < \epsilon$, es decir, es un punto de equilibrio estable.

Los casos b) y c) son análogos. Ver [77]

□

Exemplo 37. Consideremos el sistema dinámico en \mathbb{R}^3 descrito por el sistema,

$$\begin{aligned} x' &= 2y(z-1) \\ y' &= -x(z-1) \\ z' &= -z^3 \end{aligned}$$

Notemos que el único punto de equilibrio es el origen, analizaremos su estabilidad. La parte lineal del sistema en $(0, 0, 0)$ es dada por la matriz

$$\begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

se puede verificar fácilmente que la matriz tiene dos autovalores imaginarios y un autovalor igual a cero. Así, todo lo que podemos concluir es que el origen no es un sumidero.

Ahora, construiremos una función de Liapunov para $(0, 0, 0)$. Considere la función $V(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2$, con $a, b, c \geq 0$. Observe que para tal V se tiene

$$\dot{V} = 2(axx' + byy' + czz');$$

de modo que

$$\frac{1}{2}\dot{V} = 2axy(z-1) - bxy(z-1) - cz^2$$

Como deseamos que $V \leq 0$, podemos escoger $c = 1$ y $2a = b$. De aquí, concluimos que $x^2 + 2y^2 + z^2$ es una función de Liapunov y, por tanto, el origen es estable. Además, es asintóticamente estable ya que esta función de Liapunov es claramente estricta, es decir satisface la condición (b) del teorema. Note que la condición $V \leq 0$ significa que cuando una trayectoria cruza una "superficie de nivel" $V^{-1}(c)$, penetra en el conjunto donde $V \leq c$ y nunca puede volver a salir.

Chapter 2

Control Optimal

En este capítulo discutimos el problema de control optimal asociado a bioreactores secuenciales y tiempo mínimo de cierto bioproceso.

El estudio de propiedades geométricas de problemas de control optimal sobre reactores, permite su aplicación realista a una planta de tratamiento de aguas residuales industriales y muestra las ventajas de utilizar una estrategias óptimas en el control de la planta, ya que esto reduce, entre otros aspectos, el funcionamiento y los costos del tamaño de la planta.

2.1 Control optimal de procesos sobre de Bioreactores SBR

En ésta sección discutimos el problema de control de tiempo minimo para un reactor secuencial por lotes. Abordaremos este problema via el método de Green discutido anteriormente, a través del cual podemos obtener una solución global única, y el control optimal.

El tratamiento de las aguas residuales industriales via el proceso de lodos activados es común, pero la naturaleza de muchas descargas industriales a menudo causan problemas de funcionamiento en los sistemas de flujo continuo. Los biorreactores secuenciales (o discontinuos), conocidos en la Literatura por su sigle en ingles SBR, ofrecen una serie de ventajas sobre los sistemas de flujo continuo [36]. Asimismo, este tipo de bioreactores permite una mayor flexibilidad en la estrategia de control. En general, podemos distinguir las siguientes características principales de un proceso SBR: a) repetición periódica de una secuencia de fases del proceso estan bien definidos; b) duración prevista de cada fase del proceso esta de acuerdo con el resultado del tratamiento a que debe ajustarse c) progreso de las diversas reacciones biológicas, físicas en el tiempo, y lugar en el espacio.

Recordemos que, fango activado es un proceso biológico en el cual el tratamiento de aguas es mezclado con una suspensión de microorganismos para asimilar los contaminantes y separar el efluente tratado.

En el sistema de SBR todo el tratamiento se lleva a cabo en un único reactor con diferentes fases separadas en el tiempo. El ciclo en un SBR típico se divide en cinco períodos de tiempo discreto: llenado, reacción, asentamiento, extracción y desocupación. Al inicio de cada ciclo, el SBR contiene un cierto volumen de agua y el lodo activado se instala en la parte inferior del reactor. El ciclo comienza con una fase de llenado de distinta duración. La fase de llenado puede ser de corta o larga duración dependiendo de los efectos que se desean alcanzar.

Al comienzo de la fase de llenado, o algún tiempo después, el aireador está encendido. La fase de aireación comienza ahora y puede durar hasta que la porción biodegradable de los constituyentes orgánicos han sido degradados. Mezclador y aireador se apagan para la fase de asentamiento. Una zona de agua clara (sobrenadante) puede ser retirado progresivamente a medida que el lodo se mueve hacia abajo. Cuando se alcanza el nivel bajo de operación se detiene la extracción y se retiran los sólidos en exceso localizados en la parte inferior. En esta situación, el reactor ingresa a la fase de reposo que continúa hasta que inicie el siguiente ciclo. La reducción del tiempo para el ciclo del SBR aumenta la cantidad de contaminantes que pueden ser tratados por el proceso. A medida que la solución, la extracción y fases de inactividad sean de tiempo fijo o no controlable por el operador, el tiempo de ciclo de la SBR puede ser sólo reducido si los tiempos de llenado y de reacción pueden reducirse.

Utilizando las ecuaciones de balance de masa [40], [88] se puede obtener un modelo simplificado para bioreactores del tipo SBR, el proximo modelo tiene tres variables de estado y uno de control, y esta descrito por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned}\dot{X}(t) &= \left(\mu(S(t)) - \frac{F_{in}(t)}{V(t)} \right) X(t) \\ \dot{S}(t) &= -\frac{1}{Y} \mu(S(t)) X(t) + \frac{F_{in}(t)}{V(t)} (S_{in}(t) - S(t)) \\ \dot{V}(t) &= F_{in}(t),\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde X es la concentración de la biomasa en el tanque (ML^{-3}), S concentración de sustrato en el tanque (ML^{-3}), V volumen de agua en el tanque (L^3), $\mu(S)$ tasa de crecimiento específico (T^{-1}), F_{in} flujo de agua de entrada al tanque (L^3T^{-1}), Y coeficiente de rendimiento, (S_{in}) concentración de sustrato en el flujo de entrada (ML^{-3}). S_{in} será considerado no como una constante, sino como una cantidad de variantes y $S_{in}(t) \geq 0$, F_{in} , la variable de control, que sólo puede tomar valores en un intervalo positivo y cerrado $F_{in} \in [0, F_{max}]$, $F_{max} > 0$. Las tres variables de estado (X, S, V) tienen que

ser positivas, es decir, $X \geq 0$, $S \geq 0$ and $V \geq 0$. Además para hacer la descripción física significativa suponemos que después de un nivel máximo de agua en el tanque de V_{\max} se ha alcanzado el flujo de entrada de F_{in} apagandose automáticamente para evitar el desbordamiento.

Asumiremos que Y es constante, $\mu(S)$ esta definida por $S \geq 0$, con $\mu(0) = 0$, $\mu(S) > 0$ para $S > 0$, $\mu(S)$ es limitada (es decir $\mu(S) \leq M$ para cada $S > 0$ y para alguna constante positiva M), y es continuamente diferenciable.

2.1.1 Formulación

En esta sección tomaremos como base de nuestro estudio el modelo (2.1) para encontrar la mejor estrategia de la variable de control, en el sentido que el tiempo total de las fases de llenado y la reacción sea mínimo. Este tipo de problemas suelen resolverse mediante el principio del máximo de Pontryagin, el cual proporciona un conjunto de condiciones necesarias que deben ser satisfechas por la ley de control óptimo. En este trabajo usamos el método de Green para resolver el problema sobre el plano. Para tal fin una descripción equivalente del modelo original tiene que ser descrita sobre el plano. Una ventaja de este método es que proporciona un enfoque global para la minimización, es decir, no depende de aproximaciones locales al igual que el principio del máximo. Por otra parte, para los arcos singulares, donde el principio del máximo no da información constructiva, el método de Green puede resolver el problema.

Diversos problemas de control optimal para procesos biológicos sobre reactores han permitido el estudio de bioprocesos tales como: biotecnología en [8], [88], [96]; en [13] y [14] el método de Green se ha utilizado para optimizar el tránsito de un reactor continuo; en [34] se considera la velocidad de alimentación como una variable de control de un fermentador fedbatch y una expresión analítica para los tiempos de conexión entre los intervalos de control de explosión y arcos singulares fueron derivados, cuyo objetivo era la maximización de la salida del producto. Características generales de los perfiles de velocidad de alimentación óptimas para diferentes clases de fermentación en lotes se presentaron en [63], y en [56] se utilizaron estas características para establecer un procedimiento numérico. En [84] la concentración de sustrato en el fermentador se usó como la variable de control para derivar un problema de control no singular. Procedimientos numéricos para resolver los problemas de optimización en la fermentación por lotes se discuten en [53], [95].

En todos estos trabajos la concentración de sustrato en el flujo de entrada (S_{in}) fue considerada como una constante. Considerando estos posibles procesos biotecnológicos, ya que esta concentración puede ser controlada, para los procesos de tratamiento de aguas residuales esta variable es una de los

disturbios más importantes y no puede ser considerada como una constante ni como una variable de control. Los principales objetivos del estudio presentados en esta sección son: (1) determinar las condiciones necesarias y suficientes para establecer la política de alimentación óptima de biorreactores en el tratamiento de aguas residuales. El método de Green es utilizado para este propósito. En este sentido la consideración de la variación de la concentración de sustrato en el flujo de entrada es una perturbación importante, (2) determinar una ley de control con realimentación que resuelva el problema óptimo para diferentes condiciones iniciales.

A menudo, en la práctica la estrategia de control de un SBR para el tratamiento de aguas residuales industriales es muy simple: El tanque se llena tan rápido como sea posible y el ciclo completo de la SBR está fijada a ser 24 h. En este caso la información sobre el estado del proceso no se utiliza para su control. Los resultados de este trabajo se pueden utilizar para implementar una estrategia de control diferente para los SBR.

El objetivo de un reactor del tipo SBR permite llevar la concentración del sustrato en el tanque S hacia un nivel especificado S_{\min} , mientras que el volumen se lleva desde V_0 a V_f , donde $0 < V_0 < V_f \leq V_{\max}$. Por lo general, en la práctica, la concentración de contaminantes en el agua a tratar no se distribuye uniformemente, lo que se refleja en el hecho de que $S_{in}(t)$ en el modelo(2.1) no es constante. Para los procesos de tratamiento de aguas residuales es de hecho uno de los principales disturbios. Considere la posibilidad que las aguas residuales que alimentan al reactor están contenidas en una tubería de volumen mayor que $V_f - V_0$, y que la concentración de sustrato a lo largo de las tuberías cambian de manera arbitraria (posible interpretación física de las condiciones matemáticas para resolver el problema). En el estudio de procesos asociados a bioreactores, es de interés optimizar la eficiencia del proceso, que se define como la cantidad de sustrato tratado por unidad de tiempo. Así dado que el proceso es cíclico la optimización consiste en maximizar la eficiencia por ciclo ε_c , dado por

$$\varepsilon_c = \frac{\int_0^{T_c} F_{in}(\tau) S_{in}(\tau) d\tau + S_0 V_0 - S_{\min} V_f}{T_c},$$

es decir, maximizar la cantidad de sustrato degradado durante el ciclo dividido entre T_c , el tiempo de ciclo (El valor de T_c depende de la función de entrada de $F_{in}(t)$). Si asumimos que la concentración de sustrato en la tubería no cambia con el tiempo, tenemos que cada par de funciones de control $F_{in}^1(t)$, $F_{in}^2(t)$ que satisfacen $\int_0^{t_1} F_{in}^1(\tau) d\tau = \int_0^{t_2} F_{in}^2(\tau) d\tau$, para algún $t_1, t_2 \geq 0$ se deduce que $\int_0^{t_1} F_{in}^1(\tau) S_{in}(\tau) d\tau = \int_0^{t_2} F_{in}^2(\tau) S_{in}(\tau) d\tau$. Así, el numerador de la expresión por ε_c es igual para todas las entradas de control que satisfagan $\int_0^{T_c} F_{in}(\tau) d\tau = V_f - V_0$, y la maximización de ε_c coincide con la minimización de T_c

Notemos que, el tiempo de ciclo T_c consiste en un período fijo T_f , por decantación, vaciado del tanque,

llenado y tiempo de reacción T_r , el cual puede ser controlado .

Por lo tanto, deseamos obtener un control con realimentación para la variable de entrada F_{in} que lleva un estado inicial dado $x_0 = [X_0, S_0, V_0]$ hacia un estado final $x_f = [X_f, S_f, V_f]$, que yace sobre el conjunto de estados finales deseados $X_f \doteq \{x_f / 0 \leq S_f \leq S_{\min}, V_f\}$; en un tiempo mínimo, utilizando una función de entrada admisible a lo largo de una trayectoria admisible.

De acuerdo con las condiciones físicas del sistema, decimos que la función ingreso es amisible si

$$0 \leq F_{in} \leq F_{\max} \quad (2.2)$$

y una trayectoria es llamada admisible si para cada tiempo $t \geq 0$ ella se encuentra en la región

$$\Omega_A \doteq \{(X, S, V) / X > 0, S \geq 0, 0 < V_{\min} \leq V \leq V_{\max}\} \quad (2.3)$$

Se excluye el caso $X = 0$ porque no es físicamente interesante (el reactor está muerto), y si $X_0 > 0$ el no puede ser alcanzado por cualquier entrada ver (2.1). Las restricciones para el volumen del tanque V vienen del hecho que el tanque no puede estar completamente vacío y que se tiene dimensiones físicas finitas.

El costo funcional a ser minimizado es el tiempo de reacción T_r , es decir,

$$J [F_{in}] = \int_0^{T_r} d\tau \quad (2.4)$$

Bajo las condiciones impuestas a $S_{in}(t)$ la cantidad de sustrato que ingresa dentro del tanque, en cualquier momento, es decir, $\int_0^t F_{in}(\tau) S_{in}(\tau) d\tau$, sólo depende de la cantidad de agua que ha sido ingresada, es decir, $\int_0^t F_{in}(\tau) d\tau = V(t)$, y no de cómo se hace esto, es decir, sobre la forma de $F_{in}(\tau)$. Por lo tanto, la cantidad de entrada de sustrato es una función del cambio de volumen

$$\int_0^t F_{in}(\tau) S_{in}(\tau) d\tau = W(V(t)) - W(V_0) \quad (2.5)$$

Por simplicidad, se supondrá que $W(\cdot)$ una función dos veces continuamente diferenciable. Diferenciando (2.5) con respecto a t se puede ver que $S_{in}(t)$ puede ser reemplazada por una función de $V(t)$, es decir,

$$S_{in}(t) = \tilde{S}_{in}(V(t)) = dW(V(t)) / dV \quad (2.6)$$

Observe que (2.6) implica que $W(V)$ es una función monótona creciente de V y que $\tilde{S}_{in}(\cdot)$ es continuamente diferenciable . Para resolver el problema propuesto será útil introducir nuevas variables de estado: $z_1 \doteq XV$, la cantidad total de biomasa, $z_2 \doteq SV$, la cantidad total de sustrato, y $z_3 \doteq V$. La dinámica del sistema en estas nuevas variables esta dado por por

$$\begin{aligned} \dot{z}_1(t) &= \mu(z_2(t)/z_3(t)) z_1(t) \\ \dot{z}_2(t) &= -\frac{1}{Y} \mu(z_2(t)/z_3(t)) z_1(t) + \tilde{S}_{in}(z_3(t)) F_{in}(t) \\ \dot{z}_3(t) &= F_{in}(t) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Los correspondientes estados inicial y final correspondientes y el conjunto final son $z_0 = [z_{10}, z_{20}, z_{30}] = [X_0V_0, S_0V_0, V_0]$; $z_f = [X_fV_f, S_fV_f, V_f]$; and $Z_f \doteq \{z_f / 0 \leq z_{2f} \leq S_{\min}V_f, z_{3f} = V_f\}$, respectivamente.

Este es un típico problema de tiempo mínimo, que por lo general se resuelve recordando el principio máximo de Pontryagin [79]; sin embargo en este trabajo emplearemos el metodo de Green que fue utilizado para la solución de este tipo de problema [62], [55], [32], [33].

2.1.2 Controlabilidad

Un análisis de la controlabilidad del proceso sobre el reactor mostrará que la representación de la parte controlable del mismo es un sistema bidimensional, simplificando así el estudio del problema de control propuesto en dimensión alta.

Observe que el sistema (2.7) se puede reescribir en forma compacta como

$$\dot{z} = f(z) + g(z)F_{in} \quad (2.8)$$

donde $z^T = [z_1, z_2, z_3]$, y $f(z)$ y $g(z)$ estan definida por (2.7). Para condiciones iniciales satisfaciendo (2.3) la solución de (2.8) es única y se denota por $\phi(t, F_{in}, z_0)$, para una función de ingreso admisible F_{in} y un estado inicial z_0 in $t_0 = 0$.

Definición 38. *El conjunto alcanzable desde z_0 , [93]*

$$\mathcal{A}(z_0) \doteq \{z \in \mathbb{R}^3 / z_0 \rightsquigarrow z\},$$

donde $z_0 \rightsquigarrow z$ significa que existe una función de tiempo admisible F_{in} tal que $z = \phi(t, F_{in}, z_0)$, para algún $t \geq 0$ finito.

La siguiente proposición da algunas propiedades del conjunto alcanzable para el sistema (2.7),

Proposición 39. *Let $z_0^T = [X_0V_0, S_0V_0, V_0]$ and F_{in} satisfaciendo (2.2) y (2.3), respectivamente. Para el sistema (2.7) las siguientes afirmaciones son verdaderas:*

(i) *La superficie*

$$\sigma(z_0) : V(X + YS) - YW(V) = \rho(z_0) \quad (2.9)$$

donde $\rho(z_0) = V_0(X_0 + YS_0) - YW(V_0)$, es invariante para cada función de ingreso admisible F_{in} .

(ii) $\mathcal{A}(z_0) \subseteq \sigma(z_0)$.

(iii) *Para cada $t \geq 0$, y cada F_{in} admisible, la trayectoria $\phi(t, F_{in}, z_0)$ es tal que $X(t) \geq 0$, $S(t) \geq 0$, y $V(t) \geq 0$. Más aún, si $X_0 > 0$ entonces $X(t) > 0$ y si $X_0 = 0$ entonces $X(t) = 0$.*

Demostración: (i) Esto se deduce fácilmente a partir del hecho que

$$\nabla\sigma \cdot (f(z) + g(z)F_{in}) = 0$$

La expresión para la superficie (2.9) puede ser encontrada integrando entre 0 y t la siguiente ecuación

$$Y \frac{d(VS)}{dt} + \frac{d(VX)}{dt} - Y \frac{dV}{dt} \tilde{S}_{in}(V) = \frac{d(Y[VS - W(V)] + VX)}{dt} = 0$$

la cual puede ser obtenida desde (2.6) y (2.7). De ello, sigue que

$$V(t)(X(t) + YS(t)) - YW(V(t)) = V_0(X_0 + YS_0) - YW(V_0)$$

Por lo tanto, $\rho(z_0) = V_0(X_0 + YS_0) - YW(V_0)$.

(ii) Esto se deduce fácilmente desde la definición de conjunto accesible desde z_0 .

(iii) $V \geq V_0$ es una consecuencia de $\dot{V} = F_{in}$ y la restricción F_{in} . De la primera ecuación en (2.1) está claro que si $X = 0 \Rightarrow \dot{X} = 0$, y por lo tanto la línea $X = 0$ sobre $\sigma(z_0)$ no puede ser cruzada. Así que, $X_0 \geq 0 \Rightarrow X(t) \geq 0$ para todo $t \geq 0$. Para probar que $S_0 \geq 0 \Rightarrow S(t) \geq 0$ para todo $t \geq 0$ uno puede tomar la superficie $\sigma_1 : S = 0$ y su vector gradiente, y puesto que $\nabla\sigma_1 = [0, 1, 0]$ y por $\nabla\sigma_1 \cdot (f(z) + g(z)F_{in}) \geq 0$ para todos los F_{in} permitidos y en la región de $\Omega_A \cap \sigma_1$, se deduce que el vector velocidad apunta siempre dentro de la región $S > 0$ o es tangente a su frontera. Más aún, a partir de (2.7), la no negatividad de S , $\mu(S)$ y la positividad de V se sigue que $X(t)$ es una función monótona creciente y por lo tanto $X_0 > 0$ implica $X(t) > 0$. Además si $X_0 = 0$ entonces $X(t) = 0$. \square

Observación 40. *Se deduce fácilmente desde la Proposición 39 que la planta (2.7) no es controlable, es decir, no todos los pares de puntos, incluso en la región permitida (2.3), pueden ser conectados a través de una trayectoria. Dado el punto inicial z_0 todos los estados alcanzables yacen sobre la superficie $\sigma(z_0)$.*

Observación 41. *Como una consecuencia importante de la Proposición 39 uno tiene que el problema de optimización no está bien planteado debido a la falta de controlabilidad de la planta. Para que el problema tenga sentido, si es dado el estado inicial $x_0 = [X_0, S_0, V_0]$ entonces el estado final $x_f = [X_f, S_f, V_f]$ tiene que estar sobre la superficie $\sigma(z_0)$ dada en (2.9). En otras palabras, si se da x_0 , sólo dos componentes de x_f pueden ser arbitrariamente elegidos, y la tercera será determinada por la superficie $\sigma(z_0)$. Así por ejemplo, si $[S_f, V_f]$ son seleccionados, X_f tiene que ser elegido para satisfacer (2.9).*

Observación 42. *La existencia de la superficie invariante $\sigma(z_0)$ para el sistema es una consecuencia directa de la conservación de masas en el reactor biológico: la masa continua de sustrato se convierte en masa celular o se acumula en el tanque. Si hay un término de decaimiento en el balance de X en (2.7), las ecuaciones de equilibrio (2.7) no reflejarían esta conservación de masas, y por lo tanto, no existiría la superficie invariante $\sigma(z_0)$.*

Observación 43. *Se sigue desde la Proposición 39 que el conjunto*

$$\Omega(z_0) \doteq \{z \in \mathbb{R}^3 / z \in \sigma(z_0) \wedge X > 0 \wedge S \geq 0 \wedge V_{\min} \leq V\} \quad (2.10)$$

también es invariante.

La Proposición 39 muestra que si se da un estado inicial z_0 , la dinámica del sistema evoluciona sobre la superficie bidimensional $\sigma(z_0)$. Por consiguiente, podemos encontrar una representación de la dinámica de la planta sobre esta superficie .

Proposición 44. *Sea z_0 un estado inicial para el sistema (2.7) y sea $\Omega(z_0)$ el conjunto invariante definido por (2.10). Entonces la dinámica sobre $\Omega(z_0)$ de la planta (2.7) puede ser descrito por un conjunto de dos ecuaciones diferenciales y una ecuación algebraica*

$$\begin{aligned}\dot{S} &= -\frac{1}{Y}\mu(S)(Y(W(V)/V - S) + \rho(z_0)/V) + \frac{\tilde{S}_{in}(V) - S}{V}F_{in} \\ \dot{V} &= F_{in} \\ X &= Y(W(V)/V - S) + \rho(z_0)/V\end{aligned}\tag{2.11}$$

Demostración: A partir de (2.9) se puede obtener la tercera ecuación de (2.11) y sustituyéndolo en (2.1) el resto de (2.11) seguirá. \square

Las ecuaciones diferenciales de (2.11) se escribirán en forma corta como

$$\dot{x} = f(x) + g(x)F_{in}\tag{2.12}$$

donde $x^T = [S, V]$, y $f(x)$ y $g(x)$ se definen por (2.11). Para las condiciones iniciales en (2.10) la solución de (2.12) es única y sera denotada por $\phi(t, F_{in}, x_0)$, para una función de ingreso $F_{in}(t)$ y un estado x_0 in $t_0 = 0$.

La región admisible $\Omega_A(z_0)$ para el vector de estado x de (2.11) es la intersección del conjunto admisible Ω_A para la descripción original del sistema (2.3) y la superficie $\sigma(z_0)$ dada en (2.9), esto es,

$$\Omega_A(z_0) \doteq \{(S, V) / (0 < V_{\min} \leq V \leq V_{\max}), (S \geq 0), (S < W(V)/V + \rho(z_0)/(YV))\}\tag{2.13}$$

2.1.3 Análisis sobre el plano

Ahora, el problema de tiempo minimo para el sistema (2.7) puede ser reformulado como un problema de tiempo minimal sobre el plano (2.11) o (2.12), dado a continuación como sigue:

Problema de tiempo óptimo (OP): Sea una superficie $\sigma(z_0)$ definida por (2.9) junto con el conjunto admisible $\Omega_A(z_0)$ dada en (2.13). Sea $x_0 \in \Omega_A(z_0)$ un punto inicial y $X_f \doteq \{x_f / 0 \leq S_f \leq S_{\min}, V_f\} \subset \Omega_A(z_0)$ el conjunto de estados finales para el sistema (2.12). Encuentrar una función de control admisible F_{in} , a la que corresponde una trayectoria admisible $\phi(t, F_{in}, x_0)$, tal que F_{in} transfiere x_0 a un punto en X_f en tiempo mínimo, es decir, $J[F_{in}]$ dado en (2.4) será minimizado.

Para algunos tipos de problemas óptimos en el plano, los autores en [32],[33], [62], estudiaron soluciones basados en el método de Green. El método consiste esencialmente en tres pasos:

1. Determinación del conjunto alcanzable para el problema, es decir, la región del plano donde la trayectoria de una posible solución deber yacer.
2. Mediante el uso del método de Green la optimabilidad relativa de cualesquiera dos posibles trayectorias en el conjunto alcanzable pueden ser determinadas sin el conocimiento de las soluciones de las ecuaciones diferenciales que describen el sistema. Esto permite la determinación de la trayectoria óptima.
3. Una vez que la trayectoria óptima ha sido determinada el último paso consiste en la determinación de una función de control admisible (aquí F_{in}), la cual onduce a una solución del sistema con un arco de trayectoria que coincide con la trayectoria óptima encontrada.

Estos pasos serán discutidos para el problema de tiempo óptimo propuesto en (2.4). Los resultados en las referencias no se pueden aplicar directamente al problema propuesto, pero la técnica se puede adaptar para resolver dicho problema.

CONJUNTO ALCANZABLE

Dado un punto inicial x_0 y un conjunto de estados finales $X_f \doteq \{x_f / 0 \leq S_f \leq S_{\min}, V_f\}$, ambos en $\Omega_A(z_0)$, si existe una solución al problema de control óptimo, el segmento de la trayectoria que conecta x_0 con $x_f \in X_f$ debe estar en $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$, donde

$$\mathcal{A}(x_0) \doteq \{x \in \Omega_A(z_0) / x = \phi(t, F_{in}, x_0), \text{ para algún } t \in [0, \infty), F_{in} \text{ admisible}\}$$

$$\mathcal{A}(X_f) \doteq \{x \in \Omega_A(z_0) / \exists x_f \in X_f, x_f = \phi(t, F_{in}, x), \text{ para algún } t \in [0, \infty), F_{in} \text{ admisible}\}$$

es decir, $\mathcal{A}(x_0)$ es el conjunto de los puntos en $\Omega_A(z_0)$ los cuales pueden ser alcanzados desde x_0 y $\mathcal{A}(X_f)$ denota el conjunto de puntos en $\Omega_A(z_0)$ desde el cual un punto en X_f puede ser alcanzado. Alternativamente, $\mathcal{A}(X_f)$ se puede definir como

$$\mathcal{A}(X_f) \doteq \{x \in \Omega_A(z_0) / \exists x_f \in X_f, x = \phi(-t, F_{in}, x_f), \text{ para algún } t \in [0, \infty), F_{in} \text{ admisible}\},$$

con $\phi(-t, F_{in}, x_f)$ la solución de

$$\dot{x} = -f(x) - g(x)F_{in}, \quad x(0) = x_f$$

Por otro lado si $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f) \neq \emptyset$, entonces existe un control de admisible F_{in} tal que un arco de la trayectoria $\phi(t, F_{in}, x_0)$ juntado x_0 y algún $x_f \in X_f$.

Se demostrará, que el conjunto $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$ está delimitada por las trayectorias $\phi(t, F_{\max}, x_0)$, $\phi(t, 0, x_0)$ y $\phi(-t, 0, x_f^T = (0, V_f))$ y el segmento $S = 0, V_0 \leq V \leq V_f$. La Figura 2.1 ilustra esta región.

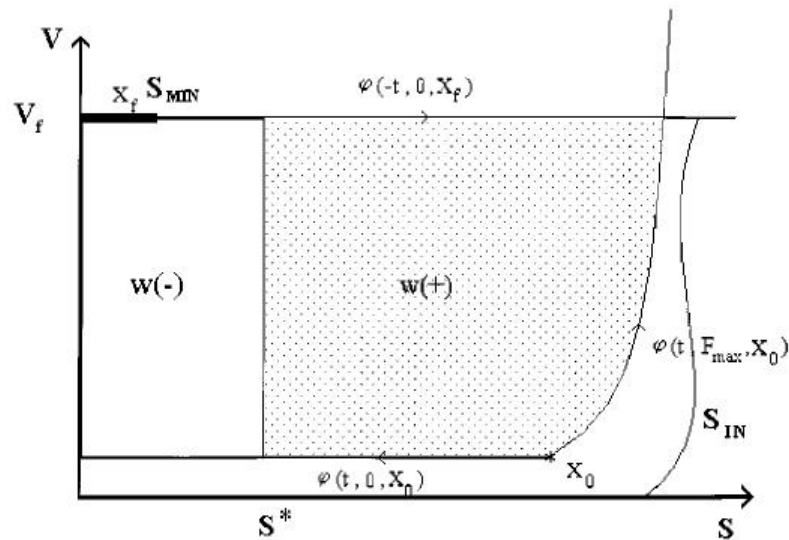


Figure 2.1: Conjunto admisible (sombreado) y signo de la función de ω del método de Green

Proposición 45. Sean $x_0^T = [S_0, V_0] \in \Omega_A(z_0)$ y $X_f = \{x_f / 0 \leq S_f \leq S_{\min}, V_f\} \subset \Omega_A(z_0)$ tal que $S_{\min} > 0$, y $V_0 < V_f \leq V_{\max}$. Sea $\bar{\mathcal{G}}$ el conjunto compacto, simplemente conexo y limitado por los arcos $\phi(t, F_{\max}, x_0)$, $\phi(t, 0, x_0)$, $\phi(-t, 0, x_f^T = [0, V_f])$ y el segmento $\lambda = \{(S, V) / S = 0, V_0 \leq V \leq V_f\}$. Sea también $\mathcal{G} \doteq \bar{\mathcal{G}} \setminus \lambda$, es decir \mathcal{G} es el conjunto $\bar{\mathcal{G}}$ sin el borde izquierdo (ver Figura 2.1). Tenemos $\mathcal{G} = \mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$ y su interior es no vacío.

Demostración: Note que, puesto que $X_0 > 0$ entonces $S(t) < \rho(z_0)/YV(t) + W(V(t))/V(t)$ para cada $F_{in}(t)$ y $t \geq 0$. Vamos a describir primero las tres trayectorias que definen \mathcal{G} :

- (1) $\phi(t, 0, x_0) : V(t) = V_0$ y $\dot{S} = -\mu X/Y$, es decir, V es constante y S tiende asintóticamente a $S = 0$, cuando t va hacia ∞ . Por lo tanto, λ no es alcanzado en tiempo finito.
- (2) $\phi(-t, 0, x_f) : V(t) = V_f$ y $\dot{S} = \mu X/Y$, es decir, V es constante, S crece monótonamente y asintóticamente hacia $S = \rho(z_0)/YV_f + W(V_f)/V_f$ (es decir, $X = 0$)
- (3) $\phi(t, F_{\max}, x_0) : V(t) = V_0 + F_{\max}t$, es decir, V crece monótonamente y $0 < S < \rho(z_0)/YV_f + W(V_f)/V_f$. Por lo tanto, esta trayectoria intersecta la línea $V = V_f$ en un único punto $0 < \hat{S} < \rho(z_0)/YV_f + W(V_f)/V_f$.

Ahora volvemos a la prueba de la proposición,

(a) Supongamos que $y \notin \mathcal{G}$, probaremos que $y \notin \mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$. Escribiendo $y = (S_y, V_y)$. Hay cuatro posibilidades para $y \notin \mathcal{G}$. Vamos a considerar cada caso:

1. y está a la izquierda de $S = 0$, es decir, $S_y \leq 0$. Desde la proposición 39 sigue la discusión que $y \notin \mathcal{A}(x_0)$.
2. y está sobre la línea $V = V_f$, es decir, $V_y > V_f$. Desde $\dot{V} \geq 0$ se sigue que $y \notin \mathcal{A}(X_f)$.
3. y está bajo la línea $V = V_0$, es decir, $V_y < V_0$. Desde $\dot{V} \geq 0$ se sigue que $y \notin \mathcal{A}(X_0)$.
4. y está a la derecha del arco $\phi(t, F_{\max}, x_0)$. En este caso sucede que $y \notin \mathcal{A}(X_0)$. Para mostrar que es la única posibilidad de alcanzar a y desde x_0 es cruzar el arco $\phi(t, F_{\max}, x_0)$, ya que esta trayectoria tiende a infinito para t grande y ninguna trayectoria puede ir entorno de x_0 bajo la línea $V = V_0$. Para cruzar el arco $\phi(t, F_{\max}, x_0)$ es necesario que la velocidad del vector \dot{x} para algún F_{in} en algún momento este a la derecha del mismo. Pero esto no es posible debido a que el vector de velocidad para cualquier F_{in} está siempre entre los vectores correspondientes para $F_{in} = 0$ y $F_{in} = F_{\max}$, y el vector velocidad para $F_{in} = 0$ apunta siempre a la izquierda del arco $\phi(t, F_{\max}, x_0)$ para cualquier punto en \mathcal{G} .

(b) Supongamos $y \in \mathcal{G}$, probaremos que $y \in \mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$. Si $y = (S_y, V_y)$ entonces la estrategia de control siempre dirige x_0 hacia y : hacemos $F_{in} = F_{\max}$ hasta que se alcance la línea $V = V_y$ (esto ocurre en tiempo finito), y a continuación se cambia a $F_{in} = 0$ hasta alcanzarlo. Por lo tanto, $y \in \mathcal{A}(X_0)$. Siguiendo la estrategia de control siempre se dirige y a X_f : hacemos $F_{in} = F_{\max}$ hasta que la línea $V = V_f$ se alcance, luego se cambia a $F_{in} = 0$ hasta que X_f sea alcanzado. Ya que, $V_f > V_0$ y $S_{in} > 0$ sigue que el interior de \mathcal{G} es no vacío.

□

Proposición 46. *Bajo la hipótesis de la Proposición 45 existe una solución al problema de control de tiempo óptimo (OP).*

Demostración: Esto se deduce a partir de los resultados sobre la existencia de controles óptimos. Véase, (Corolario 2,[55]).

□

SINTESIS OPTIMAL

Para una determinada trayectoria de arco $\phi(\cdot, F_{in}, \cdot)$ conectando los puntos P_0 y $P_1 \in \mathcal{G}$, el funcional $J[F_{in}]$ (2.4) se puede expresar como una integral de línea a lo largo de este arco. Para esto, notemos primero qué, se nota primero que $\Delta(x) = -\det[f(x), g(x)] = \mu X/Y \neq 0$, para todo $x \in \mathcal{G}$. Además, de la función $\Delta(x)$ puede ser transformada a

$$\begin{aligned} \Delta(x) &= -\det[f(x) + g(x) F_{in}, g(x)] \\ &= -\det[\dot{x}, g(x)] = \dot{x}_2 g_1(x) - \dot{x}_1 g_2(x) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Por lo tanto, el funcional $J[F_{in}]$ definido en (2.4) puede ser reescrito como

$$J[F_{in}, P_0, P_1] = \int_0^{T_r} d\tau = \int_0^{T_r} \frac{\dot{x}_2 g_1(x) - \dot{x}_1 g_2(x)}{\Delta(x)} d\tau = \int_{P_0}^{P_1} \left(\frac{g_1(x)}{\Delta(x)} dx_2 - \frac{g_2(x)}{\Delta(x)} dx_1 \right)$$

es decir, como una integral de línea a lo largo del arco $\phi(\cdot, F_{in}, \cdot)$.

Ahora, supongamos que existen dos trayectorias diferentes $\phi(\cdot, F_{in}, \cdot)$ y $\phi(\cdot, F_{in}^*, \cdot)$, ambas uniendo P_0 con P_1 en \mathcal{G} , y que no tienen otros puntos en común más que P_0 y P_1 . Sea Γ la curva cerrada formada por estos arcos de trayectoria. Si Γ es atravesada en dirección hacia la izquierda, siguiendo primero el arco $\phi(\cdot, F_{in}, \cdot)$ de P_0 hacia P_1 próximamente al arco $\phi(\cdot, F_{in}^*, \cdot)$ de P_1 a P_0 , entonces la diferencia de los valores de las funcionales de la trayectoria

$$J[F_{in}, P_0, P_1] - J[F_{in}^*, P_0, P_1] = \oint_{\Gamma} \left(\frac{g_1(x)}{\Delta(x)} dx_2 - \frac{g_2(x)}{\Delta(x)} dx_1 \right) \quad (2.15)$$

es una medida de la optimalidad relativa a estas trayectorias, es decir, si la diferencia es positiva, la diferencia de las trayectorias es positiva, esto es, $\phi(\cdot, F_{in}^*, \cdot)$ es mejor que $\phi(\cdot, F_{in}, \cdot)$, y viceversa.

Dado que la curva Γ es una curva de Jordan, aplicando el Teorema de Green (Esto está permitido ya que f y g son funciones continuamente diferenciables sobre \mathcal{G}), tenemos:

$$\oint_{\Gamma} u dy + v dx = \iint \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx dy = \iint_R \omega(x, y) dx dy$$

usando (2.15) se obtiene :

$$J[F_{in}, P_0, P_1] - J[F_{in}^*, P_0, P_1] = \iint_{\Phi} \omega(x) ds \quad (2.16)$$

donde

$$\omega(x) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{g_1(x)}{\Delta(x)} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{g_2(x)}{\Delta(x)} \right) \quad (2.17)$$

y Φ es la región encerrada por Γ . Puesto que $\omega(x)$ está únicamente determinado para todo $x \in \mathcal{G}$ y se puede calcular sin resolver la ecuación diferencial (2.12), entonces (2.16) proporciona un medio directo para determinar la estrategia óptima.

CARACTERIZACIÓN DEL CONTROL OPTIMAL

La determinación de la trayectoria óptima para el problema (OP) se lleva a cabo mediante la comparación de la optimalidad relativa a todas las posibles trayectorias admisibles en el conjunto admisible usando el método de Green. El siguiente paso consiste en encontrar una función de control \hat{F}_{in} que conduce a una trayectoria óptima, es decir, $\phi(t, \hat{F}_{in}, x_0)$ es la trayectoria óptima.

Si existe una función de control la cual realiza la trayectoria óptima, dos importantes preguntas son, si esta función de control es único, y admisible. La singularidad (dentro de un conjunto de medida cero) de la función de control está asegurada si la función $\Delta(x)$ es diferente de cero a lo largo de la trayectoria, es decir, $\Delta(x) \neq 0$ para $x \in \phi(t, \hat{F}_{in}, x_0)$, [32], [33].

Puede suceder que la trayectoria óptima puede ser realizada por una función de control F_{in} de una manera única, pero que esta función no sea admisible, es decir, F_{in} no satisfaga las restricciones que se le imponen. En este caso la solución no es válida y el método no es concluyente.

CONTROL TIEMPO OPTIMAL PARA LEYES MONOD Y HALDANE

Ahora será aplicado el método estudiado al problema de tiempo minimal para el reactor biologico (2.11) cuando las leyes de crecimiento son del tipo Monod y Haldane. Puesto que la solución depende en general de la tasa de crecimiento específico $\mu(S)$, algunas descripciones importantes y habituales de esta función se tendrán en cuenta y se encontrará la solución óptima del problema para estos casos.

Para el sistema (2.11) la función $\omega(x)$ definida en (2.17) se puede escribir en la forma

$$\omega(x) = -\frac{d\mu(S)}{dS} \frac{Y \left(\tilde{S}_{in}(V) - S \right)}{\mu^2(S) V X} \quad (2.18)$$

El signo de ω en $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$ depende esencialmente de los signos de $d\mu/dS$ y $\left(\tilde{S}_{in}(V) - S \right)$, debido a que el denominador de (2.18) es siempre positivo en esta región. Los siguientes resultados se establecen para el caso en que las trayectorias se encuentran en la región $S \leq \tilde{S}_{in}(V)$, la integral (2.16) no tiene que ser evaluada de forma explícita y su signo da información suficiente para la determinación de la trayectoria óptima. Supongamos que para el sistema (2.11) se cumple:

(H1) x_0 es tal que $X_0 > 0$, y $\tilde{S}_{in}(V(t)) - S(t) \geq 0$ para $t \geq 0$ y $V(t) \leq V_f$, donde $V(t)$ y $S(t)$ corresponden a la trayectoria $\phi(t, F_{\max}, x_0)$.

Note que, (H1) se cumplirá dependiendo de los parámetros del sistema, la forma de $\tilde{S}_{in}(V)$ y las condiciones iniciales. El siguiente lema, da algunas condiciones suficientes para (H1) se cumpla de forma independiente de los parámetros del sistema:

Lema 47. Para el sistema (2.11) supongamos que x_0 es tal que $X_0 > 0$, $\tilde{S}_{in}(V_0) - S_0 \geq 0$, $\tilde{S}_{in}(V)$ es diferenciable y $d\tilde{S}_{in}(V)/dV \geq 0$ para $V_0 \leq V \leq V_f$, entonces $\tilde{S}_{in}(V(t)) - S(t) \geq 0$ para $t \geq 0$ y $V(t) \leq V_f$ para cada admisible $F_{in}(t)$.

Demostración: Sea $e \doteq \tilde{S}_{in}(V) - S$. Por lo tanto, $\dot{e} = -F_{in}e/V + \mu(S)X/Y + \tilde{S}'_{in}(V)F_{in}$ y se puede verificar que si $e(0) = \tilde{S}_{in}(V_0) - S_0 \geq 0$ y $\tilde{S}'_{in}(V) \geq 0$ tenemos $e(t) = \tilde{S}_{in}(V(t)) - S(t) \geq 0$ para $t \geq 0$. \square

En particular, si $S_{in}(t)$ es constante las condiciones del lema se cumplen. Consideraremos las tasas de crecimiento específico $\mu(S)$ del tipo ley Monod; y no monótona $\mu(S)$ con un único punto máximo Ley de Haldane.

A) LEY MONOD $\mu(S)$

Como es conocido en este caso $\mu(S)$ se caracteriza por el hecho de que $d\mu/dS > 0$ para cada $S \geq 0$. Una expresión típica para estas leyes (ver Figura 2.2) dada por

$$\mu(S) = \frac{\mu_0 S}{K_S + S} \quad (2.19)$$

donde $K_s (ML^{-3})$ es la constante Monod y $\mu_0 (T^{-1})$ es la tasa de crecimiento máximo. Este modelo es adecuado cuando el sustrato no inhibe la actividad de la biomasa.

Teorema 48. Sea $\mu(S)$ positivo (es decir, $\mu(S) > 0$ para $S > 0$), $\mu(0) = 0$, tal que $\mu(S) \leq M$ para cada $S > 0$ y para alguna constante positiva M , continuamente diferenciable, y estrictamente monótona creciente, (es decir, $d\mu/dS > 0$ para cada $S \geq 0$). Si (H1) se cumple entonces el problema de tiempo óptimo para el sistema (2.11) tiene solución diferenciadas de forma única por la ley de control.

$$F_{in} = \begin{cases} 0, & \text{si } V = V_f, \\ F_{\max}, & \text{si } V < V_f, \end{cases} \quad (2.20)$$

y la reacción está terminada si $(V = V_f) \wedge (S \leq S_{\min})$.

Demostración: De (H1) se deduce que no existe un punto del conjunto $\{S > \tilde{S}_{in}(V)\}$ en el conjunto alcanzable $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$. Puesto que $\mu(S)$ es estrictamente monótona creciente tenemos que el signo de la función $\omega(x)$ (ver (2.18)) es negativo en todos los puntos del conjunto alcanzable (a excepción del borde derecho $\phi(t, F_{\max}, x_0)$). Según el método de Green la única trayectoria global y óptima consiste de dos arcos:

(i) En primer lugar, el arco $\phi(t, F_{\max}, x_0)$ será seguido hasta que $V = V_f$ se alcance,

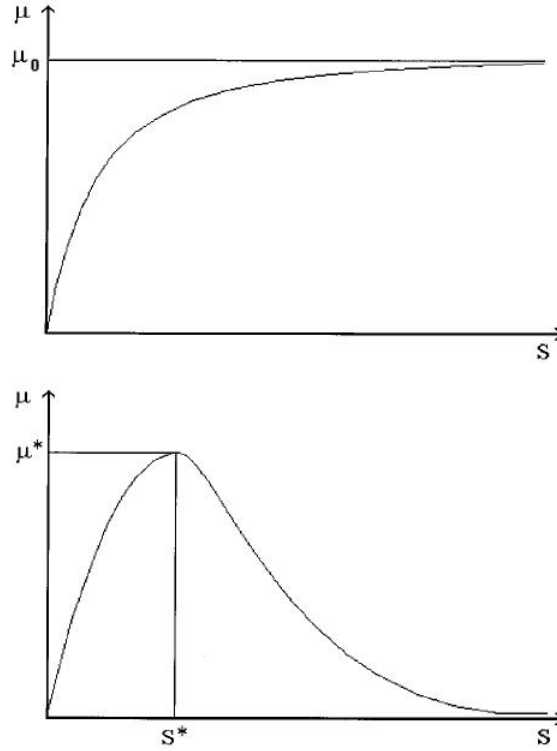


Figure 2.2: Arriba: tasa de crecimiento específico, ley de Monod. Abajo: ley Haldane

- (ii) Si la concentración de sustrato es aún más grande de lo necesario, es decir, $S > S_{\min}$, entonces el arco de trayectoria correspondiente a $\phi(-t, 0, X_f)$ debe seguirse (hacia atrás) hasta que el conjunto X_f sea encontrado.

La ley de control F_{in} , necesaria para obtener esta trayectoria, se puede expresar como en (2.20), y su unicidad está garantizada por el hecho de que $\Delta(x) \neq 0$ en la trayectoria. \square

Observación 49. Para la aplicación de la ley de control (2.20) es necesario medir el volumen del tanque de V , determinar el final de la fase de llenado, y la concentración de sustrato S , para decidir el final de la fase de reacción, es decir, cuando S_{in} se ha alcanzado.

B) LEY HALDANE

El prototipo para la clase de funciones de crecimiento no monótonas es la ley Haldane (ver Figura 2.2), y está descrita por la ecuación

$$\mu(S) = \frac{\mu_0 S}{K_s + S + S^2/K_i} \quad (2.21)$$

donde K_s (ML^{-3}) indica la constante de afinidad, K_i (ML^{-3}) es la constante de inhibición, y μ_0 (T^{-1})

es la tasa de crecimiento máximo. El valor máximo de la tasa de crecimiento específico μ^* para la concentración de sustrato S^* es característico de la ley Haldane.

Este tipo de tasas de crecimiento específicas son típicos para procesos en los que el sustrato es una sustancia tóxica y, para las concentraciones grandes, inhibe la actividad de la biomasa [9],[88]. Este es el caso en el tratamiento de las aguas residuales industriales.

El siguiente teorema establece la solución del problema de control de tiempo óptimo para una clase genérica de tasas de crecimiento específicas del tipo de Haldane.

Teorema 50. *Sea $\mu(S)$ positivo (es decir, $\mu(S) > 0$ para $S > 0$), $\mu(0) = 0$, limitada y continuamente diferenciable. Además sea $\mu(S)$ tal que $d\mu/dS > 0$ hasta el punto S^* , donde se alcanza el valor máximo μ^* , y para $S > S^*$ la función cumple $d\mu/dS < 0$. Si (H1) se cumple, $\tilde{S}_{in}(V) \geq S^*$ para $V_0 \leq V \leq V_f$, $S_{\min} \leq S^*$ y $F_{\sin} \leq F_{\max}$, entonces el problema de control de tiempo óptimo para el sistema (2.11) tiene solución determinada única por la ley de control:*

$$F_{in}^* = \begin{cases} (1) \text{ Si } V = V_f \text{ entonces } F_{in} = 0 \text{ hasta } S \leq S_{\min}, \text{ luego se detiene} \\ (2) \text{ Si } V < V_f \text{ y } S = S^* \text{ entonces } F_{in} = F_{\sin} \text{ hasta } V = V_f, \text{ luego vamos a (1)} \\ (3) \text{ Si } V < V_f \text{ y } S > S^* \text{ entonces } F_{in} = 0 \text{ hasta } S = S^*, \text{ luego vamos a (2)} \\ (4) \text{ Si } V < V_f \text{ y } S < S^* \text{ entonces } F_{in} = F_{\max} \text{ hasta } S = S^*, \text{ luego vamos a (2)} \\ \text{o hasta } V = V_f, \text{ entonces vamos a (1)} \end{cases} \quad (2.22)$$

donde F_{\sin} es la función de control tal que $S = S^*$, es decir,

$$F_{\sin} = \frac{\mu^* V X}{Y (\tilde{S}_{in}(V) - S^*)} \quad (2.23)$$

Demostración: Desde (H1) se deduce que no existe un punto del conjunto $\{S > \tilde{S}_{in}(V)\}$ en el conjunto alcanzable $\mathcal{A}(x_0) \cap \mathcal{A}(X_f)$. Puesto que $\mu(S)$ es monótona creciente hasta S^* y luego monótonamente decreciente, la función $\omega(x)$ (ver (2.18)) es negativa para $S < S^*$, cero para $S = S^*$, y positiva para $S > S^*$ (excepto en la frontera derecha $\phi(t, F_{\max}, x_0)$), (ver Figura 2.3). Según el método de Green la trayectoria única, global y óptima consiste en un máximo de tres arcos. Ellos se describirán en función de la posición del punto inicial de x_0 . A saber:

- 1) Si $V_0 = V_f$: La trayectoria $\phi(-t, 0, X_f)$ será seguida (atrás) hasta el punto final $S = S_{\min}$, que será alcanzado.
- 2) Si $(V_0 < V_f) \wedge (S_0 > S^*)$: La trayectoria óptima consiste en tres arcos: (ver Figura 2.3)
 - (a) Seguir el arco trayectoria $\phi(t, 0, x_0)$ hasta $S = S^*$,
 - (b) luego seguir la trayectoria de $\phi(t, F_{\sin}, [S^*, V_0])$, que se mantiene en $S = S^*$, hasta que el tanque este lleno $V = V_f$. Esto es posible ya que $F_{\sin} \leq F_{\max}$.

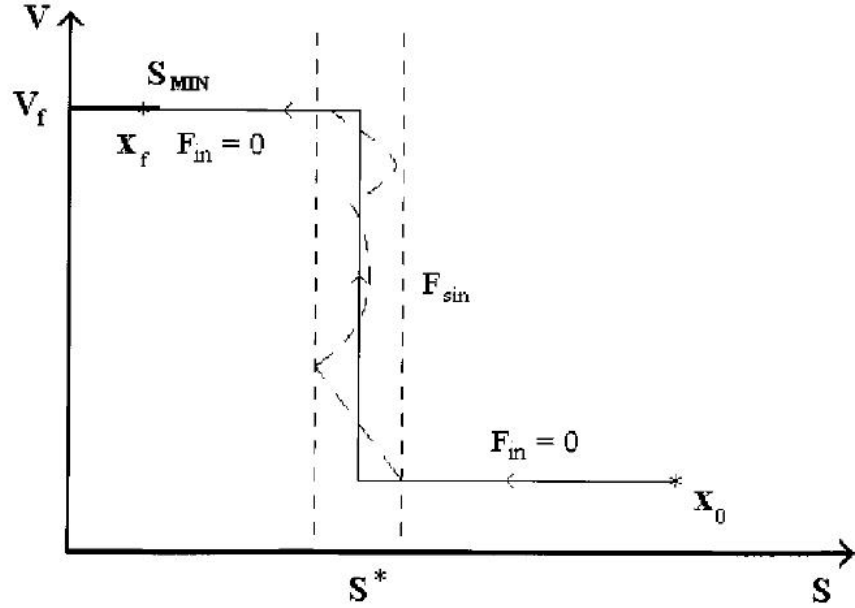


Figure 2.3: Trayectoria de tiempo óptima para una función de tipo Haldane (-); posible trayectoria de la ley de control feedback (-)

(c) Si la concentración de sustrato es aún más grande que la requerida ($S > S_{\min}$), la trayectoria $\phi(t, 0, [S^*, V_f])$ será seguida hasta $S = S_{\min}$.

3) Si $(V_0 < V_f) \wedge (S_0 < S^*)$ el tiempo de la trayectoria óptima es: $\phi(t, F_{\max}, x_0)$ hasta $S = S^*$ (en este caso, vaya al paso (ii) (b)) o $V = V_f$ (vaya al paso (ii) (c)).

El control F_{in} , es necesario obtenerlo de todas estas trayectorias, que pueden ser expresadas como en (2.22), su unicidad está garantizada por el hecho de que $\Delta(x) \neq 0$ en la trayectoria, y su admisibilidad está asegurada por la hipótesis que $F_{\sin} \leq F_{\max}$. Notemos que, F_{\sin} es la función de control que hace que $S = S^*$, el cual es un arco singular de la trayectoria de la ecuación (2.7). Haciendo $dS/dt = 0$ se puede obtener la expresión F_{\sin} por (2.23). \square

Observación 51. La ley de control (2.22) puede tener un arco singular.

2.2 Proceso para el tratamiento de agua en un bioreactor SBR

En ésta sección se presentan dos estrategias de control optimal desarrollado para reactores secuenciales (SBR), el primero es realizar tanto la eliminación de carbono orgánico y de nitrógeno de las aguas residuales lácteas mientras que el segundo trata aguas residuales tóxicas. Las leyes de control propuestas se basan en modelos que han sido validados con datos reales adquiridos en dos reales plantas biológicas piloto de SBR, [57].

En primer lugar, desarrollar un algoritmo para el control óptimo del SBR en presencia de un régimen de reacción, y en segundo desarrollar una estrategia de control óptimo de tiempo para el control de aeróbico SBR con capacidades de carbono y de eliminación de nitrógeno.

Estas leyes de control basadas en modelos se derivan directamente de los modelos propuestos en [58]. También tienen en cuenta la información acerca de la medición directa (a través de los sensores de hardware) presentado en [71] y, sobre la medición indirecta (a través de sensores de software), [27]. Debido al tipo de operación (que es un proceso por lotes), el control óptimo permite optimizar: i) la estrategia de alimentación mediante la distribución de la alimentación con el tiempo, con el fin de evitar la acumulación de sustancias tóxicas y / o sustancias inhibidoras en los casos de efluentes tóxicos y ii) las duraciones de tiempo de fase aeróbicas y anóxicas con el fin de minimizar el tiempo total de reacción en el caso de carbono y la eliminación de nitrógeno.

El objetivo del control es calcular la secuencia de conmutación (aerobio / anóxico) y los instantes de conmutación correspondientes de tal manera que cualquier punto inicial en el conjunto alcanzable alcanza el conjunto objetivo (definido como el conjunto de concentraciones tales que $S_1 < S_{1N}$, $S_2 < S_{2N}$ y $S_3 < S_{3N}$) donde S_1 es el soluble, S_2 es la concentración de nitrógeno de amonio, S_3 la concentración de nitrito de amonio + nitrato y S_{1N} , S_{2N} y S_{3N} son las normas de rechazo normativas.

El control optimal de tiempo mínimo está basado en un modelo simple. Este modelo se da a conocer brevemente a continuación. Una vista esquemática del proceso disponible se presenta en la Figura 2.4

El tanque del reactor tiene una forma cilíndrica. Sus dimensiones son de 50 cm y 130cm de altura, con un volumen total de 255L. Está equipado con una bomba de caudal variable para llenar el reactor y una válvula controlada para retirar el efluente y los lodos en exceso. El aire se utiliza para la aireación y el mezclado. Su flujo se controla por un medidor de flujo.

El reactor se hace funcionar a una temperatura ambiente de laboratorio de 20°C. Cada duración del

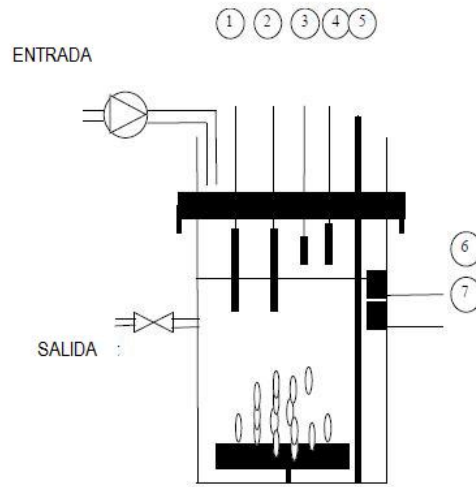


Figure 2.4: Vista esquemática del proceso

ciclo es de 24 horas. Más específicamente, las fases de reacción se dividen en 2 períodos. En cada una, se añade la mitad del volumen total diario influente (25 litros). Una vista esquemática de los modos de funcionamiento se muestra en la Figura 2.5

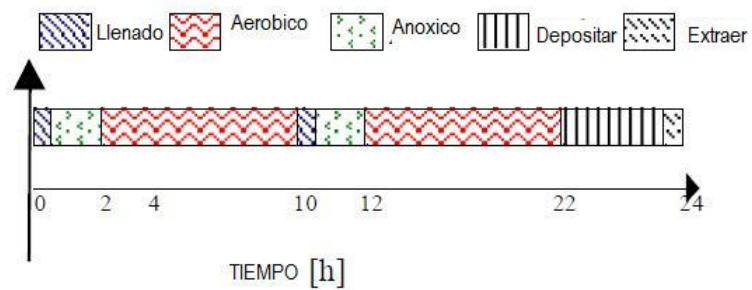
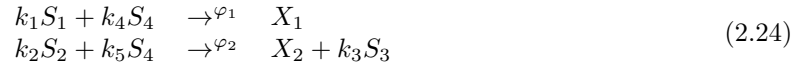


Figure 2.5: Vista esquemática de las condiciones aireadas clásica alternantes

Debido a que son tratados tanto el carbono y el nitrógeno, se necesitan dos fases específicas: aeróbico (presencia de oxígeno) y anóxico (sin oxígeno, pero nitrito y nitrato). Durante la fase anóxica, el nitrito + nitrato del último ciclo son transformados en nitrógeno gaseoso. Este paso es realizado por bacterias heterotróficas que también necesitan carbono orgánico soluble para crecer. Cuando todo el nitrito-nitrato se ha eliminado, uno puede cambiar al modo aeróbico donde el nitrógeno de amonio se

ha transformado en nitrito y nitrato, mientras el carbono soluble restante sea removido.

A partir de ahora, sólo nos concentramos en lo que sucede durante la fase aeróbica. El esquema de reacción de la fase aeróbica es la siguiente,



donde X_1 : son microorganismos Heterotrofos (mg/l), X_2 : microorganismos Autotrofos (mg/l), S_1 : Carbón orgánico ($mg\ COD/l$), S_2 : nitrógeno de amonio ($mg\ N - NH_4/l$), S_3 : Nitratos/Nitritos nitrógeno ($mg\ N - NO_3/l + mg\ N - NO_2/l$), S_4 : oxígeno disuelto ($mg\ O_2/l$).

Este esquema sintético significa que S_1 y S_2 son degradados por X_1 y X_2 , respectivamente, con las tasas de φ_1 y φ_2 en la presencia de S_4 . En otras palabras, el populante S_1 sirve como una base para el crecimiento de X_1 mientras que S_2 es transformado en S_3 por X_2 .

Teniendo en cuenta el esquema de reacción anterior, podemos aplicar el principio de balance de masa para determinar el modelo de espacio de estado de la fase aeróbica, (Bastin et al 1990):

$$\dot{X}_1 = \mu_1 (S_1, S_4) X_1 \quad (2.25)$$

$$\dot{X}_2 = \mu_2 (S_1, S_4) X_2 \quad (2.26)$$

$$\dot{S}_1 = -k_1 \mu_1 (S_1, S_4) X_1 \quad (2.27)$$

$$\dot{S}_2 = -k_2 \mu_2 (S_1, S_4) X_2 \quad (2.28)$$

$$\dot{S}_3 = k_3 \mu_2 (S_1, S_4) X_2 \quad (2.29)$$

$$\dot{S}_4 = -k_4 \mu_1 (S_1, S_4) X_1 - k_5 \mu_2 (S_1, S_4) X_2 + K_L (S_4^{\max} - S_4) \quad (2.30)$$

con

$$\begin{array}{l} \mu_1 = \mu_{1 \max} \frac{S_1}{K_{S_1} + S_1} S_4; \\ \mu_2 = \mu_{2 \max} \frac{S_2}{K_{S_2} + S_2} S_4. \end{array} \quad (2.31)$$

Como puede verse, las tasas de crecimiento específico en la fase aeróbica, μ_1 y μ_2 , son proporcionales a la concentración de oxígeno disuelto, S_4 , en el reactor en lugar de la clásica expresión $\frac{S_4}{K_0 + S_4}$ propuesto en (Henze y col., 1987). Ello es esencial porque los experimentos disponibles han sido realizados con una concentración de oxígeno no limitativo, S^* siendo el promedio de residual COD en el reactor [57].

Además, si se supone que el oxígeno no es limitante, entonces la ecuación diferencial que describe la variación en el tiempo del oxígeno se puede omitir. Usando el principio de conservación de balance de masas en un reactor discontinuo, es posible demostrar que el sistema (2.25) - (2.30) se puede reducir al siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} \dot{S}_1 \\ \dot{S}_2 \\ \dot{S}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(S_1) \\ g(S_2) \\ -\alpha g(S_2) \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} f(S_1) h(S_3) \\ 0 \\ \beta f(S_1) h(S_3) \end{bmatrix} (1-u) \quad (2.32)$$

el cual a su vez puede escribirse en la siguiente forma compacta:

$$\begin{cases} \dot{Z} = F(Z) + G(Z)u \\ Z_0^T = [S_1(0) \ S_2(0) \ S_3(0)] \end{cases} \quad (2.33)$$

donde $Z^T = [S_1 \ S_2 \ S_3]$ y donde todas las funciones y parámetros dependen del modelo original (2.25) a (2.31).

La primera tarea consiste en caracterizar el conjunto alcanzable, que está caracterizando el conjunto de condiciones iniciales para las que existe una secuencia de control, definiendo así una trayectoria, que mueve el punto inicial hacia el final definido como $\{S_1 < S_{1N}, S_2 < S_{2N}, S_3 < S_{3N}\}$, [58].

DISEÑO DEL CONTROL

Ahora, suponga que $X_1(0) \neq 0$ and $X_2(0) \neq 0$. Definimos

$$\begin{aligned} \Omega_A &= \{Z \in \mathbb{R}^{3+} / S_2 < \alpha^{-1} S_{3N}, S_3 < \beta S_1 - \alpha S_2 + S_{3N}\}, \\ \Omega_B &= \{Z \in \mathbb{R}^{3+} / S_2 > \alpha^{-1} S_{3N}, S_3 < S_1 - \alpha S_2 + \beta(S_3 - S_{3N})\} \end{aligned}$$

con $\alpha = k_{32}/k_{22}$ y $\beta = k_{33}/k_{11}$.

Proposición 52. *El conjunto alcanzable está dada por:*

$$\Omega = \Omega_A \cup \Omega_B$$

Demostración: cf. [59]. □

Gráficamente, el conjunto alcanzable está representado en la figura 2.6.

CONTROL OPTIMAL

Una vez que se ha comprobado que existe una trayectoria que nos permite conducir el estado hacia el conjunto final, es de interés para calcular las medidas de control (conmutación instantes entre las fases aeróbicas y anóxicas) con el fin de hacerlo. Dentro del conjunto de todas las posibles políticas de conmutación y con el fin de mantener el problema tratable (en la práctica, no es posible cambiar demasiado esto a menudo), se decidió limitar el cálculo a la búsqueda de secuencias de control que comprenden sólo a lo más 2 cambios. De hecho, hay que hacer notar aquí que cualquier condición

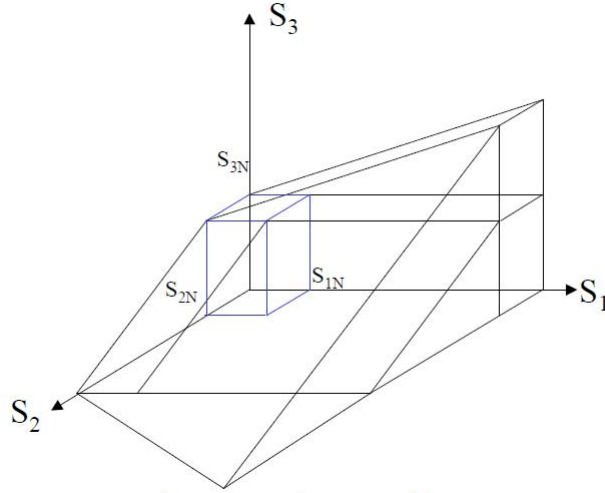


Figure 2.6: El conjunto alcanzable

inicial dentro del conjunto alcanzable puede ser conducido hacia el conjunto final en la aplicación de la secuencia específica {aeróbico, anóxico, aeróbico}, [58].

El problema de control óptimo puede ser formulado como la búsqueda de dos instantes de conmutación t_1 and t_2 tal que cualquier condición inicial en el conjunto alcanzable es impulsado hacia el conjunto final en un tiempo mínimo:

$$T = t_{aerob}^1 + t_{anox} + t_{aerob}^2$$

A menos que la solución óptima sea $u = 0$ (lo que quiere decir que casi no hay nitrógeno amoniacal (S_2) en el efluente, entonces, cuando $S_2(t_0) < S_{2N}$, dos casos distintos pueden surgir: o bien la trayectoria óptima alcanza primero el plano definido por $S_1 = S_{2N}$. Ambas concentraciones de S_1 y S_2 deben verificar $S_1(t_f) < S_{1N}$ y $S_2(t_f) < S_{2N}$, el problema puede reescribirse como la búsqueda de t_1 y t_2 tal que:

$$t_{aerobic} = \int_{t_0}^{t_1} dt + \int_{t_2}^{t_f} dt = \max \left(\left(\int_{S_1(t_0)}^{S_1(t_f)} \frac{ds}{f(s)} + \int_{S_1(t_2)}^{S_{1N}} \frac{ds}{g(s)} \right), \left(\int_{S_2(t_0)}^{S_2(t_f)} \frac{ds}{f(s)} + \int_{S_2(t_2)}^{S_{2N}} \frac{ds}{g(s)} \right) \right)$$

sea mínimo.

Para resolver el caso general (encontrar los instantes de conmutación por t_1 y t_2 de la secuencia de control aeróbico / anóxico / aeróbico), el principio del máximo es utilizado primeramente. Utilizando este principio, es posible demostrar que existe un plano de conmutación que define el instante de conmutación t_2 . Con el fin de calcular t_1 , un problema de optimización puede ser resuelto numéricamente: el mismo corresponde a la búsqueda de t_1 que minimice el período de tiempo de fase anóxica, durante las fases anóxicas, $u = 0$. Por lo tanto, S_2 es constante mientras que $S_1(t)$ y $S_3(t)$

están relacionadas linealmente en referencia a las relaciones obtenidas a partir de la integral primera $\frac{dS_3}{dt} = \beta \frac{dS_1}{dt}$. Para parametrizar el período de tiempo de la fase anóxica, introducimos la siguiente variable: $\theta = S_1(t_1) - S_1 = \frac{1}{\beta}(S_3(t_1) - S_3)$ tal que $S_1 = S_1(t_1) - \theta$ y $S_3 = S_3(t_1) - \beta\theta$. Sea δ la variación de S_1 en la fase anóxica (es proporcional a la variación de S_3 en el mismo período). Esto está dado por $\delta = S_1(t_1) - S_1(t_2) = \frac{1}{\beta}(S_3(t_1) - S_3(t_2))$. El período de tiempo de la fase anóxica entonces está dado por:

$$t_{anox}(\delta, S_1^1, S_3^1) = \int_0^\delta \frac{1}{f(S_1^1 - \theta)} \frac{1}{h(S_3^1 - \beta\theta)} d\theta = \int L(\theta, S_1^1, S_3^1) d\theta$$

donde (S_1^1, S_2^1, S_3^1) es la solución del sistema (2.33) para $u = 1$ y $t = t_1$.

La interpretación biológica de la solución óptima es la siguiente. La cinética de eliminación de nitrógeno es muy lenta en comparación con la eliminación de carbono. Por lo tanto, el tiempo aeróbico requerido corresponde esencialmente a la eliminación de nitrógeno. Puesto que, el nitrógeno no es eliminado en la fase anóxica, la duración de la fase aeróbica no puede ser minimizado. Sólo se puede reducir el tiempo total del ciclo mediante la reducción del tiempo de la fase anóxica.

2.3 Tiempo mínimo de un bioproceso

Los biorreactores están diseñados para operar en un punto de equilibrio funcional, el cual es determinado por los ingenieros en orden a optimizar algunos criterios de costo/producción, [17]. El punto es conocer si es o no es posible determinar analíticamente la estrategia de control que lleva el proceso desde una condición inicial dada hacia el punto de equilibrio funcional en un tiempo mínimo. Los ingredientes principales de nuestro enfoque son las condiciones derivadas del Principio de Pontryagin en el caso de problemas de tiempo mínimo [78], [83], y el análisis de una combinación lineal de las variables de estado del sistema.

Como es bien conocido el modelo no lineal para la interacción de los nutrientes y microorganismos en un proceso de fermentación continua [17], está determinado por el sistema:

$$\dot{s} = (u - s)D - \mu(s) \frac{x}{k} \quad (2.34)$$

$$\dot{x} = (\mu(s) - D)x \quad (2.35)$$

con $s(0) = s_0$, $x(0) = x_0$, $s_0 > 0$, $x_0 > 0$, $t \geq 0$. Las variables s y x representan el sustrato y concentración de biomasa, respectivamente, y u es la velocidad de flujo de sustrato de entrada / salida en tiempo t . La interacción se caracteriza por D , el parámetro k es el coeficiente de rendimiento y

$\mu(s)$ es la función de crecimiento descrito por $\mu(s) = ms/(a+s)$, donde m es la tasa máxima tasa de crecimiento específico y a es la contante de Monod, ver [17].

El caudal de la velocidad del sustrato de entrada/salida, que es la variable de control, es positivo y acotado por algún valor predefinido debido a las características físicas del proceso. Esto es,

$$0 \leq u \leq u_m \quad \text{tal que} \quad u_m > \frac{aD}{m-D}, \quad m > D. \quad (2.36)$$

El problema que abordaremos en esta sección consiste en: determinar la estrategia de control para que a través del sistema (2.34)-(2.35) las condiciones iniciales podemos llegar, hasta el punto de funcionamiento del sistema, en el menor tiempo posible. En otras palabras, minimizar la fase transitoria. Los estados estacionarios de equilibrio bajo la acción del ingreso u_m se obtienen igualando a cero las derivadas en (2.34)-(2.35). Estos puntos de equilibrio son: el equilibrio $\bar{s} = u_m$, $\bar{x} = 0$, y el punto de equilibrio funcional $\bar{s} \geq 0$, $\bar{x} \geq 0$ donde

$$\bar{s} = \frac{aD}{m-D}, \quad \bar{x} = k(u_m - \bar{s}) = k\left(u_m - \frac{aD}{m-D}\right) \quad (2.37)$$

CONTROL OPTIMAL

En el caso del proceso biotecnológico descrito por (2.34) - (2.35), desde el Principio del máximo de Pontryagin [78] aplicado al problema de tiempo mínimo se obtiene que el hamiltoniano H asociado está dado por

$$H(\psi_1, \psi_2, s, x, u) = \psi_1 \left((u-s)D - \frac{mxs}{k(a+s)} \right) + \psi_2 \left(\frac{ms}{(a+s)} - D \right) x, \quad (2.38)$$

donde ψ_1 y ψ_2 son las variables adjuntas. Además, desde el PMP sigue que si u_{opt} es el control optimal, entonces

$$H(\psi_1, \psi_2, s, x, u_{opt}) \geq H(\psi_1, \psi_2, s, x, u)$$

y el sistema original junto con las ecuaciones adjuntas, está dado por

$$\dot{s} = \frac{\partial H}{\partial \psi_1} = (u-s)D - \frac{mxs}{k(a+s)} \quad (2.39)$$

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial \psi_2} = \left(\frac{ms}{a+s} - D \right) x \quad (2.40)$$

$$\dot{\psi}_1 = -\frac{\partial H}{\partial s} = \left(D + \frac{mxa}{k(a+s)^2} \right) \psi_1 - \left(\frac{mxa}{(a+s)^2} \right) \psi_2 \quad (2.41)$$

$$\dot{\psi}_2 = -\frac{\partial H}{\partial x} = \left(\frac{ms}{k(a+s)} \right) \psi_1 - \left(\frac{ms}{a+s} - D \right) \psi_2 \quad (2.42)$$

Las condiciones iniciales y finales son,

$$s(t_0) = s_0 \quad s(t_f) = \bar{s} \quad x(t_0) = x_0 \quad x(t_f) = \bar{x}$$

Notemos que, a partir (2.41) y (2.42) se tiene que $\Psi(t) = \frac{\psi_1(t)}{k} - \psi_2(t)$ Así

$$\dot{\Psi}(t) = D\Psi(t) + \left(\frac{mx(t)a}{k(a+s(t))^2} - \frac{ms(t)}{a+s(t)} \right) \Psi(t) \quad (2.43)$$

y desde (2.43) sigue que

$$\Psi(t) = \Psi_0 e^{\int_{t_0}^t \left\{ D + \frac{mx(\zeta)a}{k(a+s(\zeta))^2} - \frac{ms(\zeta)}{a+s(\zeta)} \right\} d\zeta}$$

donde $\Psi_0 = \frac{\psi_1(0)}{k} - \psi_2(0)$. Por lo tanto,

$$\text{sign}\{\Psi(t)\} = \text{sign}\{\Psi_0\} \quad (2.44)$$

Por otra parte,

$$\dot{\psi}_1(t) = \psi_1(t) D + \frac{mx(t)a}{k(a+s(t))^2} \Psi(t) \quad (2.45)$$

De aquí, después de algunos cálculos tenemos,

$$\begin{aligned} \psi_1(t) &= e^{Dt} \psi_1(t_0) + \int_{t_0}^t e^{D(t-\zeta)} \frac{mx(\zeta)a}{(a+s(\zeta))^2} \Psi(\zeta) d\zeta \\ &= e^{Dt} \left(\psi_1(t_0) + \text{sgn}(\Psi(\zeta)) \int_{t_0}^t e^{-D\zeta} \frac{mx(\zeta)a}{(a+s(\zeta))^2} |\Psi(\zeta)| d\zeta \right) \end{aligned}$$

Sustituyendo (2.44), se obtiene

$$\psi_1(t) = e^{Dt} \left(\psi_1(t_0) + \text{sgn}(\Psi_0) \int_{t_0}^t e^{-D\zeta} \frac{mx(\zeta)a}{(a+s(\zeta))^2} |\Psi(\zeta)| d\zeta \right)$$

La integral es monótona creciente, por lo tanto, $\psi_1(t)$ solo tiene un cambio de signo.

El Hamiltoniano H dado en (2.38) alcanza su máximo cuando

$$u_{opt} = \begin{cases} u_m, & \psi_1(t) > 0 \\ 0, & \psi_1(t) < 0 \end{cases} \quad (2.46)$$

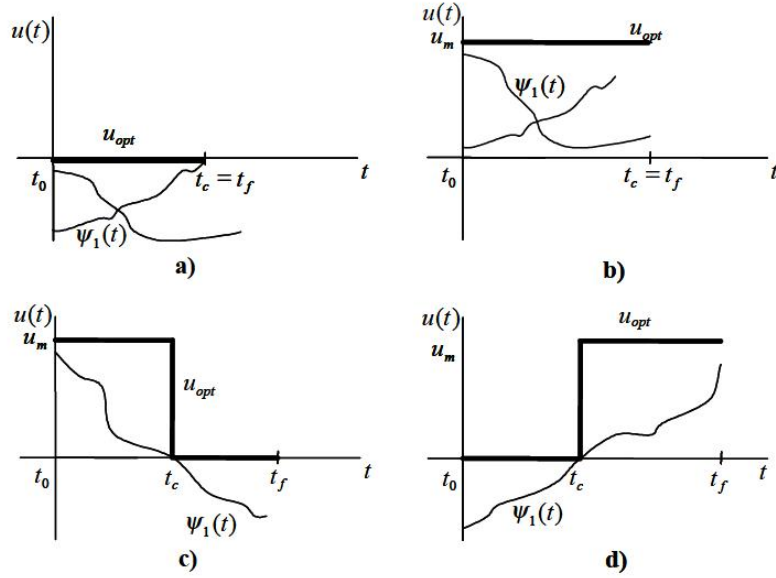


Figure 2.7: Posibles formas de $\psi_1(t)$ y controles admisibles

Se deduce de este hecho y (2.46) existen 4 posibles estrategias para el control, estas se representan en la figura 2.7.

ANÁLISIS DE LAS LEYES DE CONTROL ADMISIBLES

Se deduce de (2.34) y (2.35) que la nueva variable $z(t) = s(t) + \frac{x(t)}{k}$ se describe por la ecuación diferencial lineal

$$\dot{z}(t) = -Dz(t) + Du(t),$$

con condición inicial $z(t_0) = s(t_0) + \frac{x(t_0)}{k} = z_0$. La solución es

$$z(t) = e^{-D\zeta} z_0 + \int_{t_0}^t e^{-D(t-\zeta)} Du(\zeta) d\zeta \quad (2.47)$$

y las condiciones finales estan dadas por el punto de equilibrio funcional

$$z(t_f) = s(t_f) + \frac{x(t_f)}{k} = \frac{aD}{m-D} + \frac{k}{k} \left(u_m - \frac{aD}{m-D} \right) = u_m,$$

Estas consideraciones llevan al siguiente análisis:

Caso a) $t_c = t_f$ y $u(t) \equiv 0$ para $t \in [t_0, t_f]$.

En este caso el sistema se estabiliza en el punto de lavado ($s(t_f) = 0, x(t_f) = 0$). Esta no es una óptima estrategia.

Caso b) $t_c = t_0$ y $u(t) = u_m$ para $t \in [t_0, t_f]$.

En este caso, si $s_0 + x_0/k = z_0 = u_m$, entonces $u(t) = u_m$ es un control admisible.

Caso c) $t_0 \leq t_c \leq t_f$ y $u_{opt}(t) = \begin{cases} u_m, & t \in [t_0, t_c) \\ 0, & t \in [t_c, t_f] \end{cases}$

En este caso, se sigue de (2.47) que

$$\begin{aligned} z(t_f) &= e^{-D(t_f-t_c)}e^{-Dt_c}z_0 + Du_m \int_{t_c}^{t_f} e^{-D(t_f-\zeta)} d\zeta \\ &= e^{-Dt_c}z_0 + u_m - u_m e \end{aligned} \quad (2.48)$$

donde $t_c = \frac{1}{D} \ln(z_0/u_m)$. Por lo tanto, si $z_0 \geq u_m$, de aquí sigue que $t_c = \frac{1}{D} \ln(z_0/u_m)$ y si $z_0 \leq u_m$, entonces $t_c = 0$.

Resumiendo, tenemos:

Teorema 53. *Considere el biorreactor descrito por (2.34)-(2.35) con condición inicial (s_0, x_0) . El control que lleva el sistema hacia el equilibrio funcional (2.37) en tiempo mínimo, es descrito como:*

Si $s_0 + \frac{x_0}{k} \leq u_m$ entonces $u_{opt}(t) = u_m$ para $t \in [t_0, t_f]$.

Si $s_0 + \frac{x_0}{k} \geq u_m$ entonces $u_{opt}(t) = \begin{cases} 0, & t \in [t_0, t_c) \\ u_m, & t \in [t_c, t_f] \end{cases}$

donde $t_c = \frac{1}{D} \ln(z_0/u_m)$

Observación 54. *El tiempo final no se puede determinar analíticamente, esto no es crítico desde un punto de vista práctico porque el control óptimo es tal que $u(t) = u_m$, y permanecerá en el punto operativo funcional si $u(t) = u_m$ para $t \geq t_f$; sin embargo es posible definir numericamente el tiempo final t_f .*

Chapter 3

Estabilidad en el Quimiostato

El trabajo de Paul Waltman relacionado con el quimiostato, ha tenido un gran impacto en biología de las poblaciones, la ecología y la bioingeniería. Ha motivado e inspirado el trabajo de muchos otros autores, incluyéndonos a nosotros.

Los Quimiostatos juegan un papel clave en bioingeniería y biología de poblaciones. El quimiostato es un tipo de biorreactor en el que se añade continuamente un medio fresco y líquido de cultivo que se retira continuamente. Por lo tanto, el volumen de cultivo se mantiene constante. Tiene muchas aplicaciones industriales, tales como la producción comercial de organismos alterados genéticamente. Modelos de quimiostato también juegan un papel en la reproducción de forma experimental y comprenden el comportamiento de la interacción de especies en los lagos y plantas de tratamiento de aguas residuales, [90],[38],[39],[45],[46],[66],[91],[98] para una visión general de la literatura quimiostato y su papel en la ecología microbiana. El principio de exclusión competitiva [81] afirma que en quimiostatos bien mezclados con un sustrato limitante, una única especie puede persistir de forma genérica. Esto motivó una gran cantidad de literatura que explica la discrepancia entre el principio de exclusión competitiva, y el hecho de que múltiples especies competidoras típicamente sobreviven en la naturaleza en un sustrato limitante [11],[21],[22],[23],[24],[76],[87].

3.1 Competición de especies sobre el Quimiostato

Consideraremos un modelo matemático cuya dinámica yace sobre el Quimiostato. Los clásicos modelos sobre el quimiostato, toman en cuenta que la función que describe el crecimiento celular es un múltiplo constante de la captación de sustrato. La constante de proporcionalidad es llamada constante de

rendimiento del crecimiento. Aquí, suponemos que la constante que describe el rendimiento esta relajada, y en lugar de ello, suponemos que la relación entre la absorción y el crecimiento podría depender de la concentración de sustrato y ; por lo tanto el rendimiento es variable.

Analizamos la estabilidad de los puntos de equilibrio del modelo, consideramos la competenciación sobre el quimiostato por un único sustrato.

Consideramos primero que, la función que describe el proceso de crecimiento es monótona y segundo lugar es unimodal. En ambos casos, suponemos que uno de los competidores tienen una rentabilidad variable, y su absorción es descrita por una función unimodal. Sin embargo, la interpretación es diferente en cada caso. Establecemos una condición necesaria para la coexistencia fuerte y una condición suficiente que garantice la extinción de una o más especies.

Numerosos trabajos se ocupan del crecimiento de microorganismos en el quimiostato. La mayoría son originarios de la bioingeniería y la microbiología, donde el quimiostato encuentra una amplia variedad de aplicaciones, desde los estudios teóricos de las bacterias para el uso de bacterias en desechos biológicos, descomposición, y de purificación de agua [60, 4]. La literatura dedicada a la modelación sobre el quimiostato, parece que a pesar de los enfoques y aplicaciones son variadas, la mayoría de los modelos se basan en una relación simple entre dos procesos fundamentales, la absorción de nutrientes y el crecimiento celular. En particular, en la mayoría de los modelos se supone que estos procesos son proporcionales.

En la mayoría de los primeros modelos de crecimiento microbiano en el quimiostato, se asume un rendimiento constante, se supone que el crecimiento es una función monótona creciente de la concentración de sustrato. Sin embargo, para algunos organismos, altas concentraciones de sustrato puede ser perjudicial, fue señalado en 1925 por Briggs y Haldane [30], Ver también [44]. La inhibición se incorporó posteriormente a modelos de crecimiento bacteriano, [41, 97], [29, 43, 86]. Bajo el supuesto de rendimiento constante, los modelos matemáticos predicen que no puede haber oscilaciones sostenidas [10, 90, 85, 100]. Puesto que tales oscilaciones se han observado en los experimentos [3], [37], entonces es útil encontrar modelos que reproduzcan estas oscilaciones.

Con esto en mente, se exploran modelos que implican un rendimiento variable. En el caso de los experimentos por lotes, los autores en [101] muestran que las soluciones oscilatorias ocurren sólo si el rendimiento es una función de la concentración de sustrato y la célula. En cultivos continuos, esto no es necesario, y gran de los trabajos existentes se han centrado en la literatura en el supuesto de un rendimiento dependiente de sustrato. Diferentes explicaciones se pueden dar para esta dependencia, en

el caso de los reactores químicos el rendimiento se obtiene a partir de ecuaciones de balance de masa; para los reactores biológicos es más complicado [47].

Es una tarea difícil determinar qué parte de la dinámica se deriva de los procesos de más alto nivel que han sido modelos, y qué parte se deriva de la naturaleza de las hipótesis hechas en la absorción de nutrientes y el crecimiento celular. El objetivo de esta sección es explorar las dinámicas resultantes de las diferentes formas de modelar el rendimiento variable en el modelo del quimiostato.

Consideramos un modelo muy general del crecimiento de una sola especie sobre el quimiostato y restringimos nuestra atención a lo que todos estos modelos tienen en común. Mostramos que el comportamiento de modelos sobre quimiostato en el punto de equilibrio (de lavado) es genérico.

MODELO DE UNA ESPECIE SOBRE EL QUIMIOSTATO

El modelo considerado cuenta una relación más precisa entre el consumo y el crecimiento, fue desarrollado por los autores en [92]. Introducidos un coeficiente de respiración R . Señalando que cuando se considera la respiración el coeficiente de rendimiento observado Y_{obs} está dado por $1/Y_{obs} = 1/Y + R/\mu(S)$, donde Y es un coeficiente de rendimiento constante y $\mu(S)$ es la velocidad específica de crecimiento de los microorganismos. En [74, 75, 12] ha sido asumido que el crecimiento y la absorción se relacionan a través de una función lineal de la concentración de sustrato.

El siguiente modelo describe la dinámica sobre un Quimiostato en la cual una especie microbiológica con concentración (o biomasa) en tiempo t denotada por $x(t)$, consume un simple sustrato con concentración $S(t)$ en tiempo t , dado por el sistema, [48, 69, 90],

$$\frac{dS}{dt} = D(S^0 - S) - xu(S) \quad (3.1)$$

$$\frac{dx}{dt} = x(g(S) - D_1) \quad (3.2)$$

$$S(0) \geq 0, \quad x(0) \geq 0$$

donde u y g son funciones continuamente diferenciables, S^0 denota la concentración de sustrato en la alimentación de entrada y D denota la tasa de dilución. Asumimos que $D_1 > 0$, la interpretación más común para D_1 es que es la suma de la tasa de dilución y la tasa de mortalidad específica de especies. El sustrato es consumido por las células a razón de $u(S(t))$. Esto se traduce en un crecimiento de la biomasa celular en la razón $g(S(t))$. Suponemos que $u(S)$ satisface $u(0) = 0$, con esto, queremos decir que si no hay un sustrato en el medio ambiente, entonces no hay captación de sustrato. No modelamos el almacenamiento de nutrientes directamente y por lo tanto, en ausencia de sustrato, asumimos que

no existe crecimiento, de manera que $g(0) = 0$. De lo contrario, $u(S)$ y $g(S)$ son positivos para $S > 0$. Por último, suponemos que cada una de estas funciones sea monótona creciente o unimodal.

3.2 Estabilidad

3.2.1 Análisis local

En esta sección, analizaremos de estabilidad local de los puntos de equilibrio del sistema (3.1)–(3.2). Iniciamos, nuestro estudio con la siguiente proposición,

Proposición 55. $E^* \equiv (S^*, x^*) = \left(S^*, \frac{D(S^0 - S^*)}{u(S^*)} \right)$ donde S^* es cualquier solución de

$$g(S) = D_1 \quad (3.3)$$

es un punto de equilibrio positivo factible si, y sólo si, $S^* < S^0$.

En lo que sigue, restringimos nuestra atención a las funciones $u(S)$ y $g(S)$ que son, ya sea monótona creciente o inicialmente monótona creciente y unimodal. Por lo tanto, hay un máximo de dos valores de S que satisfacen (3.3), denotaremos estos valores por $\lambda, \mu \in \overline{\mathbb{R}}$, con $\lambda < \mu$. Adoptamos la convención que $\mu = \infty$ si (3.3) sólo tiene una solución, y $\lambda = \infty$ si (3.3) no tiene solución. Por lo tanto, S^* debe ser igual a cualquiera de los dos valores, λ or μ . Nos referimos a E^* como E_λ^* o E_μ^* cuando sea necesario para hacer la diferencia. Ver Figura 3.1.

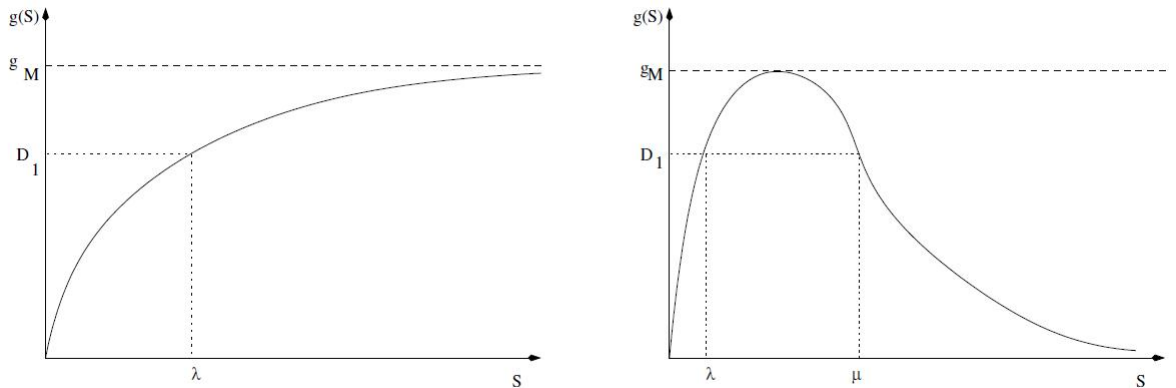


Figure 3.1: Definición de λ y μ , en el caso de: (a) crecimiento monótono ($\mu = \infty$);(b) crecimiento no monotonos .

No tenemos conocimiento de ninguna evidencia experimental de los procesos de crecimiento o de absorción limitada para un único sustrato que exhiba un comportamiento más complicado (como las

respuestas de dos jorobas). Un análisis similar para funciones más complicadas es aún posible, pero implica el tratamiento de más casos.

La matriz jacobiana del sistema (3.1)-(3.2) evaluada en un punto arbitrario (S, x) está dada por

$$\begin{bmatrix} -D - u'(S)x & -u(S) \\ g'(S)x & g(S) - D_1 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

Observación 56. *El punto $E_0 \equiv (S^0, 0)$, es un equilibrio del sustrato, y siempre existe.*

En particular, la matriz jacobiana evaluada en el punto de equilibrio, E_0 , viene dada por

$$\begin{bmatrix} -D & -u(S^0) \\ 0 & g(S^0) - D_1 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Proposición 57. *El punto de equilibrio E_0 , es localmente asintóticamente estable si $g(S^0) - D_1 < 0$.*

Por otro lado la matriz jacobiana evaluada en el equilibrio positivo, E^* , esta dada por:

$$\begin{bmatrix} -D - u'(S^*)x^* & -u(S^*) \\ g'(S^*)x^* & 0 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Así, $\det(J) = u(S^*)g'(S^*)x^*$ y $Tr(J) = -D - u'(S^*)x^*$. Puesto que D , $u(S)$ y x^* son positivos, por el criterio de Routh-Hurwitz, obtenemos el siguiente resultado.

Proposición 58. *Un equilibrio positivo factible E^* es localmente asintóticamente estable si las siguientes dos desigualdades se cumplen al mismo tiempo:*

$$g'(S^*) > 0, \text{ y } u'(S^*) > -\frac{u(S^*)}{S^0 - S^*} \quad (3.7)$$

La existencia de valores propios complejos (oscilaciones), se determina por la siguiente proposición, que sigue directamente desde el polinomio característico de (3.6).

Proposición 59. *La linealización de (3.1) - (3.2) acerca de un equilibrio positivo factible, E^* , tiene valores propios complejos si y sólo si:*

$$(D + u'(S^*)x^*)^2 < 4u(S^*)g'(S^*)x^*.$$

Esto implica que no hay oscilaciones en la vecindad de un equilibrio positivo E^* , si $g'(S^*) < 0$.

Proposición 60. *Los valores propios de la linealización (3.6) del sistema (3.1) - (3.2) entorno de un equilibrio positivo E^* , son puramente imaginarios si y sólo si,*

$$g'(S^*) > 0, \text{ y } u'(S^*) = -\frac{u(S^*)}{S^0 - S^*} \quad (3.8)$$

3.2.2 Análisis global

Iniciamos nuestro estudio sobre la estabilidad global, con algunos lemas técnicos.

Lema 61. *Tanto el cono no negativo y el interior del cono no negativo son invariantes positivamente bajo el flujo de (3.1) y (3.2).*

Demostración: Note que, $\{S \geq 0, x = 0\}$ es invariante bajo el flujo de (3.1) y (3.2). También, para $S = 0$ y $x > 0$, $S' = DS^0 > 0$, es decir, el campo vectorial apunta estrictamente hacia el interior. \square

Lema 62. *Soluciones de (3.1) y (3.2) están acotadas para todo $t \geq 0$.*

Lema 63. *Para cualquier $\epsilon > 0$, existe $T_\epsilon \geq 0$ tal que $S(t) \leq S^0 + \epsilon$ para todo $t \geq T_\epsilon$. Además, si $\lambda < S^0$, $g(S) > D_1$ para $S \in (\lambda, S^0]$ y $x(0) > 0$, entonces existe T tal que $S(t) < S^0$ para todo $t > T$.*

Demostración: Primero supongamos que $x(0) = 0$, entonces, se sigue que $S(t)$ converge a S^0 .

Supongamos ahora que $x(0) > 0$, si existe $T \geq 0$ tal que $S(T) = S^0$ entonces $S'(T) = -u(S(T))x(T) < 0$. Esto implica que si existe $\hat{t} \geq 0$ tal que $S(\hat{t}) \leq S^0$ entonces $S(t) < S^0$ para todo $t > \hat{t}$. Si $S(t) > S^0$ para todo $t \geq 0$, entonces $S'(t) < 0$ para todo $t > 0$. Por lo tanto, $S(t)$ converge a algún $\alpha \geq S^0$. Si $\alpha > S^0$, entonces $S'(t) < (S^0 - \alpha)D < 0$ para todo $t > 0$. Pero esto implica que, $S(t)$ converge a $-\infty$ cuando t tiende a ∞ , lo cual es una contradicción. Por lo tanto, $S(t) \leq S^0$ para todo t suficientemente grande o $S(t)$ converge a S^0 cuando $t \rightarrow \infty$.

Supongamos ahora que $\lambda < S^0$, $g(S) > D_1$ para $S \in (\lambda, S^0]$, y $x(0) > 0$. Supongamos que $S(t) > S^0$ para todo $t > 0$, entonces por la continuidad de $g(S)$ existe $\Delta > S^0$ tal que $g(S) > D_1$ para todo $S \in [S^0, \Delta]$ y existe $T_\Delta > 0$ tal que $S^0 < S(t) < \Delta$ para todo $t > T_\Delta$. Definiendo $\bar{g} \equiv \min_{S \in [S^0, \Delta]} g(S)$, tenemos $\bar{g} > D_1$. Luego por el Lema 61, $x(t) > 0$ para todo $t > 0$, $x'(t) / x(t) > (\bar{g} - D_1) > 0$, para todo $t > T_\Delta$. Integrando ambos lados de T_Δ a ∞ , resulta que $x(t) \rightarrow \infty$. Pero, por el Lema 62, $x(t)$ es acotada, así llegamos a una contradicción. \square

Ahora, estableceremos algunos resultados relacionados a la estabilidad global de los puntos de equilibrio del sistema

Teorema 64. *Si $S^0 \leq \lambda$, el punto de equilibrio E_0 de (3.1) - (3.2) es globalmente asintóticamente estable.*

Demostración: Puesto que el cono negativo es invariante y todas las soluciones son acotadas, el resultado sigue inmediatamente desde un análisis estandar del retrato de fase. \square

Teorema 65. Si $\lambda < S^0$, $g'(\lambda) > 0$, $g(S^0) > D_1$, $u'(\lambda) > -\frac{u(\lambda)}{S^0 - \lambda}$ y $1 - \frac{u(S)(S^0 - \lambda)}{u(\lambda)(S^0 - S)}$ tiene exactamente un cambio de signo para $S \in (0, S^0)$, entonces el punto de equilibrio $E_\lambda^* = (\lambda, x_\lambda^*)$ es globalmente asintóticamente estable con respecto al interior del cono positivo.

Demostración: En primer lugar, notemos que puesto que $g(S^0) > D_1$, de ello sigue que $\lambda < S^0 \leq \mu$, y así por proposición 55, E_μ^* no es viable y por la Proposición 58, el punto E_λ^* es localmente asintóticamente estable. También, por el Lema 63, sin pérdida de generalidad, sólo necesitamos considerar $S \in [0, S^0]$. Consideremos la función continuamente diferenciable para $S \in (0, S^0)$ y $x > 0$, definida por

$$V(S, x) = \int_\lambda^S \frac{(g(\xi) - D_1)(S^0 - \lambda)}{u(\lambda)(S^0 - \xi)} d\xi + x - x_\lambda^* \ln\left(\frac{x}{x_\lambda^*}\right), \quad (3.9)$$

Denotemos,

$$\Psi(S) = \frac{u(S)}{S^0 - S} \quad (3.10)$$

Luego, utilizando (3.10) se deduce que

$$\begin{aligned} \dot{V} &= x(g(S) - D_1) \left(1 - \frac{u(S)(S^0 - \lambda)}{u(\lambda)(S^0 - S)}\right) \\ &= x(g(S) - D_1) \left(1 - \frac{\Psi(S)}{\Psi(\lambda)}\right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Note que, $\dot{V} = 0$ si y sólo si $S = \lambda$ o $x = 0$ o $S = \mu = S^0$. La derivada de Ψ está dada por

$$\frac{u'(S)(S^0 - S) + u(S)}{(S^0 - S)^2}$$

Desde la proposición 58 y por la continuidad de u' , tenemos que para S cercano a λ , $u'(S)(S^0 - S) + u(S) > 0$, y así la función Ψ es creciente. Además, g es monótona creciente para S cerca de λ . Puesto que cada término en (3.11) cambia de signo en $S = \lambda$, esto implica que para S cercano de λ , $\dot{V} < 0$. De hecho, \dot{V} permanece negativa, siempre y cuando ninguno de los términos en (3.11) cambien de signo. Pero esto está descartado por las hipótesis.

Sea $\eta = \{(S, x) \in [0, S^0] : \dot{V}(S, x) = 0\}$. Por lo tanto, $\eta = \{(S, x) \in [0, S^0] : x = 0 \text{ o } S = \lambda \text{ o } S = S^0 = \mu\}$. Sea \mathcal{E} el subconjunto más grande invariante de η . Entonces $\mathcal{E} = \{(S, 0), 0 \leq S \leq S^0\} \cup \{E_\lambda^*\}$. Como las soluciones están delimitadas, \mathcal{E} atrae a todas las soluciones con condiciones iniciales no negativas (por el Teorema de extensión de la LaSalle modificado ([100], Th. 1.2)). Notemos que desde hipótesis, E_0 es inestable y $E_\lambda^* = (\lambda, x_\lambda^*)$ es localmente asintóticamente estable, mediante un argumento

estándar del Lema de Butler-McGehee, [90], desde lo cual se sigue que no hay puntos de la forma $(S, 0)$, $S \geq 0$ que puedan estar en el conjunto límite de omega de cualquier solución iniciada dentro del cono positivo y así la prueba se concluye. \square

3.3 Término de rendimiento

Existen diferentes mecanismos que conducen a la utilización de un término de rendimiento en modelos quimiostato. Consideremos la siguiente expresión relativa de crecimiento y absorción:

$$g(S) = \rho u(S). \quad (3.12)$$

Como se mencionó en la introducción, una razón para incluir el término rendimiento es, históricamente, para expresar el sustrato y la biomasa orgánica en las mismas unidades. En este caso, el término rendimiento es la constante de proporcionalidad (3.12).

Formalmente, el rendimiento es la relación entre la cantidad de materia tomada dando como resultado el crecimiento celular, por lo que es probable que el rendimiento no sea realmente constante, pero podría depender de la concentración de sustrato, la concentración microbiana, y las condiciones ambientales, entre otras cosas.

En los modelos estudiados por [74], y los Autores en [73], asumieron que el rendimiento es una función de la concentración de sustrato, $Y(S)$. Ellos consideraron, el crecimiento monótono $g(S)$ y modelaron la captación en el sistema (3.1) - (3.2) para $u(S) = g(S)/Y(S)$, donde $Y(S) = a + bS$. También supusieron

$$g(S) = \frac{\mu_m S}{K_m + S}, \text{ y así } u(S) = \frac{\mu_m S}{(a + bS)(K_m + S)}, \text{ o} \quad (3.13)$$

$$g(S) = kS e^{-\frac{S}{K}}, \text{ y así } u(S) = \frac{kS e^{-\frac{S}{K}}}{(a + bS)}. \quad (3.14)$$

En el caso de un rendimiento constante, incluyeron el término rendimiento matemáticamente en la ecuación de sustrato, de forma equivalente incluyeron la reciprocidad en la ecuación de microorganismo. Una de las diferencias importantes en el caso de que el rendimiento no es constante es que el término rendimiento variable puede conducir a términos de captación y crecimiento que tienen diferentes propiedades de monotonicidad. Por lo tanto, es realmente especial, ya que la forma explícita de la función de rendimiento no es aún conocida. Por lo tanto, en la actualidad sólo es posible representar el rendimiento en el modelo, usando una función que sospechemos tenga propiedades cualitativas similares, por ejemplo, propiedades de monotonicidad similares.

Modelando el rendimiento como una función de la concentración de sustrato podría también proporcionar una forma indirecta del modelado de almacenamiento de nutrientes. Los autores en [19] proporcionan evidencias experimentales que indican el aumento crítico de la división de masa como aumento en la concentración de sustrato y así la reproducción dependen de la concentración de sustrato. Las diferentes interpretaciones de rendimiento pueden dar lugar a diferentes formas para las funciones de rendimiento y diferentes caminos para incluir el término de rendimiento.

CONCLUSIONES

- La Teoría de Control Optimal provee diversas herramientas para analizar modelos matemáticos que representan la dinámica de un bioproceso. Las nociones de accesibilidad, controlabilidad, y control optimal son importantes para iniciar dicho análisis.
- El Método de Green, constituye un método alternativo para el análisis de problemas de control optimal sobre el plano. Esta herramienta, nos ha permitido analizar y encontrar una solución global del problema de tiempo mínimo para un reactor secuencial por lotes.
- El Principio del Máximo de Pontryaguin, es una condición necesaria para determinar el control optimal. Su formalismo Hamiltoniano nos ha permitido obtener una expresión explícita para el control optimal y su análisis, correspondiente a un proceso biotecnológico de fermentación en el cual ocurren interacciones entre nutrientes y microorganismos.
- El estudio del problema de tiempo mínimo de un bioproceso en el tratamiento de aguas puede ser modelado sobre biorreactores secuenciales, del tipo SBR; y su estudio en este contexto permite un análisis de diversas estrategias de solución, tales como: controles óptimos del tipo Bang-Bang, arcos singulares, y/o combinaciones de ambos.
- Bajo ciertas condiciones de los parámetros (temperatura, volumen, etc.,) y aplicando el principio de balance de masas, el modelo para un proceso que permita determinar la eficiencia de optimización de un proceso SBR usado en el tratamiento de aguas ha sido resuelto para el caso en que las funciones de crecimiento de las especies en competición son del tipo Monod.
- Bajo la hipótesis que el oxígeno actuante en el proceso que modela la fase aeróbica sobre un biorreactor secuencial, ha sido posible obtener una reducción del modelo original, lo cual nos ha permitido obtener una caracterización del conjunto alcanzable correspondiente a dicha dinámica.
- La Teoría del Quimiostato permite un estudio de diversos modelos que representan bioprocesos, en los cuales la función que describe el crecimiento celular de especies en competición, es de gran importancia para su análisis.
- El principio de exclusión competitiva, nos permite tener en cuenta que la mayoría de las especies pueden sobrevivir con un único nutriente en un cierto estado estacionario correspondiente a la dinámica del proceso. Si uno de los competidores exhibe un rendimiento variable, entonces la coexistencia oscilatoria de más de una especie se hace posible.
- El estudio de un proceso en el cual una especie con cierta concentración consume determinado sustrato, ha sido traducido en el estudio de un crecimiento de la biomasa celular descrito por una función que depende del sustrato variable.
- El análisis de estabilidad local del sistema que modela un bioproceso sobre un Quimiostato, realizado a través del estudio de la matriz Jacobiana asociada a los puntos de equilibrio del sistema, ha permitido la obtención de resultados de estabilidad asintótica en dichos estados. Por su parte, el estudio global de la estabilidad de los puntos de equilibrio, ha sido posible bajo ciertas hipótesis sobre la función que describe el crecimiento de la biomasa celular en el bioproceso en estudio en relación a los parámetros del sistema.

.- Se ha observado, qué es importante entender cómo el rendimiento depende del sustrato con el fin de incorporar el término correcto en el modelo. En cualquier modelo en el que el rendimiento se considera una medida de la eficacia del proceso de conversión , los términos de crecimiento y de captación están relacionadas.

.- Finalmente, en la formulación del modelo de un proceso sobre Quimiostato, es importante considerar que la absorción del sustrato se inhibe por altas concentraciones de sustrato. Este hecho, puede resultar importante si uno está actualmente encontrando organismos con el fin de observar este fenómeno en el laboratorio. En este sentido, el trabajo desarrollado en esta tesis constituye un punto de partida para abordar futuramente otros sistemas biológicos complejos cuya dinámica yace sobre el Quimiostato o Biorreactores Secuenciales por Lotes.

Bibliography

- [1] A. Aoyams, F.J.Doyle III, and V. Venkatasubramanian: Control-affine fuzzy neural network approach for nonlinear process control, *J. Proc. Cont.*, 5, (1995), 375–386.
- [2] A. Agrachev and Sachkov Y.: *Control Theory from the Geometric Viewpoint*, 87, *Encyclopedia of Mathematical sciences*, Springer–Verlag, New York, Heidelberg–Berlin, (2004).
- [3] A. G. Dorofeev, M. V. Glagolev, T. F. Bondarenko and N. S. Panikov: Observation and explanation of the unusual growth kinetics of *Arthrobacter globiformis*, *Microbiology*, 61, (1992), 24–31.
- [4] A. Moser: *Bioprocess Technology*, Springer, (1988).
- [5] A. Tholudur and W. F. Ramirez: Optimization of fed-batch bioreactors using neural network parameter function models, *Biotech. Prog.*, 12, (1996), 302-309.
- [6] B. Maner and F. J. Doyle III: Simulated polymerization control using autoregressive plus Volterra-based MPC, *AIChE J.*, 43, (1997), 1763–1784.
- [7] Bacciotti A. and Rosier L.: *Liapunov Functions and Stability in Control Theory*, *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, 267, Springer Verlag, London, (2001).
- [8] Bastin, G. and J. F. Van Impe: Nonlinear and adaptive control in biotechnology: a tutorial, *European J. Control*, 1, 37-53 (1995).
- [9] Buitron, G.: *Biodegradation de composés xenobiotiques par un procédé discontinu de type SBR*, PhD Thesis, Nr. 254, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 1993.
- [10] Butler, G.J., Wolkowicz, G.S.K.: A mathematical model of the chemostat with a general class of functions describing nutrient, *SIAM J. on Applied Mathematics*, 45, 138-151 (1985).
- [11] C. Lobry and F. Mazenc: Effect of intra-specific competition on persistence in competition models, *Electronic Journal of Differential Equations*, 125, (2007), 1–10.
- [12] C. K. Essajee and R. D. Tanner: The effect of extracellular variables on the stability of the continuous baker’s yeast-ethanol fermentation process, *Process Biochemistry*, (1979).
- [13] D’Ans G., D. Gottlieb and P. Kokotovic: Optimal control of bacterial growth, *Automatica*, 8, (1972), 729–736.

- [14] D´Ans G., D. Gottlieb and P. Kokotovic: A nonlinear regulator problem for a model of biological waste treatment, *IEEE Trans. Automat. Control*, 16, (1971), 341-347.
- [15] Denbigh K. G., Turner J. C. R.: *Introducción a la teoría de los reactores químicos*, Limusa, Mexico, (1990).
- [16] D. E. Steinmeyer and M. L. Shuler: Structured model for *Saccharomyces Cerevisiae*, *Chem. Eng. Sci.*, 44, (1989), 2017-2030.
- [17] Dochain D.: *Automatique des Bioprocedes*, Paris, Hermes Science publications, (2001).
- [18] D. Psychogios and L. H. Ungar: A hybrid neural network-first principles approach to process modeling, *AIChE J.*, 38, (1992), 1499-1511.
- [19] F. B. Godin, D. G. Cooper and A. D. Rey, Development and solution of a cell mass population balance model applied to the SCF process, *Chemical Engineering Science*, 54, (1999), 565-578.
- [20] F. J. Doyle, B.A. Ogunnaike, and R. K. Pearson: Nonlinear model-based control using second order Volterra models, *Automatica*, (31), (1995), 697-714.
- [21] F. Mazenc and M. Malisoff, and J. Harmand: Stabilization in a two-species chemostat with Monod growth functions, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 54,(4), (2009), 855-861.
- [22] F. Mazenc and M. Malisoff: Remarks on output feedback stabilization of two-species chemostat models, *Automatica*, 46, (10), (2010), 1739-1742.
- [23] F. Mazenc, M. Malisoff, and P. De Leenheer: On the stability of periodic solutions in the perturbed chemostat, *Mathematical Biosciences and Engineering*, vol. 4, (2), (2007), 319-338.
- [24] F. Mazenc and Z-P. Jiang: Persistence for a chemostat with many species, *Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems Series A: Mathematical Analysis*, 17, (6a), (2010), 737-763.
- [25] F. Mazenc, M. Malisoff, J. Harmand: Further results on stabilization of periodic trajectories for a chemostat with two species, *IEEE Trans. Circuits Syst. I, Regul. Pap*, Special issue on systems biology, (2008), 66-74.
- [26] Feinberg M.: *Toward a Theory of Process Synthesis*, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 41, 3751, (2002).
- [27] Fibrianto H., D. Mazouni, M. Ignatova, M. Herveau, J. Harmand and D. Dochain: Dynamical modelling, identification and software sensors for SBR´s, *5th MATHMOD VIENNA*, IMACS Symposium on Mathematical Modelling, Vienna, 8-10 fevrier, (2006).
- [28] G.J. Butler and G.S. Wolkowicz: Exploitative competition in a chemostat for two complementary, and possibly inhibitory, resources, *Mathematical Biosciences*, 83, (1), (1987), 1-48.

- [29] G. Dinopoulou, R. M. Sterritt and J. N. Lester: Anaerobic acidogenesis of a complex wastewater; II. Kinetics of growth inhibition and product formation, *Biotechnology and Bioengineering*, 31, (1988), 969–978.
- [30] G. E. Briggs and J. B. S. Haldane: A note on the kinetics of enzyme action, *Biochem. J.*, 19, (1925), 338–339.
- [31] G.S.K. Wolkowicz, M.M Ballyk, Z. Lu: Microbial dynamics in a chemostat. Competition, growth, implication of enrichment, in *Differential Equations and Control Theore*, Wuhan, (1994), Lecture Notes in Pure and Appl. Math. 176, Dekker, New-York, (1996), 389–406.
- [32] Hermes, H. and G. Haynes: On the nonlinear control problem with control appearing linearly, *J. SIAM Control. Ser. A*, 1, (1963), 85–108.
- [33] Hermes, H. and J. P. LaSalle: *Functional analysis and Time Optimal Control*, Academic Press, New York, (1969).
- [34] Hong, J.: Optimal substrate feeding policy for fed batch fermentation with substrate and product inhibition kinetics, *Biotechnol. Bioengng.*, 28, (1986), 1421–1431.
- [35] Isidori A.: *Nonlinear Control Systems, Communications and Control Engineering Series*, Springer–Verlag, New York–Heidelberg–Berlin, (1995).
- [36] Irvine, R. L. H. Ketchum Jr.: Sequencing batch reactors for biological wastewater treatment, *Critical Rev. Environ. Control*, 18, (1989), 225–294.
- [37] I. H. Lee, A. G. Fredrickson and H. M. Tsuchiya: Damped oscillations in continuous culture of *Lactobacillus plantarum*, *Journal of General Microbiology*, 93, (1976), 204–208.
- [38] I. Karafyllis , C. Kravaris and N. Kalogerakis: Relaxed Lyapunov criteria for robust global stabilization of nonlinear systems, *International Journal of Control*, 82, (11), (2009), 2077–2094.
- [39] I. Karafyllis and C. Kravaris: Robust global stabilizability by means of sampled-data control with positive sampling rate, *International Journal of Control*, 82,(4), (2009), 755–772.
- [40] J. E. Bailey and D. F. Ollis: *Biochemical Engineering Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, Second edition, (1986).
- [41] J. F. Andrews: A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates, *Biotechnology and Bioengineering*, 10, (1968), 707–723.
- [42] J. Andrews: A Mathematical model for the continuous culture of microorganism utilizing inhibitory substrate, *Biotechnol. & Bioeng.*, 10, (1968), 707–723.
- [43] J. H. T. Luong: Generalization of Monod kinetics for analysis of growth data with substrate inhibition, *Biotechnology and Bioengineering*, 29, (1987), 242–248.

- [44] J. L. Webb: *Enzyme and Metabolic Inhibitors, Volume I, General Principles of Inhibition*, Academic Press, (1963).
- [45] J-L. Gouze and G. Robledo: Robust control for an uncertain chemostat model, *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 16, (3), (2006), 133–155.
- [46] J-L. Gouze and G. Robledo: Feedback control of a nonmonotone competition models in the chemostat, *Nonlinear Analysis; Real World Applications*, 6, (4), (2005), 671–690.
- [47] J. M. VanBriesen: Evaluation of methods to predict bacterial yield using thermodynamics, *Biodegradation*, 13, (2002), 171–190.
- [48] J. P. Grover: *Resource Competition, Population and Community Biology Series*, 19, Chapman&Hall, New York, (1997).
- [49] J. W. Jeong, J. Snay, and M. M. Atai: A mathematical model for examining growth and sporulation processes of *Bacillus subtilis*. *Biotech. bioeng.*, 35, (1990), 160–184.
- [50] Jurdjevic V. : *Geometric control theory*, Cambridge University Press, New York, (1997).
- [51] Karl-Heinz Bellgardt: *Bioreaction Engineering Modeling and Control, chapter 2: Bioprocess Models*, Springer, July, (2000), 44–105.
- [52] Kent, James A.: *Biblioteca Riegel de química industrial*, CECSA, México, (1987).
- [53] Kuhlmann, Ch., I. D. L. Bogle and Z. S. Chalabi: Robust operation of fed batch fermenters, *Bioprocess Engng.*, 19, (1998), 53–59.
- [54] L. Ljung. *System Identification: Theory for the User*. P T R Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, (1987).
- [55] Lee, E. B. and L. Markus: *Foundations of Optimal Control Theory*, Wiley, New York, (1967).
- [56] Lim, H. C., Y. J. Tayeb, J. M. Modak and P. Bonte: Computational algorithms for optimal feed rates for a class of fed-batch fermentation. Numerical results for penicillin and cell production, *Biotechnol. Bioeng.*, 28, (1986), 1408–1420.
- [57] Mazouni, D., M. Ignatova et J. Harmand: A Multi-Model approach for the monitoring of carbon and nitrogen concentration during the aerobic phase of a biological sequencing batch reactor, *16th IFAC World Congress*, 5-8 juillet, Prague, République Tchèque, (2005).
- [58] Mazouni, D., J. Harmand, A. Rapaport: Attainability and Suboptimal minimal time Control of a class of Biological sequencing batch reactors, *IFAC 2005 World Congress*, Prague, Czech Republic, July 4-8, (2005).
- [59] Mazouni, D., J. Harmand, A. Rapaport and H. Hammouri 2004: Modelling and controlability analysis of an aerobic SBR, *7th African Conference on Research in Computer Science, CARI*, November, Hammamet, Tunisia, (2004), 22–25.

- [60] Matin A.: *Continuous Cultures of Cells*, Vol 2, P. H. Calcott, ed., CRC Press, (1981).
- [61] M. A. Henson. Nonlinear model predictive control: Current status and future directions, *Comput. Chem. Eng.*, **23**, (1998), 187–202.
- [62] Miele, A.: Application of Green's Theorem to the extremization of linear integrals, *Symp. on Vehicle Systems Optimization*, Garden City, L. I. New York, (1961), 26–35.
- [63] Modak, J. M., H. C. Lim and Y. J. Tayeb: General characteristics of optimal feed rate profiles for various fed-batch fermentation processes, *Biotechnol. Bioengng.*, **28**, (1986), 1396–1407.
- [64] Monod J.: *Recherches sur la croissance des cultures bactériennes*, Paris, France, Hermes, (1942).
- [65] Molher R.R.: *Nonlinear Systems: Volume II, Applications to Bilinear Control*, Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice- Hall, (1981).
- [66] M. Moisan, O. Bernard, and J-L. Gouze: Near optimal interval observers bundle for uncertain bioreactors, *Automatica*, **45**, (1), (2009), 291–295.
- [67] M. H. Bassett, P. Dave, F. J. Doyle III, G. K. Kudva, J. F. Penky, and G. V. Reklaitis: Perspectives on model based integration of process operations, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, (6), (1996), 821–844.
- [68] M. M. Domach, S. K. Leung, R. E. Cahn, G. G. Cocks, and M. L. Shuler: Computer model for glucose -limited growth of a single cell of *Escherichia coli* B/r-A. *Biotechnology and Bioengineering*, **26**, (1984), 203–216.
- [69] N.S. Panikov: *Microbial Growth Kinetics*, Chapman & Hall, New York, (1995).
- [70] Oster G.: Bilinear models in ecology, In R.R. Mohler and A. Ruberti eds., *Recent developments in Variable Structure systems, economics and Biology*, Berlin, Springer-Verlag, (1978), 260–271.
- [71] Pauss A., Schoefs O., Bekri, M. Bouvier J.C., Canziani R., Ficara E., Fiocchi N. Luccarini L., Ciappelloni F., Ratini P., Pirani M. and Mariani S.: Development of hardware sensors for the on-line monitoring of SBR used for the treatment of industrial wastewaters *5th MATHMOD VIENNA*, IMACS Symposium on Mathematical Modelling, Viena, 8-10 February, (2006).
- [72] P. Agrawal, G Kosky, and M. Raseier: An algorithm for operatin a fed-batch fermenter at optimum specific-growth rate, *Biotech. Bioeng.*, **33**, (1989), 115–125.
- [73] P. Agrawal, C. Lee, H. C. Lim and D. Ramkrishna: Theoretical investigations of dynamic behavior of isothermal continuous stirred tank biological reactors, *Chemical Engineering Science*, **37**, (3), (1982), 453–462.
- [74] P. Crooke and R. Tanner: Hopf bifurcations for a variable yield continuous fermentation model, *Int. J. Engng. Sci.*, **20**, (3), (1982), 439–443.

- [75] P. Crooke, C.-J. Wei and R. Tanner: The effect of the specific growth rate and yield expressions on the existence of oscillatory behavior of a continuous fermentation model, *Chem. Eng. Commun.*, 6, (1980), 333–347.
- [76] P. Gajardo, F. Mazenc, and H. Ramirez: Competitive exclusion principle in a model of chemostat with delay, *Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems, Series A; Mathematical Analysis*, 16, (2), (2009), 253–272.
- [77] Perko L.: *Differential Equations and Dynamical Systems*, 2da Edition, Springer-Verlag, USA, (1991).
- [78] Pontryagin L. S., Boltyanskii V. G., Gramkrelidze R. V. and E. F. Mishchenko: *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, JOHN WILEY and SONS, Inc. New York, Third Edition, (1965).
- [79] Pontryagin, L. S., V. G. Boltyanskii, R. V. Gamkrelidze and E. F. Mischchenko: *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, The Macmillan Company, New York, (1964).
- [80] R. Berber: Control of batch reactors, As review, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 74, (Part A), (1996), 3–20.
- [81] R.A. Armstrong and R. McGehee: Competitive exclusion, *American Naturalist*, 115, (2), (1980), 151–170.
- [82] R. S. Parker and F. J. Doyle III: Optimal control of a continuous bioreactor using an empirical non-linear model, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, (2001), 1939–1951.
- [83] Sage A. P., White C. C.: *Optimum Systems Control*, Second Edition, (1977).
- [84] San, K. and G. Stephanopoulos: Optimization of fed-batch penicillin fermentation, a case of singular optimal control with state constraints, *Biotechnol. Bioeng.*, 34, (1989), 72–78.
- [85] S.B. Hsu: Limiting behavior for competing species, *SIAM J. Applied Mathematics*, vol. 34, no. 4, (1978), 760–763.
- [86] S. C. Ricke and D. M. Schaefer: Growth and fermentation responses of *Selenomonas ruminantium* to limiting and non-limiting concentrations of ammonium chloride, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 46, (1996), 169–175.
- [87] S. Pavlou: Microbial competition in bioreactors, *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 12,(1), (2006), 71–81.
- [88] Schugerl, K: *Bioreaction Engineering*, Vol. I, Wiley, Chichester, (1987).
- [89] S. F. de Azevedo, B. Dahm, and F. R. Oliveira: Hybrid modelling of biotechnical processes, A comparison with the conventional approach, *Comput. Chem. Eng., (Suppl)*,, (1977), S751-S756.
- [90] Smith H. and Waltman P.: *The Theory of the Chemostat*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, (1995).

- [91] S. Hansen, S. Hubbell: Single-nutrient microbial competition; qualitative agreement between experimental and theoretically forecast outcomes, *Science*, vol. 207, (1980), 1491–1493.
- [92] S. Koga and A. E. Humphrey: Study of the dynamic behavior of the chemostat system, *Biotechnology and Bioengineering*, 9, (1967), 375–386.
- [93] Sotang, E. D.: *Mathematical Control Theory; Deterministic Finite Dimensional Systems*, Springer, New York, (1990).
- [94] Sussmann H.J. and V. Jurdjevic : “Controllability of nonlinear systems ”, *J. Diff. Equations*, 12, 95, (1972).
- [95] Tesoneva, R. G., T. D. Patarinska and I. P. Popchev: Augmented Lagrange decomposition method for optimal control calculation of batch fermentation processes, *Bioprocess Engng.*, 18, (1998), 143–153.
- [96] Van Impe, J.F., Bastin, G.: Optimal adaptive control of fed-batch fermentation processes, *Control Eng. Practice*, 3, (1995), 939–954.
- [97] V. H. Edwards: The influence of high substrate concentrations on microbial kinetics, *Biotechnology and Bioengineering*, 12, (1970), 679–712.
- [98] V. Lemesle and J-L. Gouze: A simple unforced oscillatory growth model in the chemostat, *Bulletin of Mathematical Biology* 70, (2), (2008), 344–357.
- [99] W. Marquardt: Towards a process modeling methodology, In *Methods of Model Based Process Control*, Kluwer Academic Publishers, (1995), 3–40.
- [100] Wolkowicz, G.S.K., Lu, Z.: Global dynamics of a mathematical model of competition in the chemostat: General response function and differential death-rates, *SIAM J. Appl. Math.*, 52, (1992), 222–233.
- [101] Y. Lenbury, P. S. Crooke and R. D. Tanner: Relating damped oscillations to sustained limit cycles describing real and ideal batch fermentation processes, *BioSystems*, 19, (1986), 15–22.