

Maria da Conceição de Almeida Leite

BIFURCAÇÕES DE UM SISTEMA QUÍMICO
COM CONTROLADOR



Departamento de Matemática Aplicada
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
Dezembro de 2001

Maria da Conceição de Almeida Leite

BIFURCAÇÕES DE UM SISTEMA QUÍMICO
COM CONTROLADOR

*Tese submetida à Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
para obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada*

Departamento de Matemática Aplicada
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
Dezembro de 2001

*Tese orientada por
Isabel Labouriau
e
Sofia Castro.*

aos Meus Pais

Agradeço

às minhas orientadoras, Isabel Labouriau e Sofia Castro, que supervisionaram este trabalho, entre muitas coisas, a disponibilidade com que sempre me acompanharam, o incentivo e dedicação na orientação deste trabalho;

à minha família pelo seu constante apoio, compreensão e incentivo em todas as ocasiões;

aos meus amigos pelo apoio e pelos bons momentos, em particular, a Alberto Vieira e Natália Coelho, Amaro Silva e Lucinda Maia, Carla Pinto, Daniel Veiga, família Batista, Graça Magalhães, Isabel Maia, Isabel Taveira, Joaquim e Marina Paixão, José Cordeiro, Mário Dias, Nuno Marques e Sandra Vaz;

ao PRODEP o apoio financeiro e ao Departamento de Matemática do Instituto Superior de Engenharia, em especial à Dra. Helena Vieira da Silva, pela oportunidade e apoio que me deram na realização deste mestrado e ainda aos colegas de trabalho, em particular a Elisa Ramalho, Helena Brás Silva, José Matos, Teresa Araújo e Vitor Costa.

Resumo

Neste trabalho estuda-se o comportamento de um sistema reactivo constituído por um reactor perfeitamente agitado - CSTR com um controlador tipo Proporcional-Integral (PI), onde ocorrem duas reacções simultâneas de primeira ordem, irreversíveis e exotérmicas.

A caracterização das bifurcações estáticas e dinâmicas deste sistema reactivo é efectuada usando a teoria de singularidades.

No sistema proposto só ocorrem bifurcações estáticas quando K_I é nulo. Neste caso, aplica-se a teoria de singularidades escolhendo para parâmetro de bifurcação três parâmetros distintos do sistema. Para cada um desses parâmetros faz-se a análise do tipo de bifurcações que o sistema pode exibir.

As bifurcações dinâmicas do sistema são estudadas considerando como parâmetros de bifurcações os ganhos do controlador. Nesta parte do trabalho são descritos os resultados de Serra e Tablino-Possio sobre modelos tridimensionais para um CSRT com controlador PI, apresentando demonstrações diferentes e consideravelmente simplificadas. Obtem-se um resultado distinto para as auto-intersecções do lugar geométrico das bifurcações de Hopf. Por último, os resultados são descritos para o caso particular do sistema reactivo, com controlador PI, onde ocorrem duas reacções simultâneas de primeira ordem, irreversíveis e exotérmicas.

Palavras chave: Sistema dinâmico, sistema reactivo, teoria de singularidades, bifurcações, reactor CSTR, controlador proporcional-integral.

Abstract

The local behavior of a proportional-integral controlled continuous stirred tank reactor - CSTR is studied for a reactor with two simultaneous, first-order and exothermic reactions. Singularity theory is used to analyse the static and dynamic bifurcations of the system.

Static bifurcations of this reacting system take place only when $K_I = 0$. The type of bifurcations that the system can exhibit is analysed for each of a choice of three bifurcation parameters.

The dynamic bifurcations of the system are studied using the controller gains as bifurcation parameters. The general results of Serra e Tablino-Possio for a three-dimensional model of a PI controlled reactor are presented with different and quite simplified proofs. A different result are obtained for the self intersections of the Hopf bifurcation locus. The results are then refined for the specific case of two simultaneous, first-order and exothermic reactions.

Key words: Dynamical system, reacting system, singularity theory, bifurcations, CSTR reactor, proportional-integral controller.

Índice

1	Modelo matemático do sistema	8
2	Pontos de equilíbrio	13
2.1	$K_I > 0$	13
2.2	$K_I = 0$	13
3	Bifurcação estática com $K_I=0$	16
3.1	Bifurcação com $\lambda = K_p$ como parâmetro de bifurcação	19
3.2	Bifurcação com $\lambda = \alpha_7$ como parâmetro de bifurcação	25
3.3	Bifurcação com $\lambda = \bar{\alpha}_8$ como parâmetro de bifurcação	28
4	Bifurcação Dinâmica	29
4.1	Resultados gerais sobre sistemas com controladores PI	29
4.2	Resultados associados ao sistema dinâmico com controlador PI descrito na secção 1	37
	Bibliografia	42

1 Modelo matemático do sistema

Neste trabalho vamos estudar o comportamento de um sistema reactivo constituído por um reactor químico, designado por Reactor de Fluxo Contínuo Perfeitamente Agitado - CSTR (Continuous Flow Stirred Tank Reactor) com um controlador tipo Proporcional-Integral (PI) cuja representação, esquemática, é apresentada na figura 1.

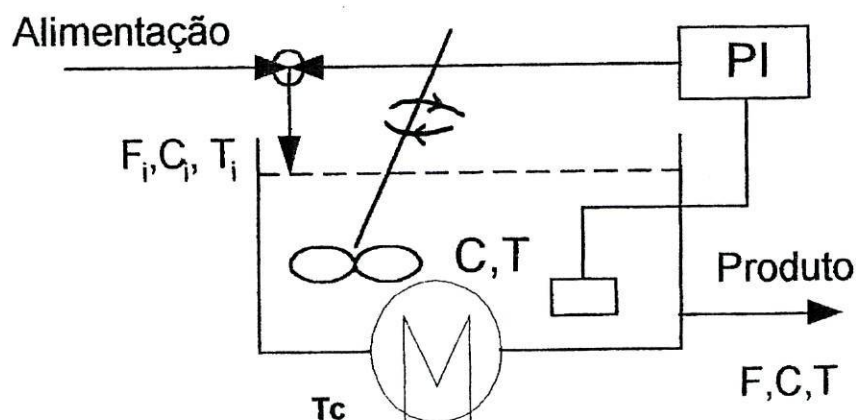


Figura 1: Representação esquemática do reactor contínuo perfeitamente agitado - CSTR - com um controlador PI.

Neste modelo o fluido que contém o reagente é introduzido no reactor de volume V , a um caudal F_i , com uma determinada concentração C_i de reagente e uma dada temperatura, T_i . No reactor ocorrem duas reacções simultâneas, de primeira ordem, irreversíveis e exotérmicas, dando origem a produtos. O reactor é perfeitamente agitado, o que significa que a concentração e a temperatura no interior são uniformes. O caudal de saída é igual ao caudal de entrada e a concentração e a temperatura à saída são iguais às da mistura dentro do reactor. Estas hipóteses permitem descrever o sistema reactivo através de duas equações diferenciais, que resultam da aplicação das leis de conservação de energia e de matéria (Fogler[2])

$$V \frac{dC}{dt} = F(C_i - C) - V[r_1 + r_2]C \quad (1)$$

$$V \rho C_p \frac{dT}{dt} = F \rho C_p (T_i - T) + V[(-\Delta H_1)r_1 + (-\Delta H_2)r_2]C - UA(T - T_c) \quad (2)$$

Para reacções com uma cinética do tipo Arrhenius, a variação das constantes cinéticas, r_1 e r_2 , com a temperatura, usando como temperatura de referência T_{iset} , é dada por:

$$r_1 = K_1 \exp\left(\frac{E_1}{RT_{iset}} \frac{T - T_{iset}}{T}\right) \quad r_2 = K_2 \exp\left(\frac{E_2}{RT_{iset}} \frac{T - T_{iset}}{T}\right)$$

sendo:

A - Área de transferência de calor;

C_i, C - Concentração do reagente na alimentação e no interior do reactor, respectivamente;

C_p - Calor específico da mistura (considerado constante);

E_1, E_2 - Energia de activação da reacção 1 e da reacção 2, respectivamente;

F_i, F - Caudal de alimentação e de saída, respectivamente;

r_1, r_2 - Constante cinética da reacção 1 e 2, respectivamente, à temperatura T ;

R - Constante de Boltzmann;

t' - Tempo;

T_c - Temperatura do fluido arrefecedor;

T_i, T - Temperatura da alimentação e da mistura no reactor, respectivamente;

T_{iset} - Valor de referência da temperatura da alimentação do reactor;

U - Coeficiente global de transferência de calor;

V - Volume do reactor;

ρ - Massa volúmica da mistura (considerada constante);

$(-\Delta H_1), (-\Delta H_2)$ - Calor das reacções 1 e 2, respectivamente (estas quantidades são positivas para reacções exotérmicas);

K_1, K_2 - Constante cinética da reacção 1 e 2, respectivamente, à temperatura T_{iset} .

Para manter constante a temperatura do sistema utiliza-se um fluido arrefecedor que circula numa serpentina à temperatura T_c . O sistema de controle actua de forma a manter a temperatura no reactor num valor previamente seleccionado, T_{set} . Isto é, se a temperatura medida, T , diferir do valor desejado, T_{set} , o controlador detecta a diferença ou o erro $\epsilon = T_{set} - T$ e faz o ajuste conveniente na temperatura do caudal de entrada, alterando o valor de T_i , que era T_{iset} , para um novo valor, de forma a obter $T = T_{set}$. De acordo com este esquema de controle a variável T é designada por variável de controle e a temperatura de entrada no reactor, T_i , é designada por parâmetro manipulado. A acção do controlador Proporcional-Integral (PI) é traduzida pela relação (Coughanowr [4])

$$T_i - T_{iset} = -K_p(T - T_{set}) - K_I \int_0^{t'} (T - T_{set}) d\tilde{t}, \quad (3)$$

onde K_p, K_I são constantes que caracterizam os módulos proporcional e integral, respectivamente, do controlador PI e são designados por:

K_p - ganho proporcional do controlador;

K_I - ganho integral do controlador.

A relação (3) mostra que no sistema controlado, T_i depende do tempo de acordo com a seguinte relação:

$$T_i(t') = T_{i\text{set}} - K_p(T(t') - T_{\text{set}}) - \psi(t'), \quad (4)$$

onde

$$\psi(t') = K_I \int_0^{t'} (T - T_{\text{set}}) d\tilde{t}. \quad (5)$$

Com o objectivo de simplificar as equações (1), (2) e (3) introduz-se os seguintes parâmetros:

$$\alpha_3 = \frac{E_2}{E_1}; \quad \alpha_4 = \frac{K_2}{K_1}; \quad \alpha_7 = \frac{VK_1}{F}.$$

Estas expressões estão de acordo com o agrupamento dos parâmetros originais do sistema feito por Balakotaiah e Luss [1].

Neste trabalho define-se, ainda, parâmetros com ligeiras alterações relativamente aos apresentados em [1]:

$$\alpha_1 = \frac{UA}{F\rho C_p}; \quad \alpha_2 = \frac{E_1}{R}; \quad \alpha_5 = \frac{(-\Delta H_1)C_i}{\rho C_p}; \quad \alpha_6 = \frac{(-\Delta H_2)C_i}{\rho C_p}.$$

A diferença entre as expressões destes parâmetros e as expressões dos parâmetros definidos por Balakotaiah e Luss é esclarecida na secção 3.2.

Define-se também os parâmetros:

$$\alpha_8 = T_c; \quad \alpha_9 = T_{\text{set}}; \quad \alpha_{10} = \frac{V}{F}; \quad \alpha_{11} = T_{i\text{set}}.$$

Introduz-se, ainda, as expressões:

$$f(T, T_{i\text{set}}, a) = \exp\left(a \frac{T - T_{i\text{set}}}{TT_{i\text{set}}}\right);$$

$$T_i = T_{i\text{set}} - K_p(T - T_{\text{set}}) - \psi;$$

$$X = \frac{C_i - C}{C_i},$$

onde a pode tomar os valores α_2 e $\alpha_2\alpha_3$.

Efectua-se também as mudanças de variáveis:

$$t = \frac{t'}{\alpha_{10}} \quad \text{e} \quad u = (X, T, \psi) = (u_1, u_2, u_3).$$

Tendo em conta aqueles parâmetros e as novas variáveis, as equações (1), (2) e (3) tomam a forma:

$$\frac{du_1}{dt} = -u_1 + (1 - u_1)\alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11})]; \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{du_2}{dt} = & \alpha_{11} - u_2 - K_p(u_2 - \alpha_9) - u_3 - \alpha_1(u_2 - \alpha_8) + \\ & \alpha_7(1 - u_1) [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4\alpha_6 f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11})]; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{du_3}{dt} = \alpha_{10}K_I(u_2 - \alpha_9). \quad (8)$$

com

$$f(u_2, a, \alpha_{11}) = \exp\left(a \frac{u_2 - \alpha_{11}}{u_2\alpha_{11}}\right).$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias constituído pelas equações (6), (7) e (8) é representado pela equação:

$$\Phi(u, p, t) = 0 \quad (9)$$

onde Φ é o operador

$$\Phi(u, p, t) = \frac{du}{dt} - F(u, p)$$

e a notação usada é:

$u = (u_1, u_2, u_3)$ é o vector das variáveis e $u \in \mathbf{R}^3$;
 $p = (p_1, K_I, K_p) \in \mathbf{R}^{13}$ é o vector dos parâmetros, com $p_1 = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{11}) \in \mathbf{R}^{11}$.

A aplicação $F : \mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^{13} \rightarrow \mathbf{R}^3$ é de classe C^∞ e é definida, em termos das suas funções coordenadas F_1, F_2, F_3 , por $F = (F_1, F_2, F_3)$:

$$F_1 = -u_1 + (1 - u_1)\alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11})];$$

$$\begin{aligned} F_2 = & \alpha_{11} - u_2 - K_p(u_2 - \alpha_9) - u_3 - \alpha_1(u_2 - \alpha_8) + \\ & \alpha_7(1 - u_1) [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4\alpha_6 f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11})]; \end{aligned}$$

$$F_3 = \alpha_{10}K_I(u_2 - \alpha_9).$$

O conjunto dos valores das variáveis e dos parâmetros que são fisicamente aceitáveis, $\Omega_1 \subset \mathbf{R}^{16}$, é definido da seguinte forma:

$$\Omega_1 = \{(u_j, j = 1, \dots, 3, K_I, K_p, \alpha_l, l = 1, \dots, 11) : u_1, u_2 > 0, \\ u_3 \in \mathbf{R}, K_I, K_p \geq 0, \alpha_l > 0\}.$$

2 Pontos de equilíbrio

Para estudar os diagramas de bifurcação do sistema é importante determinar quais são as coordenadas do vector u quando o sistema está em equilíbrio. Quando tal acontece verifica-se que $\Phi(u, p, t) = F(u, p) = 0$ e as coordenadas do vector $u = (u_1, u_2, u_3)$ satisfazem:

$$u_1 = \frac{\alpha_7 [f(u_2, \alpha_2 \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}; \quad (10)$$

$$u_3 = \alpha_{11} - u_2 - K_p(u_2 - \alpha_9) - \alpha_1(u_2 - \alpha_8) + \alpha_7(1 - u_1) [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 \alpha_6 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]; \quad (11)$$

$$0 = \alpha_{10} K_I (u_2 - \alpha_9). \quad (12)$$

No que diz respeito à coordenada u_2 podem ocorrer duas situações distintas e que se passa a enunciar nas subsecções seguintes.

2.1 $K_I > 0$

Nesta situação o sistema está em equilíbrio quando $u_2 - \alpha_9 = 0$. As coordenadas do vector u satisfazem (10) e (11), com

$$u_2 = \alpha_9. \quad (13)$$

Substituindo (10) e (13) em (11) resulta a expressão:

$$u_3 = \alpha_{11} - \alpha_9 - \alpha_1(\alpha_9 - \alpha_8) + \alpha_7 \frac{\alpha_5 f(\alpha_9, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 \alpha_6 f(\alpha_9, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})}{1 + \alpha_7 [f(\alpha_9, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(\alpha_9, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}.$$

Relativamente a esta expressão é de notar que:

1. α_9 é o valor da temperatura desejada no reactor.
2. As coordenadas do vector u em equilíbrio não dependem do valor de K_p , nem de K_I , desde que este último seja positivo. Neste caso, fixado o vector de parâmetros $p_1 = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_9, \alpha_{11})$ existe um único valor de $u = (u_1, u_2, u_3)$ em equilíbrio cujas coordenadas são analiticamente definidas pelas expressões (10), (11) e (13).

Uma vez que $K_I \neq 0$ este é o único ponto de equilíbrio e, portanto, não há bifurcações estáticas no sistema.

2.2 $K_I = 0$

Neste caso $u_2 - \alpha_9$ pode ser diferente de zero. As coordenadas do vector u são (u_1, u_2, u_3) que satisfazem (10) e (11).

O facto de K_I ser igual a zero significa que apenas está activo o módulo proporcional do controlador. Esta situação corresponde a ter o sistema reactivo a ser controlado só por um controlador tipo proporcional. Sabe-se que nos sistemas onde actuam controladores deste tipo, o equilíbrio pode ser atingido sem que a variável de controle alcance o valor pretendido[4].

Relativamente ao sistema em estudo é possível afirmar que para cada valor dos parâmetros $p_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_9, \alpha_{11})$ e de K_p , e para cada valor u_2 da temperatura existem valores u_1 e u_3 para os quais o sistema está em equilíbrio. Uma vez que $u_2 - \alpha_9$ pode ser diferente de zero, o sistema pode atingir um ponto de equilíbrio no qual a temperatura no reactor, u_2 , é diferente da temperatura pretendida, α_9 . Este resultado confirma o fenómeno que foi acima referido como uma característica dos controladores tipo proporcional.

No sistema com controlador sem módulo integral o espaço de fase tem dimensão dois e os pontos de equilíbrio satisfazem (10) e (11) com $u_3 = 0$. No sistema em estudo, quando $K_I = 0$, cada um dos planos $u_3 = \text{constante}$ é invariante pelo fluxo. O caso $K_I = 0$, com $u_3 \neq 0$ não tem significado físico e o estudo de sistemas, nestas condições, só tem interesse como caso limite da situação $K_I > 0$. Nos pontos de equilíbrios com $K_I = 0$ e $u_3 \neq 0$ acontecem algumas bifurcações importantes nos modelos tridimensionais para o CSTR com controlador PI[5]. Assim, este caso é interessante como centro organizador, muito degenerado, do sistema. Por isso, é oportuno descrever os pontos de equilíbrio em cada plano $u_3 = \text{constante}$ que são invariantes pelo fluxo. A variável u_3 passa a ser tratada como parâmetro.

Substituindo (10) em (11) resulta uma equação $G(u_2, p_1, K_p, u_3) = 0$ onde $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{13} \rightarrow \mathbf{R}$, é dada por:

$$G(u_2, p_1, K_p, u_3) = u_2 - \alpha_{11} + u_3 + \alpha_1(u_2 - \alpha_8) + K_p(u_2 - \alpha_9) - \frac{\alpha_7[\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 \alpha_7 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{1 + \alpha_7[f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}, \quad (14)$$

com

$$f(u_2, a, \alpha_{11}) = \exp\left(a \frac{u_2 - \alpha_{11}}{u_2 \alpha_{11}}\right).$$

A equação $G(u_2, p_1, K_p, u_3) = 0$ permite determinar as possíveis temperaturas de equilíbrio no reactor como função de qualquer parâmetro do sistema. Consequentemente, o estudo do comportamento do sistema reactivo traduz-se na análise da variação das soluções dessa equação com a alteração

de um parâmetro distinto. De acordo com as expressões (10) e (11), u_3 é função de u_1 , u_2 e parâmetros. Assim, fixar u_3 e resolver a equação $G(u_2, p_1, K_p, u_3) = 0$ é determinar as possíveis temperaturas de equilíbrio no reactor que estão no plano $u_3 = \text{constante}$. Neste caso, a determinação das soluções de $G(u_2, p_1, K_p, u_3) = 0$ é feita considerando u_3 como um parâmetro do sistema. Logo, o estudo do comportamento do sistema reactivo reduz-se a um problema de bifurcação, em que a variável é u_2 e o parâmetro de bifurcação é um dos parâmetros, incluindo u_3 , do sistema reactivo.

A existência de um elevado número de parâmetros associado ao problema dificulta a manipulação algébrica que é necessário efectuar na aplicação da teoria de singularidades. Com o objectivo de simplificar a expressão (14) faz-se:

$$x = \frac{u_2 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}}, \quad \overline{\alpha}_8 = \frac{\alpha_8 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}} - \frac{u_3}{\alpha_1 \alpha_{11}}$$

$$\overline{\alpha}_9 = \frac{\alpha_9 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}}.$$

Agora os parâmetros envolvidos são:

$$\alpha = (\alpha_1, \overline{\alpha}_2, \alpha_3, \alpha_4, \overline{\alpha}_5, \overline{\alpha}_6, \alpha_7, \overline{\alpha}_8, \overline{\alpha}_9) = \left(\alpha_1, \frac{\alpha_2}{\alpha_{11}}, \alpha_3, \alpha_4, \frac{\alpha_5}{\alpha_{11}}, \frac{\alpha_6}{\alpha_{11}}, \alpha_7, \overline{\alpha}_8, \overline{\alpha}_9 \right)$$

e $\alpha \in \mathbf{R}^9$.

Tendo em conta estas alterações, a expressão de f passa a ser definida por $f(x, a) = \exp\left(a \frac{x}{1+x}\right)$, onde a pode tomar os valores $\overline{\alpha}_2$ e $\overline{\alpha}_2 \alpha_3$. Consequentemente, a expressão (14) escreve-se da seguinte forma:

$$G(x, K_p, \alpha) = (1 + \alpha_1 + K_p)x - \overline{\alpha}_9 K_p - \alpha_1 \overline{\alpha}_8 - \frac{\overline{\alpha}_5 f(x, \overline{\alpha}_2) + \alpha_4 \overline{\alpha}_6 f(x, \overline{\alpha}_2 \alpha_3)}{\alpha_7 [1 + \alpha_7 (f(x, \overline{\alpha}_2) + \alpha_4 f(x, \overline{\alpha}_2 \alpha_3))]} \quad (15)$$

O conjunto dos valores da variável e dos parâmetros que são fisicamente aceitáveis, $\Omega \subset \mathbf{R}^9$, é definido da seguinte forma:

$$\Omega = \{(x, K_p, \alpha) : x, \overline{\alpha}_9 > -1, K_p \geq 0, \overline{\alpha}_8 \in \mathbf{R}, \alpha_1, \overline{\alpha}_2, \alpha_3, \alpha_4, \overline{\alpha}_5, \overline{\alpha}_6, \alpha_7 > 0\},$$

sendo x a temperatura adimensional.

3 Bifurcação estática com $K_I=0$

A teoria de singularidades é aplicada à equação (15) em três casos distintos, diferindo de caso para caso o parâmetro do sistema tomado para parâmetro de bifurcação. Os parâmetros do sistema escolhidos para parâmetro distinto são: K_p , α_7 e $\bar{\alpha}_8$. Os restantes são considerados parâmetros de desdobramento.

Do ponto de vista prático, é importante saber qual a influência da variação dos valores dos ganhos, integral e proporcional, do controlador no tipo de bifurcações encontradas para o sistema. Tendo em conta a análise feita na secção 2, só ocorrem bifurcações estáticas no sistema em estudo quando $K_I = 0$. Logo o único ganho do controlador que influencia o tipo de bifurcações estáticas é K_p .

O estudo do problema de bifurcação $G = 0$, (15), considerando α_7 como parâmetro de bifurcação permite comparar os resultados obtidos nesta secção com os resultados apresentados por Balakotaiah e Luss [1] para um sistema reactivo análogo ao estudado: um reactor CSTR onde ocorrem duas reacções simultâneas, exotérmicas, de primeira ordem e irreversíveis sem controlador. No trabalho efectuado por Balakotaiah e Luss [1] apenas são estudadas as bifurcações estáticas do sistema reactivo sem controlador.

Como foi referido na subsecção 2.2 o caso $K_I = 0$ e $u_3 \neq 0$ não tem significado físico. Contudo, de acordo com o trabalho de Serra e Tablino-Possio[5], nos pontos de equilíbrio correspondentes a esta situação ocorrem algumas das bifurcações do sistema. Logo, o estudo deste caso é importante para compreender o comportamento do sistema quando K_I tende para zero. Quando $K_I = 0$, os planos $u_3 = \text{constante}$ são invariantes pelo fluxo. Para entender como se comporta o sistema em cada um daqueles planos é interessante estudar as soluções da equação $G(x, K_p, \alpha) = 0$ considerando u_3 como parâmetro distinto. Neste trabalho toma-se como parâmetro distinto $\bar{\alpha}_8 = \frac{\alpha_8 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}} - \frac{u_3}{\alpha_1 \alpha_{11}}$ o que é equivalente a considerar $-u_3$ como parâmetro de bifurcação.

Nesta secção usamos a notação

$$G_{x\lambda}^{(i,j)}(x_*, \lambda_*, \alpha_*) = \frac{\partial^{(i+j)} G}{\partial x^i \partial \lambda^j},$$

$$G_x^{(i,0)}(x_*, \lambda_*, \alpha_*) = \frac{\partial^i G}{\partial x^i}$$

e

$$G_\lambda^{(0,j)}(x_*, \lambda_*, \alpha_*) = \frac{\partial^{(j)}G}{\partial \lambda^j}.$$

Para um problema geral de bifurcação $H(x, \lambda, \alpha) = 0$, um ponto $P = (x_*, \lambda_*, \alpha_*)$ é (Golubitsky e Schaeffer [3]):

1. *ponto de dobra* se e só se satisfizer as condições:

$$H(P) = H_x^{(1,0)}(P) = 0 \quad \text{e} \quad H_\lambda^{(0,1)}(P) \neq 0 \neq H_x^{(2,0)}(P).$$

2. *ponto de bifurcação* se e só se satisfizer:

$$H(P) = H_x^{(1,0)}(P) = H_\lambda^{(0,1)}(P) = 0.$$

3. *ponto de Morse* se e só se for um ponto de bifurcação que além disso satisfaça

$$\det D^2 H(P) \neq 0,$$

onde $D^2 H(P)$ é a matriz Hessiana de H , ou seja, um ponto de bifurcação simples é um ponto crítico de Morse de H .

Para calcular os pontos de dobra e de bifurcação o primeiro passo consiste em calcular as derivadas parciais da aplicação $G(x, K_p, \alpha)$. Para simplificar a expressão (15) faz-se:

$$M = \bar{\alpha}_5 f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_4 \bar{\alpha}_6 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3), \quad (16)$$

$$N = f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_4 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3), \quad (17)$$

$$L = 1 + \alpha_7 N, \quad (18)$$

$$Q = (1 + \alpha_1 + K_p)x - \bar{\alpha}_9 K_p - \alpha_1 \bar{\alpha}_8. \quad (19)$$

Logo, a expressão (15) toma a forma:

$$G(x, K_p, \alpha) = Q - \alpha_7 \frac{M}{L} \quad (20)$$

onde,

$$L_x^{(1,0)} = \alpha_7 N_x^{(1,0)}, \quad (21)$$

$$M_x^{(1,0)} = \overline{\alpha_5} f_x^{(1,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 \overline{\alpha_6} f_x^{(1,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (22)$$

$$N_x^{(1,0)} = f_x^{(1,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 f_x^{(1,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (23)$$

$$M_x^{(2,0)} = \overline{\alpha_5} f_x^{(2,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 \overline{\alpha_6} f_x^{(2,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (24)$$

$$N_x^{(2,0)} = f_x^{(2,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 f_x^{(2,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (25)$$

$$M_x^{(3,0)} = \overline{\alpha_5} f_x^{(3,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 \overline{\alpha_6} f_x^{(3,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (26)$$

$$N_x^{(3,0)} = f_x^{(3,0)}(x, \overline{\alpha_2}) + \alpha_4 f_x^{(3,0)}(x, \overline{\alpha_2} \alpha_3), \quad (27)$$

e

$$f(x, a) = \exp\left(a \frac{x}{1+x}\right) \quad (28)$$

com

$$f_x^{(1,0)}(x, a) = \frac{a}{(1+x)^2} f(x, a), \quad (29)$$

$$f_x^{(i,0)}(x, a) = \frac{a}{(1+x)^{2i}} f(x, a) P_{i-2}(x, a), \quad \text{para } i \geq 2 \quad (30)$$

e $P_{i-2}(x, a)$ são os polinómios resultantes da derivação de $f(x, a)$ em ordem a x , quando a ordem da derivada é igual ou superior a dois. As expressões dos polinómios relevantes são apresentadas a seguir:

$$P_0(x, a) = a - 2(1+x), \quad (31)$$

$$P_1(x, a) = a^2 - 6a(1+x) + 6(1+x)^2, \quad (32)$$

As expressões das derivadas relevantes de $G(x, K_p, \alpha)$ são as indicadas a seguir:

$$G_x^{(1,0)} = 1 + \alpha_1 + K_p - \alpha_7 \frac{M_x^{(1,0)}}{L} + \alpha_7^2 \frac{N_x^{(1,0)} M}{L^2}, \quad (33)$$

$$G_x^{(2,0)} = \frac{-\alpha_7 M_x^{(2,0)}}{L} + \frac{\alpha_7^2 (N_x^{(2,0)} M + 2N_x^{(1,0)} M_x^{(1,0)})}{L^2} - \frac{2\alpha_7^3 (N_x^{(1,0)})^2 M}{L^3}, \quad (34)$$

$$G_x^{(3,0)} = \frac{-\alpha_7 M_x^{(3,0)}}{L} + \frac{\alpha_7^2 (N_x^{(3,0)} M + 3N_x^{(2,0)} M_x^{(1,0)} + 3N_x^{(1,0)} M_x^{(2,0)})}{L^2} - \frac{6\alpha_7^3 (N_x^{(1,0)})^2 M_x^{(1,0)} + MN_x^{(1,0)} N_x^{(2,0)}}{L^3} + \frac{6\alpha_7^4 (N_x^{(1,0)})^3 M}{L^5}, \quad (35)$$

$$G_{K_p}^{(0,1)} = x - \overline{\alpha_9}, \quad (36)$$

$$G_{xK_p}^{(1,1)} = 1, \quad (37)$$

$$G_{\alpha_7}^{(0,1)} = -\frac{M}{L^2}. \quad (38)$$

$$G_{\alpha_8}^{(0,1)} = -\alpha_1. \quad (39)$$

3.1 Bifurcação com $\lambda = K_p$ como parâmetro de bifurcação

Proposição 3.1 *Para o problema de bifurcação $G(x, \lambda, \alpha) = 0$ definido pela expressão (15), todos os pontos de bifurcação são pontos de Morse.*

Demonstração:

De acordo com a expressão que define $G_{x\lambda}^{(1,1)}$, (37), o valor desta derivada é constante e igual a um.

Como $G_\lambda^{(0,1)} = x - \overline{\alpha_9}$, (36), facilmente se deduz que $G_\lambda^{(0,2)} = 0 \forall (x, \lambda, \alpha) \in \Omega$.

Tendo em atenção as considerações acima, segue que

$$\det D^2 G(x, \lambda, \alpha) = \text{Det} \left(\begin{bmatrix} G_x^{(2,0)} & G_{x\lambda}^{(1,1)} \\ G_{\lambda x}^{(1,1)} & G_\lambda^{(0,2)} \end{bmatrix} \right) = -1 \neq 0$$

□

Teorema 3.2 *Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^9 \longrightarrow \mathbf{R}$, a aplicação definida de acordo com a expressão (15). Então, as condições envolvendo os parâmetros para que existam pontos de dobra são:*

1. $G = 0$.

$$\alpha_3 = \frac{1+x}{\bar{\alpha}_2 x} \ln \left[\frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} \right]$$

e

$$\text{ou } \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} > 1 \quad e \quad u_2 > \alpha_{11},$$

$$\text{ou } 0 < \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} < 1 \quad e \quad 0 < u_2 < \alpha_{11}.$$

2. $G_x^{(1,0)} = 0$.

$$\alpha_1 = \frac{-(1+K_p)L^2 + \alpha_7 M_x^{(1,0)} L - \alpha_7^2 N_x^{(1,0)} M}{L^2} \quad e$$

$$0 < (1+x)^2 < \frac{\bar{\alpha}_2 \alpha_7 L [\bar{\alpha}_5 f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3 \alpha_4 \bar{\alpha}_6 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)]}{(1+K_p)L^2}$$

$$\frac{\bar{\alpha}_2 \alpha_7^2 [f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3 \alpha_4 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)] M}{(1+K_p)L^2}$$

$$e \quad L > \frac{\alpha_7 [f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3 \alpha_4 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)] M}{\bar{\alpha}_5 f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3 \alpha_4 \bar{\alpha}_6 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)}.$$

3. $G_\lambda^{(0,1)} \neq 0$.

$$x \neq \bar{\alpha}_9.$$

4. $G_x^{(2,0)} \neq 0$.

$$M_x^{(2,0)} L^2 + 2\alpha_7^2 (N_x^{(1,0)})^2 M \neq \alpha_7 L (N_x^{(2,0)} M + 2N_x^{(1,0)} M_x^{(1,0)}).$$

Demonstração:

A demonstração do teorema é efectuada recorrendo a três lemas. Nos lemas 1 e 2 são enunciadas condições, envolvendo os parâmetros de desdobramento, necessárias para que a aplicação $G(x, \lambda, \alpha)$ satisfaça as condições:

$$G = G_x^{(1,0)} = 0.$$

O lema 3 identifica as condições necessárias para que existam *pontos de dobra*.

Lema 1 *Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^9 \rightarrow \mathbf{R}$, a aplicação definida de acordo com a expressão (15). Então, as condições envolvendo os parâmetros para que $G = 0$ são:*

$$\alpha_3 = \frac{1+x}{\bar{\alpha}_2 x} \ln \left[\frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} \right] e$$

$$\text{ou } \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} > 1 \quad e \quad u_2 > \alpha_{11},$$

$$\text{ou } 0 < \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} < 1 \quad e \quad 0 < u_2 < \alpha_{11}.$$

Demonstração:

Substituindo as expressões L , (18), M , (16), e N , (17), em $G = 0$, (20), resulta:

$$Q = \frac{\alpha_7 [\bar{\alpha}_5 f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_4 \bar{\alpha}_6 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)]}{1 + \alpha_7 [f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_4 f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)]}. \quad (40)$$

Como por definição $\alpha_4, \bar{\alpha}_5, \bar{\alpha}_6, \alpha_7 > 0$ e $f(x, \bar{\alpha}_2), f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3) > 0$, então $Q > 0 \forall (x, \lambda, \alpha) \in \Omega$.

Substituindo $f(x, \bar{\alpha}_2 \alpha_3)$, (28) para $a = \bar{\alpha}_2 \alpha_3$, em (40), e resolvendo a expressão resultante em ordem a α_3 , obtem-se:

$$\alpha_3 = \frac{1+x}{\bar{\alpha}_2 x} \ln \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} \quad e \quad x \neq 0 \quad (41)$$

Por definição $\alpha_3 > 0$, logo, para que α_3 esteja bem definido é necessário acrescentar à expressão (41) as seguintes condições :

$$\text{ou } \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} > 1 \quad e \quad \frac{1+x}{\bar{\alpha}_2 x} > 0 \quad (42)$$

$$\text{ou } 0 < \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4 \alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} < 1 \quad e \quad \frac{1+x}{\bar{\alpha}_2 x} < 0 \quad (43)$$

Dado que por definição $x > -1$, então $1 + x > 0 \forall (x, K_p, \alpha) \in \Omega$.

Sabe-se também que, por definição, $x = \frac{u_2 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}}$ e $u_2, \bar{\alpha}_2$ e $\alpha_{11} > 0$, então a segunda condição da expressão (42) é equivalente a $u_2 > \alpha_{11}$. Consequentemente, a expressão (42) é equivalente à seguinte condição:

$$\frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4\alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} > 1 \quad e \quad u_2 > \alpha_{11}. \quad (44)$$

Por um raciocínio análogo ao feito para a condição (42), deduz-se que a expressão (43) é equivalente a:

$$0 < \frac{\alpha_7(\bar{\alpha}_5 - Q)f(x, \bar{\alpha}_2) - Q}{\alpha_4\alpha_7(Q - \bar{\alpha}_6)} < 1 \quad e \quad 0 < u_2 < \alpha_{11}. \quad (45)$$

□

Lema 2 *Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^9 \rightarrow \mathbf{R}$, a aplicação definida de acordo com a expressão (15). Então, as condições envolvendo os parâmetros para que $G_x^{(1,0)} = 0$ são:*

$$\alpha_1 = \frac{-(1 + K_p)L^2 + \alpha_7 M_x^{(1,0)}L - \alpha_7^2 N_x^{(1,0)}M}{L^2} e$$

$$0 < (1 + x)^2 < \frac{\bar{\alpha}_2\alpha_7L [\bar{\alpha}_5f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4\bar{\alpha}_6f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)] - \bar{\alpha}_2\alpha_7^2 [f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]M}{(1 + K_p)L^2} e$$

$$L > \frac{\alpha_7 [f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]M}{\bar{\alpha}_5f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4\bar{\alpha}_6f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)}.$$

Demonstração:

Resolvendo a equação $G_x^{(1,0)} = 0$, (33), em ordem a α_1 resulta:

$$\alpha_1 = \frac{-(1 + K_p)L^2 + \alpha_7 M_x^{(1,0)}L - \alpha_7^2 N_x^{(1,0)}M}{L^2}. \quad (46)$$

Por hipótese $\alpha_1 > 0$, logo é necessário acrescentar a (46) a condição:

$$-(1 + K_p)L^2 + \alpha_7 M_x^{(1,0)}L - \alpha_7^2 N_x^{(1,0)}M > 0. \quad (47)$$

Substituindo as expressões $M_x^{(1,0)}$, (22), $N_x^{(1,0)}$, (23), $f_x^{(1,0)}(x, \bar{\alpha}_2)$, (29) com $a = \bar{\alpha}_2$ e $f_x^{(1,0)}(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)$, (29) com $a = \bar{\alpha}_2\alpha_3$, em (47) resulta:

$$(1+x)^2 < \frac{\bar{\alpha}_2\alpha_7L[\bar{\alpha}_5f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4\bar{\alpha}_6f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]}{(1+K_p)L^2} - \frac{\bar{\alpha}_2\alpha_7^2[f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]M}{(1+K_p)L^2}. \quad (48)$$

Para $(1+x)^2$ estar bem definido, o segundo membro da desigualdade anterior tem que ser maior que zero. Logo, é necessário que se verifique, também, que a fracção

$$\frac{\bar{\alpha}_2\alpha_7L[\bar{\alpha}_5f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4\bar{\alpha}_6f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)] - \bar{\alpha}_2\alpha_7^2[f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]M}{(1+K_p)L^2} \quad (49)$$

seja positiva. Uma vez que, por definição, $K_p \geq 0$, tem-se que $(1+K_p)L^2 > 0 \forall (x, K_p, \alpha) \in \Omega$. Então, como por definição $\bar{\alpha}_2, \alpha_7 > 0$, a expressão (49) é equivalente a:

$$L > \frac{\alpha_7[f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)]M}{\bar{\alpha}_5f(x, \bar{\alpha}_2) + \alpha_3\alpha_4\bar{\alpha}_6f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3)}. \quad (50)$$

Por definição $\alpha_3, \alpha_4, \bar{\alpha}_5, \bar{\alpha}_6, \alpha_7 > 0$ e $f(x, \bar{\alpha}_2), f(x, \bar{\alpha}_2\alpha_3) > 0$, logo $L = 1 + \alpha_7N > 0$ e $M > 0 \forall (x, K_p, \alpha) \in \Omega$. Consequentemente, o segundo membro da desigualdade (50) é sempre maior que zero e, portanto, L está bem definido.

□

Lema 3 *Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^9 \rightarrow \mathbf{R}$, a aplicação definida de acordo com a expressão (15). Então, as condições envolvendo os parâmetros para que existam pontos de dobra são as dos lemas 1 e 2 acima com:*

1. $G_\lambda^{(0,1)} \neq 0$

$$x \neq \bar{\alpha}_9$$

e

2. $G_x^{(2,0)} \neq 0$

$$M_x^{(2,0)}L^2 + 2\alpha_7^2(N_x^{(1,0)})^2M \neq \alpha_7L(N_x^{(2,0)}M + 2N_x^{(1,0)}M_x^{(1,0)}).$$

Demonstração:

Tendo em atenção a expressão $G_\lambda^{(0,1)}$, (36), facilmente se deduz que $G_\lambda^{(0,1)} \neq 0$ se e só se $x \neq \overline{\alpha_9}$.

A derivada $G_x^{(2,0)}$, de acordo com a expressão (34), é diferente de zero se e só se

$$M_x^{(2,0)}L^2 + 2\alpha_7^2 \left(N_x^{(1,0)}\right)^2 M \neq \alpha_7 L \left(N_x^{(2,0)}M + 2N_x^{(1,0)}M_x^{(1,0)}\right).$$

□

Os pontos de equilíbrio que surgem no sistema quando $K_I = 0$ e $x \neq \overline{\alpha_9}$ são, na situação mais extrema, *pontos de dobra simples* ou *pontos de dobra degenerados*. Estas são as bifurcações estáticas que é possível encontrar no sistema com $x \neq \overline{\alpha_9}$. Os pontos de equilíbrio nos quais $x = \overline{\alpha_9}$ são os únicos que persistem para $K_I > 0$. No caso de $K_I = 0$, de acordo com a proposição 3.1, estes pontos são *pontos de Morse* se os valores dos parâmetros α satisfizerem as condições dadas nos lemas 1 e 2. Caso contrário não são *pontos de bifurcação*.

Em geral as soluções não triviais do problema de bifurcação $G(x, \lambda, \alpha) = 0$, (15) com $\lambda = K_p$, correspondem a bifurcação transcritical[3]. Neste caso as curvas que são solução do problema cruzam-se transversalmente, e cada curva pode ser escrita com x em função de λ . Contudo, em alguns pontos, tratados a seguir, pode verificar-se que $G_x^{(2,0)} = 0$, logo a afirmação anterior deixa de ser válida.

Sejam $(x(\tau), \lambda(\tau))$ as soluções de $G(x, \lambda) = 0$ para um α fixo. Derivando implicitamente $G(x(\tau), \lambda(\tau)) = 0$ num ponto que satisfaz as condições $G = G_x^{(1,0)} = G_\lambda^{(0,1)} = 0$, e usando $G_x^{(2,0)} = G_\lambda^{(0,2)} = 0$ e $G_{x\lambda}^{(1,1)} = 1$ resulta que ou $x' = 0$ ou $\lambda' = 0$. Logo, a curva de soluções de $G = 0$ tem um ramo que satisfaz $x' = 0$, correspondendo a ter $G_\lambda^{(0,2)} = 0$ e outro no qual $\lambda' = 0$, ou seja, $G_x^{(2,0)} = 0$. No ramo onde $\lambda' = 0$, que corresponde à condição $G_x^{(2,0)} = 0$, a curva tem tangente vertical e existe a possibilidade de uma bifurcação tipo “pitchfork”. Para que este tipo de bifurcação ocorra é necessário que, no ponto onde G satisfaz $G = G_x^{(1,0)} = G_\lambda^{(0,1)} = G_x^{(2,0)} = 0$, se verifique a condição $G_x^{(3,0)} \neq 0$, isto é $\lambda'' \neq 0$. Se esta condição não for verificada, então a curva com tangente vertical pode ser mais degenerada.

No sistema em estudo neste trabalho e de acordo com a expressão, (35),

tem-se que:

$$G_x^{(3,0)} = \frac{-\alpha_7 M_x^{(3,0)}}{L} + \frac{\alpha_7^2 \left(N_x^{(3,0)} M + 3N_x^{(2,0)} M_x^{(1,0)} + 3N_x^{(1,0)} M_x^{(2,0)} \right)}{L^2} - \frac{6\alpha_7^3 \left(N_x^{(1,0)} \right)^2 M_x^{(1,0)} + M N_x^{(1,0)} N_x^{(2,0)}}{L^3} + 6\alpha_7^4 \frac{\left(N_x^{(1,0)} \right)^3 M}{L^5},$$

Logo, pela análise desta expressão, facilmente se deduz que $G_x^{(3,0)}$ pode ser zero, mas também existem valores dos parâmetros α para os quais $G_x^{(3,0)} \neq 0$.

Como existem nove parâmetros no problema de bifurcação é possível que existam condições, envolvendo esses parâmetros, para que sejam satisfeitas as condições:

$$G = G_x^{(1,0)} = G_\lambda^{(0,1)} = G_x^{(2,0)} = \dots = G_x^{(9,0)} = 0.$$

Neste trabalho não é determinado o maior número inteiro n para o qual as equações $G = G_x^{(1,0)} = \dots = G_x^{(n,0)} = 0$ têm solução simultânea.

No caso de $G = G_x^{(1,0)} = G_\lambda^{(0,1)} = 0$ e $G_x^{(2,0)} \neq 0$ a expressão resultante de derivar implicitamente $G(x(\tau), \lambda(\tau)) = 0$ duas vezes toma a forma:

$$x' \cdot \left(G_x^{(2,0)} x' + 2\lambda' \right) = 0.$$

Logo a curva solução de $G = 0$ tem dois ramos, um com tangente horizontal, $x' = 0$, e outro que satisfaz $G_x^{(2,0)} x' = -2\lambda'$. Neste caso a bifurcação é transcítica.

3.2 Bifurcação com $\lambda = \alpha_7$ como parâmetro de bifurcação

Teorema 3.3 *Seja $g(x, \lambda, \alpha) = G(x, K_p, \alpha) = 0$ o problema de bifurcação definido pela expressão (15). Então, para todos os valores dos parâmetros α , nenhum ponto (x_*, λ_*) é ponto de bifurcação da aplicação g .*

Demonstração:

Para que $G = 0$, (20), tenha um ponto de bifurcação é necessário que existam condições, envolvendo os parâmetros, para que as equações $g = g_x^{(1,0)} = g_\lambda^{(0,1)} = 0$ tenham solução simultânea.

De acordo com os lemas 1 e 2 do teorema 1 da secção 3.1, existem condições envolvendo os parâmetros para que G satisfaça as condições $G = G_x^{(1,0)} = 0$

e essas condições são dadas pelas expressões (41), (44) e (45) do lema 1 e pelas condições (46), (48) e (50) do lema 2.

De acordo com a expressão (38), sabe-se que $G_\lambda^{(0,1)} = -\frac{M}{L^2}$.

Dado que por definição $\alpha_4, \bar{\alpha}_5, \bar{\alpha}_6, f(x, \alpha_2)$ e $f(x, \alpha_2 \alpha_3) > 0$, então, tendo em atenção a expressão que define M , (16), $M > 0 \forall (x, \lambda, \alpha) \in \Omega$. Consequentemente, da expressão (38), conclui-se que $G_\lambda^{(0,1)} < 0 \forall (x, K_p, \alpha) \in \Omega$.
□

Da demonstração do teorema 3.3 e do lema 3, segue-se:

Corolário 3.4 *Existem condições envolvendo os parâmetros α de desdobramento para que o problema de bifurcação $g(x, \lambda, \alpha) = G(x, K_p, \alpha) = 0$ tenha pontos de dobra.*

Tendo em atenção os resultados atrás enunciados, facilmente se conclui que, sendo α_7 o parâmetro de bifurcação, as bifurcações estáticas que ocorrem no sistema consistem em *pontos de dobra*. Estes pontos são *pontos de dobra simples* se as derivadas de $G(x, \lambda, \alpha)$, relativamente a x , de ordem superior ou igual a 2 forem diferentes de zero. Caso contrário são *pontos de dobra degenerados*.

Balakotaiah e Luss[1] estudaram um sistema reactivo análogo ao apresentado neste trabalho: um CSTR onde ocorrem duas reacções simultâneas, de primeira ordem e irreversíveis sem controlador, considerando a variável definida por $\theta = \frac{\alpha_2(u_2 - T_i)}{T_i^2}$. No seu trabalho apenas foram estudadas as bifurcações estáticas do sistema. O resultado apresentado por aqueles autores aponta para a existência de valores dos parâmetros de desdobramento e de valores das variáveis θ e $\lambda = \alpha_7$ para os quais o problema de bifurcação $F(\theta, \lambda, \bar{\alpha}) = 0$ é equivalente à singularidade $g = y^5 + \nu y$. Neste caso as condições de definição do problema são:

$$F = F_\theta^{(1,0)} = \dots = F_\theta^{(4,0)} = F_\lambda^{(0,1)} = 0$$

e cujas condições de não-degenerescência são: $F_\theta^{(5,0)} \neq 0 \neq F_{\theta\lambda}^{(1,1)}$.

A validade destas condições implica que existem pontos de equilíbrio do sistema que são *pontos de bifurcação*. Este resultado parece ser contraditório uma vez que para $K_p = 0$ e $u_3 = 0$ a expressão que define $G(x, \lambda, \alpha)$, (15)

com $\lambda = \alpha_7$, transforma-se na seguinte expressão:

$$G(x, \alpha) = (1 + \alpha_1)x - \alpha_1\bar{\alpha}_8 - \alpha_7 \frac{\bar{\alpha}_5 f(x, \alpha_2) + \alpha_4 \bar{\alpha}_6 f(x, \alpha_2 \alpha_3)}{1 + \alpha_7 [f(x, \alpha_2) + \alpha_4 f(x, \alpha_2 \alpha_3)]},$$

onde

$$x = \frac{u_2 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}}, \quad \bar{\alpha}_8 = \frac{\alpha_8 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}}$$

e, usando, (3), $\alpha_{11} = T_i$.

A equação $G(x, \alpha) = 0$ define o problema de bifurcação de um sistema reactivo igual ao estudado por Balakotaiah e Luss[1].

A derivada parcial $G_\lambda^{(0,1)}$, (38) com $\lambda = \alpha_7$, não depende do parâmetro K_p nem de u_3 e tem valor negativo para todo o ponto $(x, \lambda, \alpha) \in \Omega$. O que significa que o sistema sem controlador também não apresenta *pontos de bifurcação*.

As condições, envolvendo os parâmetros para que existam *pontos de dobra* no sistema estudado por [1] são as condições enunciadas no teorema 3.3 desta secção, com $K_p = 0$ e $u_3 = 0$.

Tendo em conta o atrás referido, as bifurcações consistem, quer do sistema com controlador quer sem controlador, em *pontos de dobra* ou *pontos de dobra degenerados*. A diferença entre os resultados apresentados em [1] e os obtidos neste trabalho podem resultar da forma como foram definidos os parâmetros $\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_5, \bar{\alpha}_6$ e a variável x . Neste trabalho, aqueles parâmetros foram definidos, de acordo com o referido na secção 1, da seguinte forma:

$$\alpha_1 = \frac{UA}{F\rho C_p}; \quad \bar{\alpha}_5 = \frac{(-\Delta H_1)C_i}{\rho C_p T_{iset}}; \quad \bar{\alpha}_6 = \frac{(-\Delta H_2)C_i}{\rho C_p T_{iset}}.$$

Balakotaiah e Luss agrupa os parâmetros originais do problema de tal forma que resulta para $\alpha_1, \bar{\alpha}_5$, e $\bar{\alpha}_6$ as seguintes expressões:

$$\alpha_1 = \frac{UA}{V\rho C_p K_1}; \quad \bar{\alpha}_5 = \frac{\alpha_2(-\Delta H_1)C_i}{\rho C_p T_i}; \quad \bar{\alpha}_6 = \frac{\alpha_2(-\Delta H_2)C_i}{\rho C_p T_i}.$$

Como consequência, no trabalho de Balakotaiah e Luss[1] a equação $G = 0$ tem grau dois em α_7 , ao contrário da apresentada neste trabalho que tem grau 1. Logo, contrariamente ao resultado apresentado por [1], no presente trabalho, para um dado valor dos parâmetros α e para um determinado valor da variável x , existe apenas um valor de α_7 que satisfaz a equação $G = 0$.

3.3 Bifurcação com $\lambda = \overline{\alpha_8}$ como parâmetro de bifurcação

Teorema 3.5 *Seja $g(x, \lambda, \alpha) = G(x, K_p, \alpha) = 0$ o problema de bifurcação definido pela expressão (15). Então, para todos os valores dos parâmetros α nenhum ponto (x_*, λ_*) é ponto de bifurcação da aplicação g .*

Demonstração:

Para que $G = 0$, (20), tenha um ponto de bifurcação é necessário que existam condições, envolvendo os parâmetros, para que as equações $g = g_x^{(1,0)} = g_\lambda^{(0,1)} = 0$ tenham solução simultânea.

De acordo com os lemas 1 e 2 do teorema 1 da secção 3.1, existem condições envolvendo os parâmetros para que G satisfaça as condições $G = G_x^{(1,0)} = 0$ e essas condições são dadas pelas expressões (41), (44) e (45) do lema 1 e pelas condições (46), (48) e (50) do lema 2.

De acordo com a expressão que define $G_\lambda^{(0,1)}$, (39), o valor desta derivada é sempre $-\alpha_1$. Uma vez que por definição $\alpha_1 > 0$, facilmente se conclui que $G_\lambda^{(0,1)} < 0 \forall (x, \lambda, \alpha) \in \Omega$. \square

O parâmetro $\lambda = \overline{\alpha_8}$ é, de acordo com o definido na secção 2.2, dado pela expressão:

$$\overline{\alpha_8} = \frac{\alpha_8 - \alpha_{11}}{\alpha_{11}} - \frac{u_3}{\alpha_1 \alpha_{11}}.$$

O resultado do teorema acima enunciado, permite concluir que, quando $K_I = 0$, em cada plano $u_3 = \text{constante}$ não existem pontos de equilíbrio que sejam pontos críticos. Portanto, as bifurcações estáticas do sistema quando se varia os planos invariantes são, no pior dos casos, *pontos de dobra simples* ou *pontos de dobra degenerados*. Desta forma, para um dado valor de parâmetros $\alpha = (\alpha_1, \overline{\alpha_2}, \alpha_3, \alpha_4, \overline{\alpha_5}, \overline{\alpha_6}, \alpha_7, \overline{\alpha_9}, K_p)$ a passagem de um plano invariante para outro faz-se sem que a curva solução do problema de bifurcação $G(x, \lambda, \alpha) = 0$ se auto-intersecte.

No entanto, o resultado da secção 3.1 quando $x = \overline{\alpha_9}$ permite concluir que para um valor de u_3 , isto é, fixando um plano invariante pelo fluxo, e para um dado valor de $\alpha = (\alpha_1, \overline{\alpha_2}, \alpha_3, \alpha_4, \overline{\alpha_5}, \overline{\alpha_6}, \alpha_7, \overline{\alpha_8}, \overline{\alpha_9})$, existem condições envolvendo os parâmetros, enunciadas nos lemas 1 e 2, e valores de K_p para os quais o sistema tem *pontos de Morse*.

4 Bifurcação Dinâmica

Nesta secção utiliza-se a teoria de singularidades para estudar as bifurcações de Hopf generalizadas do sistema dinâmico com controlador PI. Em particular identifica-se, no espaço de parâmetros, as bifurcações degeneradas de Hopf em que falha a primeira hipótese do teorema de bifurcação de Hopf. Isto é, como o sistema considerado é tridimensional, determina-se o conjunto dos valores dos parâmetros que dão origem a mais que um valor próprio nulo.

Do ponto de vista prático, é importante saber qual a influência da variação dos valores dos ganhos, integral e proporcional, do controlador no tipo de bifurcações encontradas para o sistema. Por isso, o estudo das bifurcações de Hopf faz-se escolhendo os ganhos do controlador, K_I e K_p , para parâmetros de bifurcação.

4.1 Resultados gerais sobre sistemas com controladores PI

Nesta secção descrevem-se os resultados de Serra e Tablino-Possio [5] sobre modelos tridimensionais para o reactor CSTR com controlador PI. As demonstrações são diferentes das apresentadas em [5] e foram consideravelmente simplificadas.

O sistema dinâmico tridimensional sem controlador é descrito pelas seguintes equações diferenciais:

$$\begin{aligned}\frac{du_1}{dt} &= h_1(u_1, u_2, p_1) \\ \frac{du_2}{dt} &= h_2(u_1, u_2, p_1) + T_i\end{aligned}\tag{51}$$

As funções h_1 e h_2 são funções arbitrárias que descrevem a dinâmica do reactor sem controlador.

Quando se agrega o controlador PI o sistema passa a ser descrito por:

$$\frac{du}{dt} = H(u, p),\tag{52}$$

onde $p = (p_1, K_I, K_p)$, $u = (u_1, u_2, u_3)$ e $H : \mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^p \rightarrow \mathbf{R}^3$ é definida por $H = (H_1, H_2, H_3)$ cujas funções coordenadas são:

$$H_1 = h_1(u_1, u_2, p_1);$$

$$H_2 = h_2(u_1, u_2, p_1) - K_p(u_2 - \alpha_9) - u_3;$$

$$H_3 = K_I(u_2 - \alpha_9).$$

Agora estuda-se as soluções de $\frac{du}{dt} = H(u, p)$. No caso concreto de (6) a (8) os pontos de equilíbrio são:

1. $K_I > 0$ e $H_i(u_1, u_2, -u_3, p_1) = 0$, $i = 1, 2$.

Neste caso $u_2 = \alpha_9$ e os pontos de equilíbrio não dependem de K_I nem de K_p , mas depende do número de soluções das equações $H_1 = H_2 = 0$. No caso particular do sistema reactivo estudado, verificou-se que estas equações podem ser resolvidas explicitamente obtendo-se uma solução única. Uma vez que $K_I \neq 0$ estes são os únicos pontos de equilíbrio.

2. $K_I = 0$.

Agora u_2 pode ser diferente de α_9 . No caso do sistema reactivo considerado neste trabalho esta situação foi discutida na secção 2. As considerações no caso geral são análogas às da secção 2.2.

Serra e Tablino-Possio [5] supõem que o sistema com controlador PI restringe o número de pontos de equilíbrio a um independentemente do facto de esse sistema sem controlador atingir um ou múltiplos estados estacionários e que o controlador por si só não introduz nenhum ponto de equilíbrio no sistema. Estas considerações estão de acordo com o referido no ponto 1 desta subsecção.

A linearização de H em torno do ponto de equilíbrio $(u, p_1, K_I, K_p) = (u_1, u_2, u_3, p_1, K_I, K_p)$ é:

$$Lu = \frac{du}{dt} - Au,$$

onde A é a matriz Jacobiana de H calculada no ponto (u, p_1, K_I, K_p) , ou seja:

$$A = (DH)_{(u,p)} = \begin{bmatrix} & & 0 \\ & \tilde{A} & \\ 0 & K_I & 0 \end{bmatrix}$$

A matriz \tilde{A} é a matriz Jacobiana associada ao sistema dinâmico considerando $K_I = 0$, isto é, o controlador passa a funcionar só com o módulo proporcional. Esta matriz é definida por:

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial u_1} & \frac{\partial h_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial h_2}{\partial u_1} & \frac{\partial h_2}{\partial u_2} - K_p \end{bmatrix},$$

sendo as derivadas parciais calculadas no ponto de equilíbrio do sistema, (u_1, u_2, p_1, K_p) . Os polinómios característicos das matrizes A e \tilde{A} são :

$$P_A(x) = -x^3 + TrA \cdot x^2 - mA \cdot x + DetA = 0 \quad (53)$$

e

$$P_{\tilde{A}}(x) = x^2 - Tr\tilde{A} \cdot x + Det\tilde{A} = 0, \quad (54)$$

respectivamente, com coeficientes:

$$TrA = Tr\tilde{A} = \frac{\partial h_1}{\partial u_1} + \frac{\partial h_2}{\partial u_2} - K_p, \quad (55)$$

$$DetA = K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1}, \quad (56)$$

$$mA = Det\tilde{A} + K_I, \quad (57)$$

$$Det\tilde{A} = \frac{\partial h_1}{\partial u_1} \left(\frac{\partial h_2}{\partial u_2} - K_p \right) - \frac{\partial h_2}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial u_2}. \quad (58)$$

Os três invariantes algébricos: TrA , $DetA$ e mA , são lineares relativamente aos ganhos do controlador PI e permitem, analiticamente, localizar no plano (K_I, K_p) algumas fronteiras de bifurcação importantes[5].

Os resultados gerais sobre modelos tridimensionais para o reactor CSTR com controlador PI são enunciados nas quatro proposições que se seguem. Note-se que as três primeiras proposições são resultados de Serra e Tablino-Possio[5], mas as demonstrações são diferentes das apresentadas por estes autores. Na última proposição desta secção, são apresentadas condições para que o lugar geométrico das bifurcações de Hopf tenha auto-intersecções. Este resultado é diferente do apresentado no trabalho de Serra e Tablino-Possio[5].

Observação: Sejam r_1 , r_2 e r_3 raízes do polinómio característico da matriz A . Então, tendo em atenção a expressão (53),

$$TrA = r_1 + r_2 + r_3; \quad (59)$$

$$DetA = r_1 r_2 r_3; \quad (60)$$

$$mA = r_1 r_2 + r_2 r_3 + r_1 r_3. \quad (61)$$

Proposição 4.1 *Se $K_I = 0$ então a linearização, A , de (52) em torno de um ponto de equilíbrio tem sempre um valor próprio nulo.*

Demonstração:

De acordo com a expressão (60) da observação anterior sabe-se que

$$\text{Det}A = r_1 r_2 r_3,$$

mas, tendo em atenção a expressão (56) resulta que:

$$\text{Det}A = K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1}$$

e, por hipótese $K_I = 0$, logo

$$\text{Det}A = r_1 r_2 r_3 = K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0.$$

□

Proposição 4.2 *A matriz A , 3×3 , tem dois valores próprios imaginários puros se e só se*

$$\text{Tr}A \cdot mA - \text{Det}A = 0 \quad e \quad mA > 0. \quad (62)$$

Neste caso os valores próprios associados A são $\text{Tr}A$ e $\pm i\sqrt{mA}$.

Demonstração:

Inicia-se a demonstração provando que se A tem dois valores próprios imaginários puros, então

$$\text{Tr}A \cdot mA - \text{Det}A = 0 \quad e \quad mA > 0.$$

Se r_1 , r_2 e r_3 forem as raízes do polinómio característico da matriz A e se $r_2 = ib = -r_3$, com $b \in \mathbf{R}$ e $b > 0$, então $r_2 + r_3 = 0$ e $r_2 r_3 = b^2$. Substituindo estas expressões em (59), (60) e (61), resultam as igualdades:

$$\text{Det}A = r_1 b^2;$$

$$\text{Tr}A = r_1;$$

$$mA = r_1(r_2 + r_3) + r_2 r_3 = b^2.$$

Logo, facilmente se deduz que

$$\text{Tr}A \cdot mA = \text{Det}A \quad \text{e} \quad mA > 0.$$

Reciprocamente, suponha-se que $\text{Tr}A \cdot mA = \text{Det}A$ e $mA > 0$.

Substituindo $\text{Det}A$ por $\text{Tr}A \cdot mA$ no polinómio característico de A , (53), obtem-se

$$\begin{aligned} P_A(x) &= -x^3 + \text{Tr}A \cdot x^2 - mA \cdot x + \text{Tr}A \cdot mA \\ &= -(x - \text{Tr}A)(x^2 + mA). \end{aligned} \quad (63)$$

Logo, $P_A(x) = 0$ se e só se $x = \text{Tr}A$ ou $x = \pm i\sqrt{mA}$, onde, por hipótese, $mA > 0$.

É de notar que, quando é verificada a condição (62), é possível ocorrer duas situações diferentes: ou $\text{Det}A = 0$ ou $\text{Det}A \neq 0$. Estes dois casos vão ser estudados separadamente.

1. $\text{Det}A \neq 0$.

Neste caso, como $\text{Tr}A \neq 0$ e $mA \neq 0$, o polinómio característico tem duas raízes imaginárias puras $\pm i\sqrt{mA}$ e a terceira tem valor igual a $\text{Tr}A$.

2. $\text{Det}A = 0$.

Neste caso a condição (62) é equivalente a $\text{Tr}A \cdot mA = \text{Det}A = 0$, com $mA > 0$. Logo, $\text{Tr}A = 0$. Assim, tendo em conta a expressão (63), deduz-se que duas raízes do polinómio são $\pm i\sqrt{mA}$, com $mA > 0$ e a terceira raiz é nula.

□

Proposição 4.3 *Considere-se a matriz A , 3×3 e suponha-se $K_I \rightarrow 0^+$. Se o lugar geométrico, no plano (K_I, K_p) , definido por $\text{Tr}A \cdot mA = \text{Det}A$, com $mA > 0$, se aproximar de um ponto $(0, K_p)$ nesse ponto ocorre uma das seguintes situações:*

1. dois valores próprios são imaginários puros, $\pm i\sqrt{\text{Det}\tilde{A}}$ e o terceiro é nulo,
2. dois valores próprios são nulos e o outro é $\text{Tr}A = \text{Tr}\tilde{A}$.

Demonstração:

Quando $K_I = 0$ tem-se que $P_A(x) = -x \cdot P_{\tilde{A}}(x)$, logo $P_A(x) = 0$ se e só se $x = 0$ ou $P_{\tilde{A}}(x) = 0$. As raízes de $P_A(x)$ para $K_I = 0$ são $x = 0$ e as raízes de $P_{\tilde{A}}(x)$.

Quando $K_I \rightarrow 0^+$, tem-se que mA tende para $Det\tilde{A}$. Se $mA > 0$ para $K_I > 0$ então $\lim_{K_I \rightarrow 0^+} mA \geq 0$. Logo $Det\tilde{A} \geq 0$ nos pontos de acumulação $(0, K_p)$.

A condição $TrA \cdot mA = DetA$, tendo em atenção (55), (56) e (57) que relacionam os invariantes algébricos de A e \tilde{A} , é equivalente a :

$$Tr\tilde{A} \left(Det\tilde{A} + K_I \right) = TrA \cdot mA = DetA = K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1}. \quad (64)$$

Se $Det\tilde{A} = 0$ então os valores próprios de \tilde{A} são $Tr\tilde{A} = TrA$ e zero.

Se $Det\tilde{A} > 0$ e $Tr\tilde{A} = 0$ e então os valores próprios são $\pm i\sqrt{Det\tilde{A}}$. \square

Seja:

$$M = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial u_1} & \frac{\partial h_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial h_2}{\partial u_1} & \frac{\partial h_2}{\partial u_2} \end{bmatrix},$$

a matriz da linearização do sistema sem controlador.

Os invariantes algébricos desta matriz são:

$$DetM = \frac{\partial h_1}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial u_2} - \frac{\partial h_1}{\partial u_2} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial u_1}, \quad (65)$$

$$TrM = \frac{\partial h_1}{\partial u_1} + \frac{\partial h_2}{\partial u_2}. \quad (66)$$

As expressões dos invariantes algébricos das matrizes A e \tilde{A} , (55) a (58), podem ser escritas em termos das expressões de $DetM$ e TrM . Assim, tem-se:

$$Det\tilde{A} = DetM - K_p \frac{\partial h_1}{\partial u_1}, \quad (67)$$

$$\text{Tr}A = \text{Tr}\tilde{A} = \text{Tr}M - K_p, \quad (68)$$

$$\text{Det}A = K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1}, \quad (69)$$

$$mA = \text{Det}M - K_p \frac{\partial h_1}{\partial u_1} + K_I. \quad (70)$$

Proposição 4.4 *Seja Γ o lugar geométrico, no plano (K_I, K_p) , onde A tem dois valores próprios imaginários puros. Para $K_I \neq 0$ as auto-intersecções de Γ são os pontos onde a condição seguinte é satisfeita:*

$$\frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0, \quad K_p = \frac{\partial h_2}{\partial u_2} \quad e \quad K_I = \frac{\partial h_2}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial u_2}.$$

Nestes pontos $\text{Det}A = 0$.

Demonstração:

Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{11} \longrightarrow \mathbf{R}^2$ a aplicação definida da seguinte forma:

$$G(K_I, K_p, p_1) = \text{Tr}A \cdot mA - \text{Det}A,$$

$$\text{logo } \Gamma = \{(K_I, K_p, p_1) : G = 0 \quad e \quad mA > 0\}.$$

Para provar esta proposição é necessário demonstrar que as equações $G = \frac{\partial G}{\partial K_I} = \frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$ têm solução simultânea.

Substituindo (68), (69) e (70) em $G(K_I, K_p, p_1)$, obtem-se:

$$G(K_I, K_p, p_1) = (\text{Tr}M - K_p) \left(\text{Det}M - K_p \frac{\partial h_1}{\partial u_1} + K_I \right) - K_I \frac{\partial h_1}{\partial u_1}. \quad (71)$$

Então,

$$\frac{\partial G}{\partial K_I} = \text{Tr}M - K_p - \frac{\partial h_1}{\partial u_1}, \quad (72)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial K_p} &= -\text{Det}M + K_p \frac{\partial h_1}{\partial u_1} - K_I - \frac{\partial h_1}{\partial u_1} (\text{Tr}M - K_p) \\ &= -mA - \frac{\partial h_1}{\partial u_1} (\text{Tr}M - K_p). \end{aligned} \quad (73)$$

Substituindo a expressão de TrM , (66), em $\frac{\partial G}{\partial K_I} = 0$, (72), resulta:

$$K_p = \frac{\partial h_2}{\partial u_2}. \quad (74)$$

Resolvendo a equação $\frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$, (73), obtem-se:

$$K_I = -DetM + (2K_p - TrM) \frac{\partial h_1}{\partial u_1}. \quad (75)$$

Substituindo as expressões de TrM , (66) e de K_p , (74) em $G = 0$, (71), e tendo em atenção (70), obtem-se a igualdade:

$$\frac{\partial h_1}{\partial u_1} (mA - K_I) = 0. \quad (76)$$

Logo, se $G = \frac{\partial G}{\partial K_I} = \frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$ então, usando (76), ou $\frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0$ ou $K_I = mA$.

1. $\frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0$.

Substituindo as expressões de $DetM$, (65), de TrM , (66), de K_p , (74) na expressão que define K_I , (75), e tendo em atenção que, por hipótese, $\frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0$ obtem-se:

$$K_I = \frac{\partial h_2}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial h_1}{\partial u_2}.$$

Tendo em atenção (74), deduz-se que K_p não depende de $\frac{\partial h_1}{\partial u_1}$ e é definido por:

$$K_p = \frac{\partial h_2}{\partial u_2}.$$

Usando $\frac{\partial h_1}{\partial u_1} = 0$, segue-se da expressão (69) que $DetA = 0$.

2. $K_I = mA$.

Da equação $\frac{\partial G}{\partial K_I} = 0$, (72), resulta que $K_p = \frac{\partial h_2}{\partial u_2}$.

Substituindo a expressão de mA , (70), e de K_p , (74), em $mA = K_I$, obtem-se:

$$DetM = \frac{\partial h_1}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial u_2}. \quad (77)$$

Substituindo as expressões de $DetM$, (77), de TrM , (66), e de K_p , (74), na expressão que define K_I , (75), tem-se:

$$K_I = - \left(\frac{\partial h_1}{\partial u_1} \right)^2.$$

Por definição $K_I \geq 0$, logo a condição $K_I = mA$ nunca é satisfeita.

□

4.2 Resultados associados ao sistema dinâmico com controlador PI descrito na secção 1

Nesta secção aplica-se os resultados gerais da secção 4.1 ao sistema reactivo descrito na secção 1. Este sistema reactivo é um exemplo de um modelo tridimensional para o CSTR controlado por um PI e é diferente do exemplo proposto por Serra e Tablino-Possio[5]. Agora estuda-se as soluções de $\frac{du}{dt} = F(u, p)$, onde a aplicação $F = (F_1, F_2, F_3)$ é definida na secção 1.

A linearização de F em torno de $(u, p) = (u, p_1, K_I, K_p)$ é:

$$Lu = \frac{du}{dt} - Au$$

onde A é a matriz Jacobiana de F calculada no ponto (u, p) e, tal como foi definido na secção 1, $u = (u_1, u_2, u_3)$ é o vector u no ponto de equilíbrio.

Para escrever a matriz Jacobiana da aplicação F , no ponto de equilíbrio, é necessário calcular as primeiras derivadas parciais das funções coordenadas F_1 , F_2 e F_3 nesse ponto. As expressões que definem essas derivadas parciais com valor diferente de zero são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} &= -1 - \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]; \\ \frac{\partial F_1}{\partial u_2} &= \frac{\alpha_2 \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_3 \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{u_2^2 \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}}; \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} &= -\alpha_7 [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 \alpha_6 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial u_2} = -1 - K_p - \alpha_1 + \frac{\alpha_2 \alpha_7 [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_3 \alpha_4 \alpha_6 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{u_2^2 \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}},$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial u_3} = -1;$$

$$\frac{\partial F_3}{\partial u_2} = \alpha_{10} K_I.$$

A matriz Jacobiana de F é:

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} & 0 \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} & -1 \\ 0 & \alpha_{10} K_I & 0 \end{bmatrix}.$$

Com o objectivo de simplificar as expressões dos coeficientes do polinómio característico da matriz toma-se R igual a:

$$\frac{\alpha_2 \alpha_7^2 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_3 \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})] [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 \alpha_6 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{u_2^2 \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}}, \quad (78)$$

e faz-se

$$S = 1 + K_p + \alpha_1 - \frac{\alpha_2 \alpha_7 [\alpha_5 f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_3 \alpha_4 \alpha_6 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]}{u_2^2 \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}}. \quad (79)$$

Logo, os coeficientes do polinómio característico são:

$$TrA = -\{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})] + S\}, \quad (80)$$

$$DetA = -\alpha_{10} K_I \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}, \quad (81)$$

$$mA = S \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\} + R + \alpha_{10} K_I. \quad (82)$$

Os resultados para o sistema reactivo descrito na secção 1 são enunciados nas duas proposições que se seguem.

Proposição 4.5 *Se $K_I > 0$ e α_4, α_7 e $\alpha_{10} > 0$ então a linearização, A , de (9) em torno de um ponto de equilíbrio satisfaz $DetA < 0$. A matriz A tem sempre um valor próprio real e negativo e o produto dos três valores próprios é sempre negativo. Assim, as únicas bifurcações locais, com $K_I > 0$, são bifurcações de Hopf generalizadas. Os pontos de equilíbrio hiperbólicos são sempre ou selas com variedade estável de dimensão um ou atratores.*

Demonstração:

Por hipótese $\alpha_4, \alpha_7, \alpha_{10}$ e $K_I > 0$. Como por definição $f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11})$ e $f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11}) > 0$ resulta que

$$\begin{aligned} DetA &= -\alpha_{10}K_I \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2\alpha_3, \alpha_{11})]\} \\ &< -\alpha_{10}K_I < 0. \end{aligned}$$

Sejam r_1, r_2 e r_3 os valores próprios da matriz A .

Assim, como $DetA = r_1r_2r_3$, conclui-se que:

1. nenhum dos valores próprios é nulo;
2. se os valores próprios de A forem todos reais, então há duas possibilidades:
 - (a) são todos negativos e o ponto de equilíbrio é *atractor*
 - (b) Apenas um é negativo e o ponto de equilíbrio é um *ponto de sela*;
3. Se r_1 for real e $r_2 = -\bar{r}_3$ for complexo, então $DetA = r_1\|r_2\|^2$. Logo $DetA < 0$ se e só se $r_1 < 0$ e $r_2 \neq 0$.

Portanto, facilmente se deduz que, quando $K_I > 0$ existem bifurcações de Hopf generalizadas. \square

Proposição 4.6 *Seja Γ o lugar geométrico, no plano (K_I, K_P) , onde A tem dois valores próprios imaginários puros. Para $K_I > 0$ e para todos os valores $p = (p_1, K_I, K_P)$ dos parâmetros do sistema, a curva Γ não tem auto-intersecções.*

Demonstração:

Seja $G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{11} \longrightarrow \mathbf{R}^2$ a aplicação definida da seguinte forma:

$$G(K_I, K_p, p_1) = TrA \cdot mA - DetA,$$

logo $\Gamma = \{(K_I, K_p, p_1) : G = 0 \quad \text{e} \quad mA > 0\}$.

Para provar esta proposição é necessário demonstrar que as equações $G = \frac{\partial G}{\partial K_I} = \frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$ não têm solução simultânea.

Substituindo (80), (81) e (82) em $G(K_I, K_p, p_1)$, obtem-se:

$$\begin{aligned} G(K_I, K_p, p_1) = & -S \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}^2 - \\ & (S^2 + R) \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\} - \\ & S \cdot R - \alpha_{10} K_I S. \end{aligned} \quad (83)$$

Das expressões que definem R , (78), e S , (79), deduz-se que R não depende nem de K_p nem de K_I e S só depende de K_p . Então,

$$\frac{\partial G}{\partial K_I} = -\alpha_{10} S, \quad (84)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial K_p} = & -\{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}^2 - R - \alpha_{10} K_I - \\ & 2S \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}. \end{aligned} \quad (85)$$

Uma vez que por definição $\alpha_{10} > 0$, então, tendo em conta (84), segue que $\frac{\partial G}{\partial K_I} = 0$ se e só se $S = 0$.

Resolvendo a equação $\frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$, (85), em ordem a $\alpha_{10} K_I$, resulta a expressão:

$$\begin{aligned} \alpha_{10} K_I = & -\{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}^2 - R - \\ & 2S \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\}. \end{aligned} \quad (86)$$

Substituindo (86) em $G = 0$, (83), e fazendo $S = 0$, resulta a igualdade:

$$-R \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\} = 0.$$

Uma vez que por definição $\alpha_2, \dots, \alpha_7 > 0$ e $f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}), f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11}) > 0$, deduz-se de (78) que $R > 0 \forall (u, p_1, K_I, \log \sigma$

$$-R \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\} < 0 \quad \forall (u, p_1, K_I, K_p) \in \Omega_1.$$

Consequentemente, a condição

$$-R \{1 + \alpha_7 [f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11}) + \alpha_4 f(u_2, \alpha_2 \alpha_3, \alpha_{11})]\} = 0$$

nunca é satisfeita. Portanto, conclui-se que as equações $G = \frac{\partial G}{\partial K_I} = \frac{\partial G}{\partial K_p} = 0$ não têm solução simultânea. Isto é, Γ não tem auto-inteseccões.

Bibliografia

- [1] Balakotaiah, V. e Luss, D., *multiplicity features of reacting systems - dependence of the steady states of a CSTR on the residence time*, Chem. Eng. Science, Vol. 38, No 10, pág. 1709-1721 (1983).
- [2] Fogler, H.S., *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Science, 3ª Edição, New Jersey (1999).
- [3] Golubitsky, M. e Schaeffer, D. G., *Singularities and Groups in Bifurcation theory*, Vol. I, Springer-Verlag, New York (1984).
- [4] Coughanowr, R., *Process Systems Analysis and Control*, McGraw-Hill Chemical Engineering Series, 2ª Edição, Singapore (1991).
- [5] Serra, S. e Tablino-Possio, C., *Analytical analysis of the Gravitov-Guckenheimer bifurcation unfolding in the case of a proportional-integral controlled CSTR*, SIAM J. Appl. Math., Vol. 59, No 5, pág. 1716-1744 (1999).
- [6] Yu, P. e Huseyin, K., *Bifurcation associated with a three-fold zero eigenvalue*, Quart. Appl. Math., Vol. 46, pág. 196-206 (1988)

Errata

Pág.	Linha / Local	Onde está	Deve estar
11	eq.(10)	$f(u_2, \alpha_2 \alpha_{11})$	$f(u_2, \alpha_2, \alpha_{11})$
13	8 b	α_9	α_{10}
14	7	α_9	α_{10}
14	Eq. (14)	$\alpha_4 \alpha_7 f(\dots$	$\alpha_4 \alpha_6 f(\dots$
19	Eq. (35)	L^5	L^4
26	10	[desdobra]mento para...	[desdobra]mento suficientes para ...
27	2, 6	$G(x, \alpha) = \dots$	$G(x, \lambda, \alpha) = \dots$
27	15	quer do ...	quer no ...
28	31	os quais ...	as quais ...
29	18	[dinâ]mico tridimensional ...	[dinâ]mico bidimensional ...
40	1 b		(falta sinal de fim de demonstração)
41	ref[4]	Coughanour, R.	Coughanour, D.R.