

ALGUNOS RESULTADOS SOBRE LA SOLUCION DE UN MODELO MATEMATICO GENERALIZADO PARA LA CINETICA DE DISOLUCION DE SOLIDOS POLIDISPERSOS

Luis T. VILLA⁽¹⁾ y Pedro NIEVA⁽²⁾

RESUMEN: En el presente artículo, se aborda el análisis sobre el comportamiento de la solución del siguiente modelo matemático consistente en un problema de valor inicial (PVI) para una función $y = y(t)$ conexas a la conversión global $x = x(t)$ de un proceso de disolución de un sólido polidisperso en ausencia de reacción química, emergente de un modelo cinético formulado por Quiroga *et al.* (1992) para describir el citado fenómeno;

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -1 - p[ay^3(t) + by^2(t) + cy(t)] & t > 0 \\ y(0) = y_0, & -1 < y_0 \leq 0 \end{cases}$$

se consideran restricciones generales de raíz experimental y particulares deducidas matemáticamente (con significancia física) para los parámetros a, b, c, p .

Se obtiene información sobre el comportamiento de la solución del precitado (PVI), y consecuentemente sobre la conversión global $x = x(t)$ en particular sobre el comportamiento asintótico.

ABSTRACT: In this paper, an analysis regarding the behavior of the solution of the following initial value problem (IVP) for the function $y = y(t)$

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -1 - p[ay^3(t) + by^2(t) + cy(t)] & t > 0 \\ y(0) = y_0, & -1 < y_0 \leq 0 \end{cases}$$

is presented.

Such function $y = y(t)$ is related to the global conversion function $x = x(t)$ in a kinetic model formulated by Quiroga *et al.* (1992), in order to describe the dissolution rate of polydisperse solids without chemical reaction.

Regarding the parameters a, b, c, p general restrictions of experimental nature and some additional of mathematical type are considered.

Information on the behavior of the function $y = y(t)$ and consequently on the global conversion $x = x(t)$ is obtained (in particular on the asymptotic behavior).

Palabras claves: Disolución, sólido polidisperso, modelo cinético, comportamiento dinámico

Key words: Dissolution, polydisperse solid, kinetic model, dynamic behavior.

(1) CIUNSa. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Salta. Instituto de Investigaciones para la Industria Química (INIQUI-CONICET). Buenos Aires 177 (4400) Salta, Argentina.

(2) CIUNSa. Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Salta. Buenos Aires 177 (4400) Salta, Argentina.

INTRODUCCIÓN

El propósito del presente trabajo es presentar un análisis y sus correspondientes resultados con vista a complementar y en algún sentido generalizar lo hecho en un artículo de Villa *et al.* (1997) referente al comportamiento de la solución de un problema de valor inicial (PVI) descriptivo de la cinética de disolución de un sistema sólido polidisperso.

En efecto, en el precitado artículo, tomando como base un trabajo de Quiroga *et al.* (1992), se vió que el antes mencionado (PVI) descriptivo del fenómeno bajo análisis viene constituido por la siguiente ecuación diferencial de primer orden no lineal y su respectivo valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -1 - p[ay^3 + by^2 + cy], t > 0 \\ y(0) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

con los parámetros a, b, c, p satisfaciendo las restricciones

$$a > 0, b > 0, c > 0 \quad (2)$$

$$0 < p < 1 \quad (3)$$

y la función incógnita $y = y(t)$ de la variable independiente tiempo t relacionada con la conversión global $x = x(t)$ del proceso mediante la expresión:

$$x(t) = -[ay^3(t) + by^2(t) + cy(t)] \quad (4)$$

quedando a priori establecido el siguiente

$$-1 \leq y(t) \leq 0, \quad \forall t > 0 \quad (5)$$

como rango de variación para $y = y(t)$.

En Villa *et al.* (1997), teniendo presente la restricción general dada por (2) para los parámetros a, b, c y la dada por (3) para el parámetro p , se obtuvieron resultados sobre comportamiento asintótico y de dependencia paramétrica para la solución del modelo expresado por (1). Como puede verse en tal artículo, los resultados se obtuvieron esencialmente en base al uso de ciertas propiedades derivadas para la función $F = F(y)$ definida como:

$$F(y) = -1 - p(ay^3 + by^2 + cy) \quad (6)$$

destacándose de que tal función es la del segundo miembro de la ecuación diferencial del modelo (1).

Las propiedades para la citada función se establecen en correspondencia con un conjunto oportuno de restricciones adicionales a (2) y (3), establecidas para los parámetros a, b, c, p .

Tales restricciones, precisamente proveían condiciones suficientes a fin de que la función F definida por (6) posea uno de sus tres ceros comprendido en el intervalo $(-1, 0)$.

En el presente trabajo se aborda el análisis del comportamiento de la solución del siguiente modelo como generalización simple de (1) respecto del dato inicial y el rango previsto para el parámetro p :

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -1 - p[ay^3 + by^2 + cy], t > 0 \\ y(0) = y_0, \quad -1 < y_0 \leq 0 \end{cases} \quad (7)$$

asumiendo a priori para los parámetros a, b, c la restricción de carácter general dada por (2), en tanto que para p ahora se consigna

$$p > 0 \quad (8)$$

interesando como solución de (7) una función $y = y(t)$ continuamente diferenciable con rango establecido por (5).

Comportamiento de $F = F(y)$

Ordenamos el análisis según las variantes que se ilustran a continuación:

(a) Si los parámetros a, b, c, p verifican las siguientes restricciones adicionales

$$\begin{aligned} p(a + c - b) &< 1 & (9) \\ b^2 - ac &\leq 0 & (10) \end{aligned}$$

entonces resulta que F no posee ningún cero en el intervalo $[-1, 0)$.

En efecto, de (6) se infiere que

$$F(0) = -1, \quad F(-1) = -1 + p(a + c - b) \quad (11)$$

por otra parte, siendo

$$\frac{dF}{dy} = -p \left[2ay^2 + a \left(y + \frac{b}{a} \right)^2 - \frac{b^2 - ac}{a} \right] \quad (12)$$

se sigue que

$$\frac{dF(0)}{dy} = -pc < 0 \quad (13)$$

y de que la restricción

$$b^2 - ac \leq 0 \quad (14)$$

proporciona una condición suficiente a fin de que

$$\frac{dF}{dy} \leq 0, \quad \forall y \in (-1, 0) \quad (15)$$

Luego, es claro que si se impone la restricción

$$F(-1) < 0 \quad (16)$$

esto es precisamente decir [ver (11)]

$$p(a + c - b) < 1 \quad (17)$$

en virtud de (11) y (13) se concluye el comportamiento anunciado para la función F .

Observación 1

Nótese de que la siguiente desigualdad

$$-1 < F(-1) \quad (18)$$

emerge como una consecuencia de lo explicitado precedentemente.

Efectivamente, si se diera lo contrario a (18), esto es

$$F(-1) < -1 \quad (19)$$

en virtud de (11) y (13) debe existir al menos un valor $\bar{y} (-1 < \bar{y} < 0)$ tal que

$$F(\bar{y}) = -1 \quad (20)$$

y en consecuencia, por (6) se tiene

$$a\bar{y}^2 + b\bar{y} + c = 0 \quad (21)$$

es decir

$$a\left(\bar{y} + \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{4ac - b^2}{4a} = 0 \quad (22)$$

de donde se infiere que debe cumplirse la siguiente desigualdad

$$b^2 - ac > 0 \quad (23)$$

notándose que (23) es contradictoria con (10).

El siguiente es un ejemplo de conjunto de valores para los parámetros que verifica las restricciones (9) y (10):

$$a = 1, b = 1, c = 1, p = 0.5 \quad (24)$$

En la Fig. 1 se ilustra una representación gráfica de la función F , obtenida para los valores paramétricos consignados por (24).

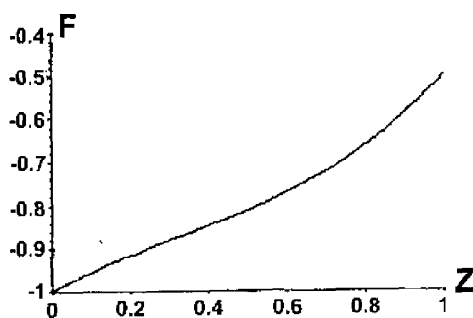


Fig. 1: $a = 1, b = 1, c = 1, p = 0.5$

Como puede apreciarse, se ratifica lo previsto en la presente variante (a) sobre la ubicación de los ceros de F .

En vista a lograr sistematización y practicidad de procedimiento en el tratamiento del problema bajo análisis, se destaca que la precedente gráfica, fue obtenida procesando el siguiente (PVI) generado a partir de (6) para la función F .

$$\begin{cases} \frac{dF}{dz} = 3paz^2 - 2pbz + pc, & 0 \leq z \leq 1 \\ F(0) = -1 \end{cases} \quad (25)$$

donde se debe tener presente que la variable auxiliar z se vincula con y mediante la transformación

$$y = -z \quad (26)$$

b) En primer lugar es oportuno definir los parámetros auxiliares Δ_0 y Δ_1 como sigue:

$$\Delta_0 = 4ac - b^2, \quad \Delta_1 = \sqrt{b^2 - 3ac} \quad (27)$$

Entonces, si los parámetros a, b, c, p en el modelo (7) verifican las siguientes restricciones adicionales a (2) y (8):

$$a - b + c > 0 \quad (28)$$

$$p > \frac{1}{a - b + c} \quad (29)$$

$$p \neq \frac{8a}{b^2} \quad (30)$$

$$b^2 > 3ac \quad (31)$$

$$b < 3a \quad (32)$$

$$c + 3a > 2b \quad (33)$$

$$\Delta_0 \rightarrow 0^+ \quad (34)$$

$$\frac{(b + 2\Delta_1)^2}{9} + \Delta_0 > \frac{12a^2}{p(b - \Delta_1)} \quad (35)$$

resulta que la función F posee sus tres ceros en el intervalo $(-1, 0)$ y ellos son distintos.

En efecto, en virtud de (8), (11) y de la continuidad de F se sigue que (28) y (29) proveen una condición suficiente para que tal función posea al menos un cero en el intervalo $(-1, 0)$. A su vez, del carácter polinomial de F se infiere rápidamente de que (30) y (32) aseguran de que de haber ceros en el intervalo $(-1, 0)$, estos serán distintos.

Finalmente, la existencia de tres ceros para F en el intervalo $(-1, 0)$, se asegura requiriendo que dicha función posea un máximo positivo y un mínimo negativo cuando

y varía entre -1 y 0 . Precisamente, tal comportamiento se logra imponiendo las restricciones (31), (33), (34) y (35).

En la Fig. 2 se ilustra una gráfica de F obtenida procesando el (PVI) explicitado por (25) usando los siguientes valores para los parámetros:

$$a = 0.87, \quad b = 1.15 \quad c = 0.4 \quad p = 30 \quad (36)$$

verificándose naturalmente las restricciones (2), (8) y (28) a (35).

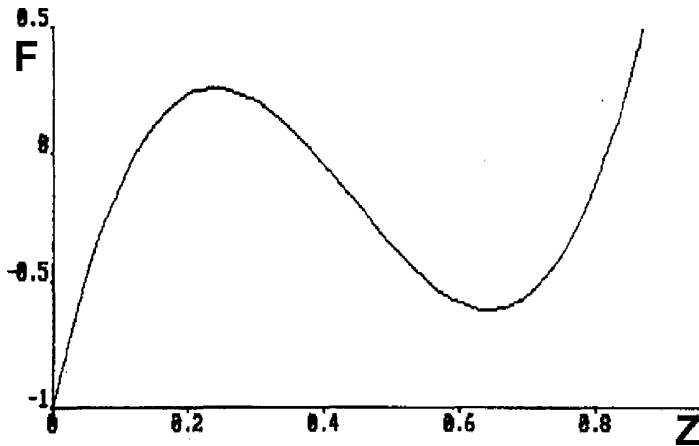


Fig. 2: $a = 0.87, \quad b = 1.15, \quad c = 0.4, \quad p = 30$

Como puede observarse, se ratifica lo previsto por la presente variante respecto del comportamiento de la función F .

Denotando con y^1, y^2 e y^3 a los referidos 3 ceros de F , de (26) y la Fig. 2 se tiene:

$$y^1 = -z_1, \quad y^2 = -z_2, \quad y^3 = -z_3 \quad (37)$$

Comportamiento de la solución del modelo (7)

En esta sección obtendremos resultados sobre el comportamiento dinámico de la solución del (PVI) (7) en correspondencia con las variantes (a) y (b) presentadas y analizadas en la sección previa respecto de propiedades para la función F definida por (6), en términos de restricciones derivadas para los parámetros a, b, c, p del modelo.

Variante (a)

En tal caso, recordamos que para los parámetros se imponen, además de las consignadas por (2) y (3) de carácter general, las establecidas por (9) y (10).

Entonces, al inferirse a partir de (9), (10) y (11) la estricta negatividad de $F = F(y)$ para todo y del intervalo $[-1, 0]$, de (7) se concluye que la solución $y = y(t)$ de tal (PVI) será una función estrictamente decreciente a partir de su valor inicial $y_0 \leq 0$ al transcurrir la variable independiente tiempo t . Esto es

$$\frac{dy}{dt} < 0, \quad \forall t > 0 \quad (38)$$

Consecuentemente, se tiene que en esta variante el proceso de disolución evoluciona en forma monótona hacia el valor extremo de la conversión global $x = x(t)$ al que llega con velocidad positiva en correspondencia con el valor mínimo $y(t) = -1$, no arribándose por lo tanto a un estado estacionario para el fenómeno.

En efecto, de (4) se sigue

$$\frac{dx}{dt} = -(3ay^2(t) + 2by(t) + c) \frac{dy}{dt} = - \left[2ay^2(t) + \left(y(t) + \frac{b}{a} \right)^2 - \frac{(b^2 - ac)}{a} \right] \frac{dy}{dt} \quad (39)$$

por lo que en virtud de (2), (10) y (38), de (39) resulta

$$\frac{dx}{dt} > 0, \quad \forall t > 0 \quad (40)$$

En la Fig. 3 siguiente se ilustran curvas gráficas de la solución $y = y(t)$ de (7), obtenida computacionalmente usando un conjunto de valores para los parámetros, de modo de verificar las restricciones (9) y (10). Se exhiben 2 curvas correspondientes a 2 valores iniciales para y .

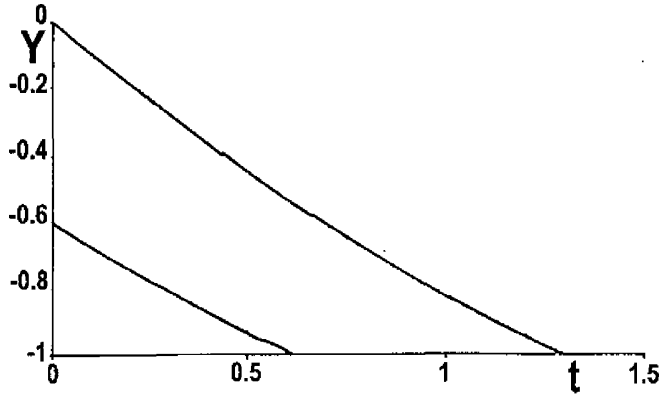


Fig. 3: $a=1$, $b=1$, $c=1$, $p=0.5$
 (1) : $y_0 = 0$, (2) : $y_0 = -0.2$

Las funciones conversión global $x = x(t)$ en correspondencia con las funciones $y = y(t)$ exhibidas en la Fig. 3 precedente, se ilustran en la Fig. 4. Tal figura se obtiene procesando el siguiente PVI para un sistema acoplado de 2 ecuaciones diferenciales de primer orden que surge de (4) y (7), esto es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dy}{dt} = -1 - p \left[a \left(\frac{dy}{dt} \right)^3 + b \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 + cy(t) \right] \\ \frac{dx}{dt} = (3ay^2(t) + 2by(t) + c) [1 + p(ay^3(t) + by^2(t) + cy(t))] \\ y(0) = y_0, \quad x(0) = x_0 = -(ay_0^3 + by_0^2 + cy_0) \end{array} \right. \quad (41)$$

Como puede apreciarse, se ratifica lo previsto por el resultado anunciado previamente.

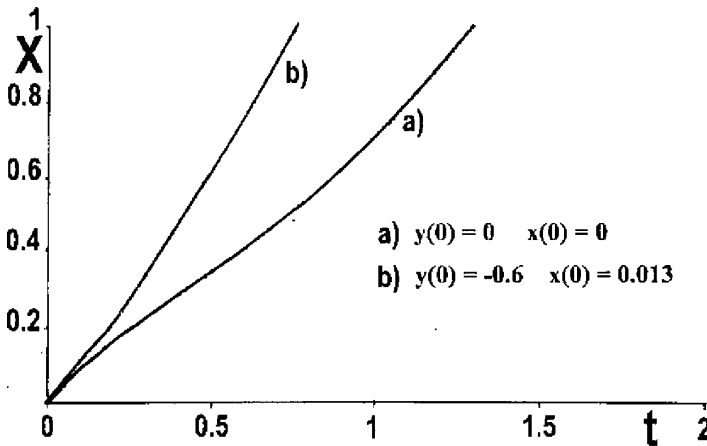


Fig. 4: $a = 1, b = 1, c = 1, p = 0.5$

Variante (b)

En esta situación, los parámetros deben verificar las restricciones de tipo general consignadas por (2) y (8) y las adicionales establecidas por (28) a (35).

Según hemos establecido, en este caso se tienen 3 ceros reales y distintos y^1, y^2 e y^3 en el intervalo $(-1, 0)$ para la función $F = F(y)$ definida por (6). De (37) se desprende que tales ceros guardan la siguiente relación de orden

$$-1 < y^3 < y^2 < y^1 < 0 \quad (42)$$

Entonces, estamos en condiciones de establecer el siguiente resultado sobre el comportamiento asintótico en el tiempo para la solución $y = y(t)$ del modelo (7):

$$\text{Si } y^1 \leq y_0 \leq 0, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = y^1 \quad (43)$$

en forma monótona estrictamente decreciente

$$\text{Si } y^2 \leq y_0 \leq y^1, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = y^1 \quad (44)$$

en forma monótona estrictamente creciente

$$\text{Si } y^3 \leq y_0 \leq y^2, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = y^3 \quad (45)$$

en forma monótona estrictamente decreciente

$$\text{Si } y_0 < y^3, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} y(t) = y^1 \quad (46)$$

en forma monótona estrictamente creciente

En efecto, visto el resultado establecido para los ceros de F , consignado por (41), resulta que es procedente aplicar una propiedad demostrada por Avila Blas (1993) con el fin de obtener el comportamiento asintótico de la solución de (7), arribándose a las anteriores conclusiones expresadas por (43) a (46).

A modo de un ejemplo test, se procesó el modelo (7) tomando los mismos valores paramétricos que los usados en la Fig. 2 y datos iniciales y_0 según lo consignado por (43) a (46). Las correspondientes curvas solución se exhiben en la Fig. 5 siguiente

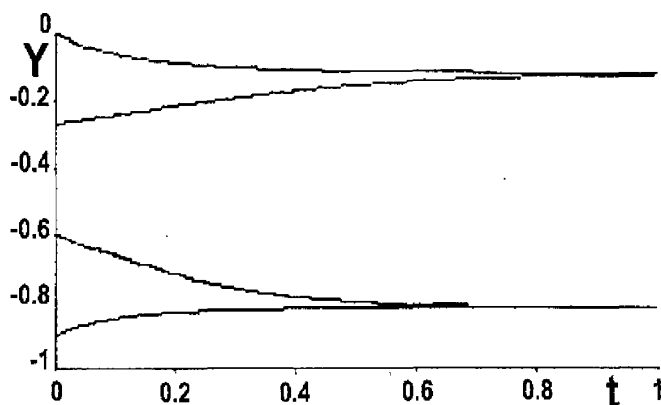


Fig. 5: $a = 0.87$, $b = 1.15$, $c = 0.4$, $p = 30$

como puede notarse todo está de acuerdo a lo previsto teóricamente.

Observación 2

Siendo los ceros y^1, y^2, y^3 de F , soluciones estacionarias de la ecuación diferencial del modelo bajo análisis, de las conclusiones explicitadas por (43) a (46) teniendo siempre presente como resultado base al de Avila Blas (1993), surge que y^1 e

y^3 son soluciones estacionarias estables, en tanto que y^2 es inestable. Tal comportamiento se aprecia claramente en la precitada Fig. 5.

Observación 3

Teniendo presente la relación de vínculo dada por (39) entre $\frac{dy}{dt}$ y $\frac{dx}{dt}$ derivadas para la solución de (7) y la conversión global del proceso respectivamente, se sigue que las soluciones estacionarias del modelo (7) implican también valores límites asintóticos para $x = x(t)$ alcanzados con derivada $\frac{dx}{dt}$ nula.

Consecuentemente, denotando con x^1, x^2, x^3 a tales conversiones límites en correspondencia con los ceros y^1, y^2, y^3 respectivamente, esto es

$$x^{(i)} = -\left[a(y^i)^3 + b(y^i)^2 + cy^i \right], \quad i=1,2,3 \quad (47)$$

se tiene que x^1 y x^3 vienen a representar conversiones extremas (límites asintóticos en el tiempo). En tanto que, x^2 no es alcanzable nunca si el proceso evoluciona bajo las restricciones paramétricas correspondientes a la variante (b) que nos ocupa. Tal situación se ilustra gráficamente en la Fig. 6 siguiente, obtenida de procesar computacionalmente el modelo expresado por (41), usando naturalmente los mismos valores paramétricos que en la Fig. 5 y valores iniciales $x(0) = x_0$ obtenidas de (4) con valores y_0 según lo consignado por (43) a (46).

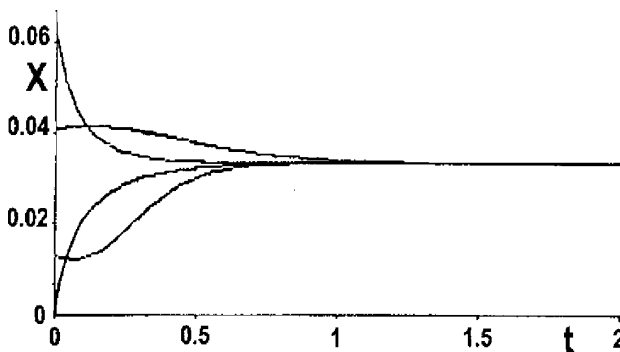


Fig. 6: $a = 0.87$, $b = 1.15$, $c = 0.4$, $p = 30$

Observación final

Lo antes establecido da pie para formular la siguiente reflexión, con la esperanza de que sea de interés a investigadores en el campo del fenómeno tratado: valores iniciales y_0 en (7) pertenecientes a los intervalos

$$y^1 < y_0 \leq 0, \quad y^3 < y_0 < y^2 \quad (48)$$

dan lugar a la disolución del sólido.

En tanto que, si

$$y^2 < y_0 \leq y^1, \quad -1 < y_0 < y^3 \quad (49)$$

evolucionaría un fenómeno de aglomeración de partículas del sólido disuelto.

CONCLUSIONES

A través de un procedimiento analítico-computacional, conceptual y operativamente simple, apelando al uso combinado de resultados básicos sobre el comportamiento de funciones de una variable (en particular polinomios) con resultados teóricos relativos al comportamiento asintótico de la solución de problemas de valor inicial para ecuaciones diferenciales autónomas no lineales de primer orden, se obtuvo información sobre la solución de un modelo descriptivo de un fenómeno interesante, cual es el referente a la disolución de sólidos polidispersos en ausencia de reacción química. Tal información se entiende, viene a proveer resultados que pueden considerarse complementarios, en el sentido de que atacan aspectos no contemplados en un artículo previo sobre el particular de Villa *et al.* (1997).

RECONOCIMIENTOS

Los autores expresan su agradecimiento al CIUNSa (Consejo de Investigación de la Universidad Nacional de Salta), a la Facultad de Ingeniería de la citada Universidad y al CONICET (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas) por asistencia recibida.

Al Prof. Nelson Acosta por su valioso comentario sobre un detalle matemático en un ítem del presente.

Nomenclatura

- a, b, c : coeficientes que contienen magnitudes referentes a la composición y tamaño de la muestra de sólido.
- F : Función auxiliar definida por (6).
- p : parámetro del modelo sometido a las restricciones dadas por (3) a (8).
- t : variable independiente tiempo en el modelo
- x : conversión global.
- y : función solución de los modelos (1) o (7).
- z : variable real definida por (26).
- y^i ($i = 1, 2, 3$) : ceros reales de la función F .

Caracteres griegos

- Δ_0, Δ_1 : parámetros auxiliares definidos por (27).

Subíndices

- 0 : relativo a estado o condición inicial

BIBLIOGRAFÍA

- AVILA BLAS, O.J., 1993. Tesis de Licenciatura en Matemática, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta.
- QUIROGA, O.D.; J.R. AVANZA y A.J.V. FUSCO, 1992. Introducción al modelado de las transformaciones fluido-sólido reactivo, Cap. 2. Ed. Eudene.
- VILLA, L.T. y O. AVILA BLAS, 1997. Sobre el comportamiento de la solución de un modelo matemático descriptivo de la cinética de disolución de sólidos polidispersos. *Facena*, 13.

Recibido/Received/: Jul-00
Aceptado/Accepted/: Dic-00