

3.Modelação Física

Objectivo: *Após completar este módulo, o aluno deverá ser capaz de escrever as equações que definem um modelo de um sistema com estado contínuo com base em princípios físicos e relações fundamentais.*

Bibliografia

Ljung e Glad, *caps. 5 e 6*

Complementar: Edgeland e Gravdahl (2002). *Modeling and Simulation for Automatic Control*. Maryne Cybernetics. Partes III e IV



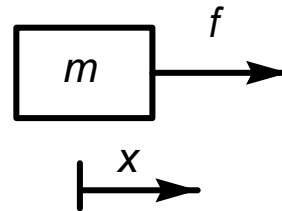
Sistemas mecânicos de translação

Exemplos:

- Motores lineares
- Movimento do papel em fotocopiadoras

Relacionam a posição $[m]$ com o tempo $[s]$ de corpos em movimento de translação.

Sistemas mecânicos de translação



Massa isolada (inércia):

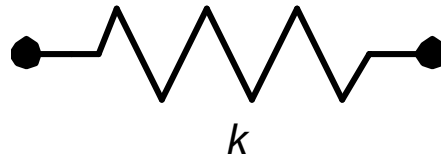
Quando uma massa m [kg] é actuada por uma força f [N] adquire uma aceleração $[m/s^2]$ no sentido da força que satisfaz (lei de Newton):

$$f = \frac{d}{dt} p(t) \quad \text{em que o momento } p(t) \text{ é } p(t) = m \frac{dx}{dt}$$

No caso da massa constante:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = f$$

Molas elásticas



Elementos que armazenam energia potencial.

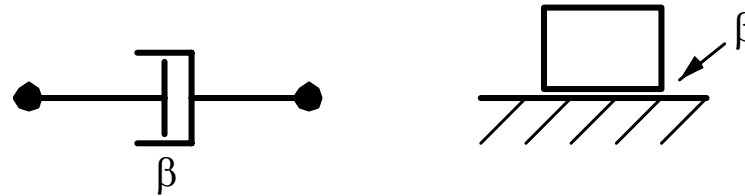
Quando a mola é comprimida (ou esticada) do comprimento x em relação à posição de repouso, reage com uma força que se opõe à compressão (ou à extensão), dada para molas lineares por

$$f = k x$$

k $[N/m]$ é chamada “constante da mola” ou constante de Hooke.

Em muitos casos a relação entre a força e a elongação é mais complicada.

Atrito viscoso



São os elementos que dissipam energia.

Quando existe uma diferença de velocidade entre os dois corpos o atrito corresponde com uma força que contraria o movimento e que depende da

velocidade relativa $\frac{dx}{dt}$. No caso linear a força é dada por:

$$f = \beta \frac{dx}{dt}$$

Atrito estático

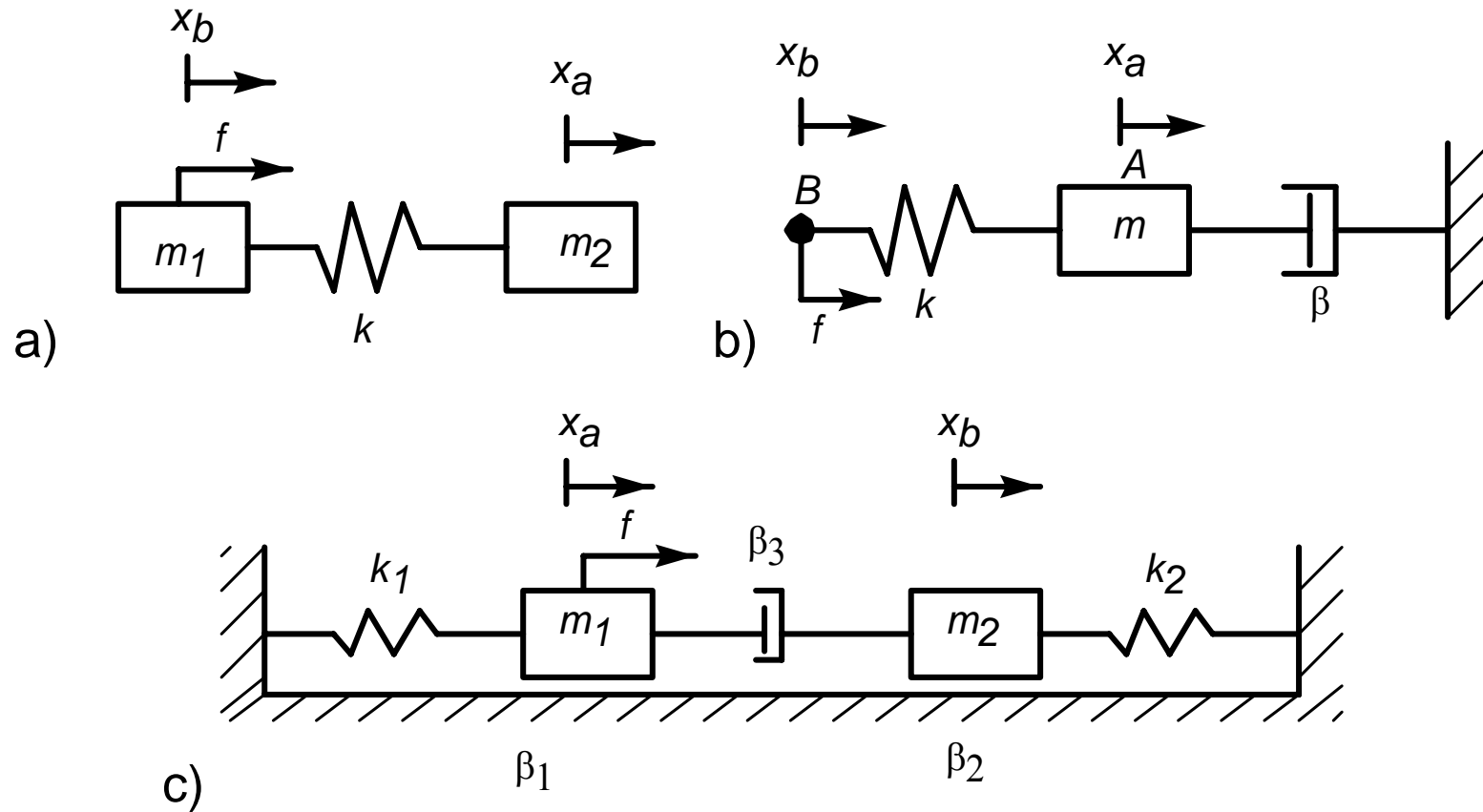
Assume que há uma força entre os corpos em contacto que desaparece ou se reduz quando eles entram em movimento.

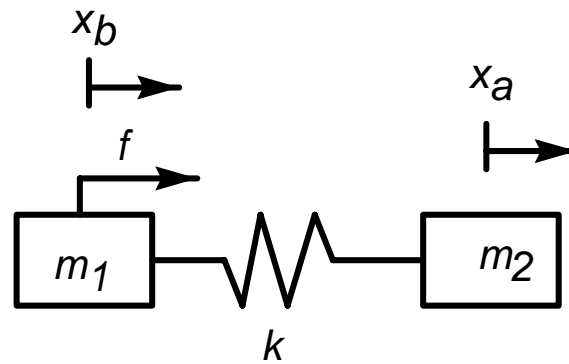
A seguir, a menos que referido explicitamente, supõe-se que não existe atrito estático nos exemplos considerados.

Escrita das equações de um sistema mecânico de translação

1. Associar a cada massa que se move independentemente um referencial “preso ao mundo exterior ao sistema”.
2. Para cada uma das massas que se movem independentemente escrever a lei de Newton, tomando como variável a sua posição no referencial que lhe está associado.

Exemplos





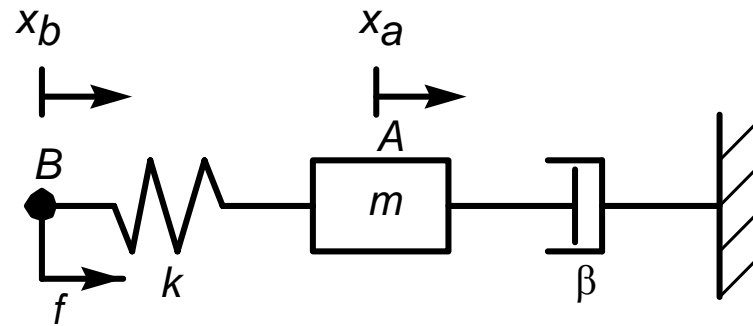
$$m_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} = -k(x_a - x_b)$$

$$m_1 \frac{d^2 x_b}{dt^2} = f - k(x_b - x_a)$$

Modelo de estado tomando a força como entrada e x_a como saída:

$$\begin{aligned}
 m_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} &= -k(x_a - x_b) \\
 m_1 \frac{d^2 x_b}{dt^2} &= f - k(x_b - x_a)
 \end{aligned}
 \quad
 x := \begin{bmatrix} x_a \\ \dot{x}_a \\ x_b \\ \dot{x}_b \end{bmatrix}
 \quad
 u := f$$

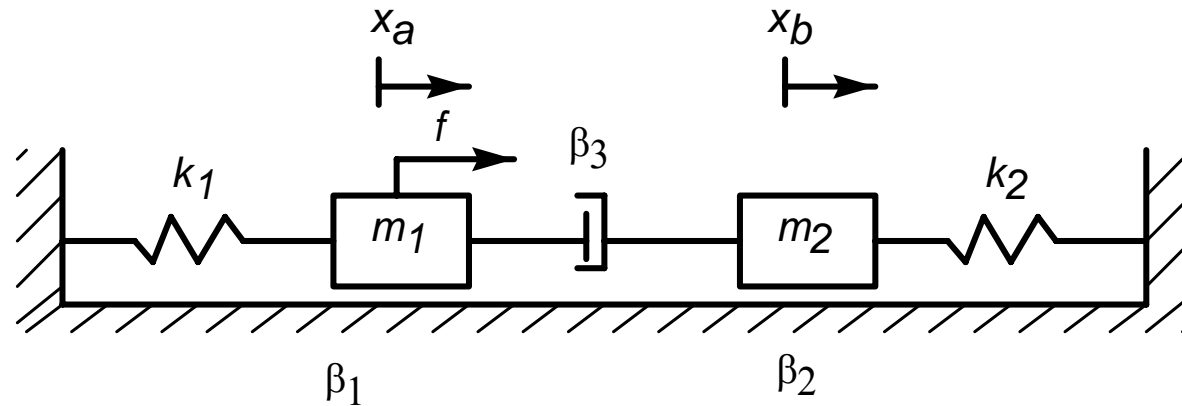
$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \dot{x}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{k}{m_2} & 0 & \frac{k}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{k}{m_1} & 0 & -\frac{k}{m_1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{m_1} \end{bmatrix} u
 \quad
 y = [1 \quad 0 \quad 0 \quad 0] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$



$$m \frac{d^2 x_a}{dt^2} = -k(x_a - x_b) - \beta \frac{dx_a}{dt}$$

$$0 \frac{d^2 x_b}{dt^2} = f - k(x_b - x_a) \rightarrow f = k(x_b - x_a) \rightarrow x_b = x_a + \frac{1}{k} f$$

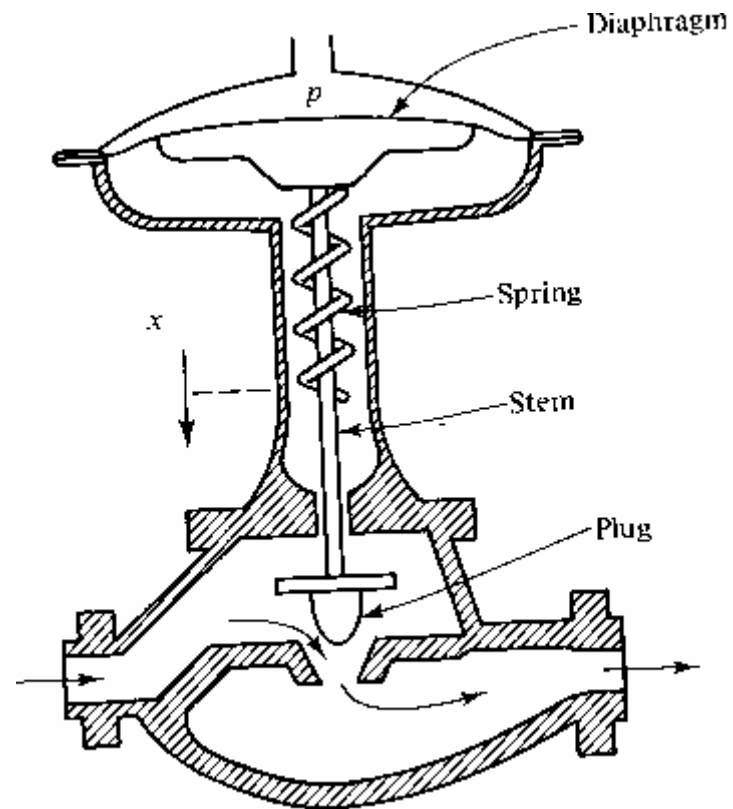
$$m \frac{d^2 x_a}{dt^2} = f - \beta \frac{dx_a}{dt}$$



$$m_1 \frac{d^2 x_a}{dt^2} = f - k_1 x_a - \beta_1 \frac{dx_a}{dt} - \beta_3 \left(\frac{dx_a}{dt} - \frac{dx_b}{dt} \right)$$

$$m_2 \frac{d^2 x_b}{dt^2} = -k_2 x_b - \beta_2 \frac{dx_b}{dt} - \beta_3 \left(\frac{dx_b}{dt} - \frac{dx_a}{dt} \right)$$

Exemplo: Dinâmica de uma válvula pneumática de regulação



Modelo do movimento do corpo da válvula

O ar na câmara da válvula exerce uma força dada pelo produto da área A do diafragma pela pressão do ar p .

m : massa do corpo da válvula (haste e obturador)

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = pA - Kx - \beta \frac{dx}{dt}$$

Normalmente a massa m é desprezável face às outras grandezas e o movimento pode aproximar-se pelo modelo de 1ª ordem:

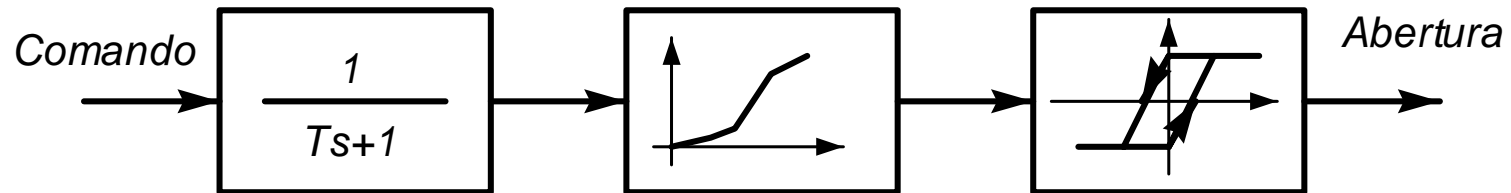
$$\frac{dx}{dt} = -\frac{K}{\beta} x + \frac{A}{\beta} p$$

As válvulas estão providas de um posicionador electromecânico que usa um sinal eléctrico para gerar a pressão de ar que garante a posição desejada para o obturador da válvula. O conjunto conversor válvula é concebido para que haja uma relação não linear entre o comando da válvula e a posição do obturador. Esta não linearidade é uma das características da válvula, sendo fornecida pelo fabricante.

A válvula pode ainda ter folgas mecânicas que fazem com que o seu movimento num sentido seja diferente do movimento em sentido oposto.

Os posicionadores eléctricos das válvulas permitem uma maior precisão, sendo mais caros.

Modelo prático da válvula



Quer o comando, quer a abertura da válvula são expressos em unidades normalizadas de 0 a 100%.

Sistemas mecânicos de rotação

Os sistemas mecânicos de translação são muito comuns em aplicações de engenharia:

- Motores, Juntas de braço robot
- Caixas de desmultiplicação

Relacionam:

- Ângulo de rotação [rad]
- Velocidade angular [rad / s] e aceleração angular [rad / s^2]
- Binário [Nm]

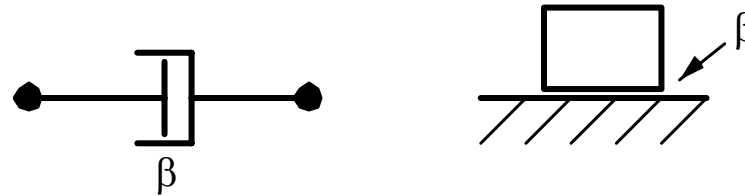
Momento de inércia

O momento de inércia é o análogo da massa para a rotação.

Quando um corpo em rotação com momento de inércia J [Nms^2] é actuado por um binário T [Nm], adquire uma aceleração angular dada por

$$T = J \frac{d^2\theta}{dt^2}$$

Atrito viscoso



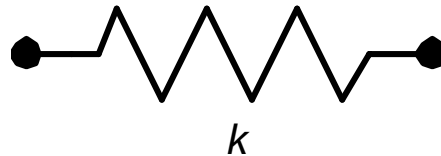
São os elementos que dissipam energia.

Quando existe uma diferença de velocidade de rotação entre os dois corpos o atrito corresponde com um binário que contraria o movimento e que depende

da velocidade relativa $\frac{d\theta}{dt}$. No caso linear o binário é dado por:

$$T = \beta \frac{d\theta}{dt}$$

Molas elásticas



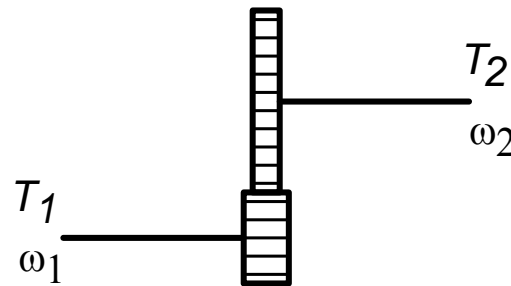
Elementos que armazenam energia potencial.

Quando a mola é desviada do ângulo θ em relação à posição de repouso, reage com um binário que se opõe ao movimento, dada para molas lineares por

$$T = k\theta$$

k $[Nm/rad]$ é chamada “constante da mola”.

Caixa de desmultiplicação

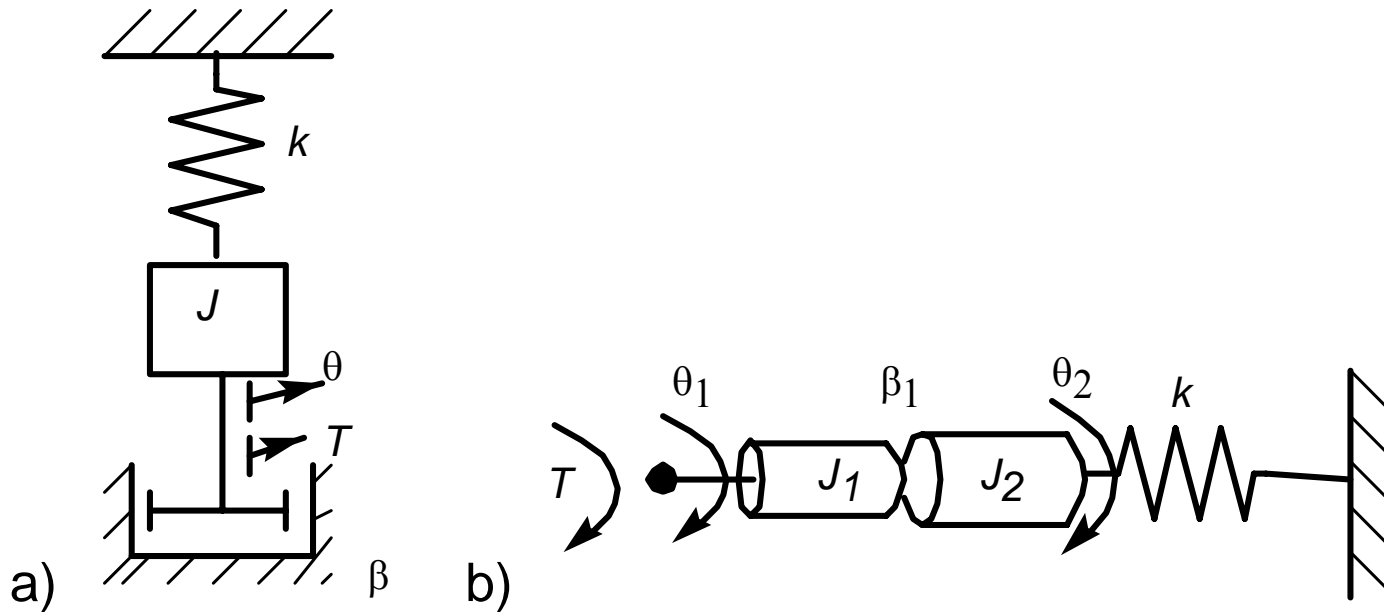


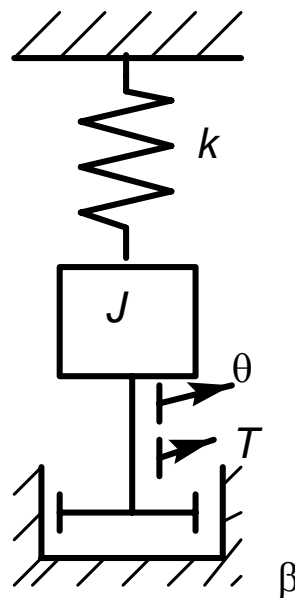
Uma caixa de esmultiplicação transforma o binário e a velocidade angular de acordo com as seguintes relações:

$$\omega_1 = \frac{1}{\alpha} \omega_2 \quad T_1 = \alpha T_2 \quad T_1 \omega_1 = T_2 \omega_2$$

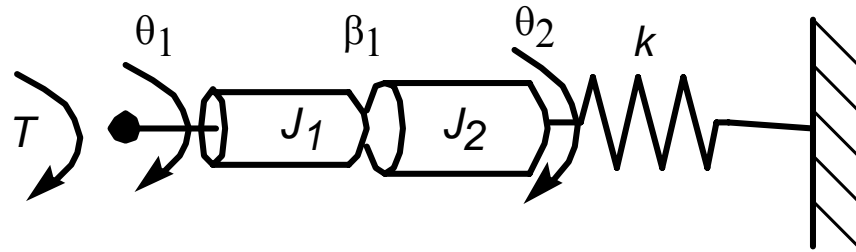
O parâmetro $\alpha = \frac{\omega_1}{\omega_2}$ é o inverso da razão de desmultiplicação da caixa.

Exemplos





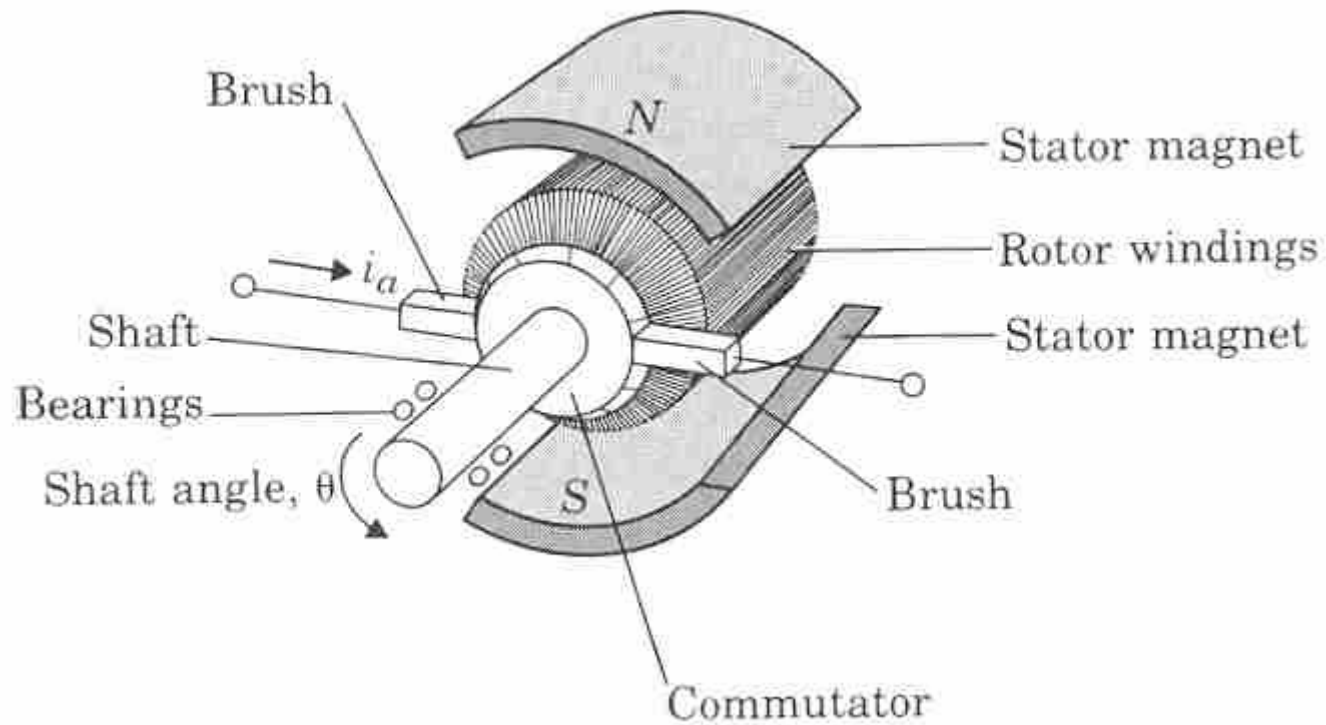
$$J \frac{d^2\theta}{dt^2} = T - k\theta - \beta \frac{d\theta}{dt}$$



$$J_1 \frac{d^2 \theta_1}{dt^2} = T - \beta_1 \left(\frac{d\theta_1}{dt} - \frac{d\theta_2}{dt} \right)$$

$$J_2 \frac{d^2 \theta_2}{dt^2} = -\beta_1 \left(\frac{d\theta_2}{dt} - \frac{d\theta_1}{dt} \right) - k\theta_2$$

Exemplo: Servomotor CC de íman permanente



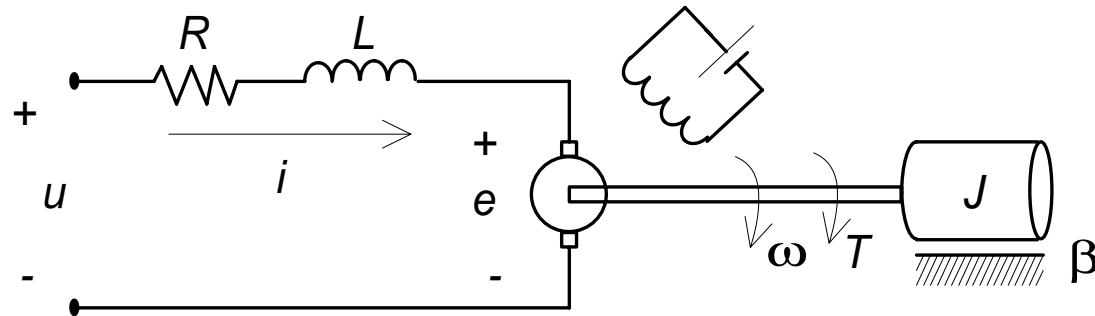
Um motor de corrente contínua tem essencialmente 2 partes:

- O **estátor**, onde estão fixos enrolamentos ou ímanes permanentes (em pequenos motores) que criam um campo magnético radial;
- O **rótor**, ligado mecânicamente ao veio do motor, onde há bobinas longitudinais que, ao serem percorridas por uma corrente originam uma força tangencial que o faz girar. Por forma a que a corrente no rótor tenha sempre o mesmo sentido, as escovas (contactos deslizantes) tocam nas lâminas do colectador ligadas às bobinas do rótor.

Bibliografia:

Franklin, Powell e Emami-Naeini. *Feedback control of dynamic systems*. Addison Wesley. Sec. 2.4

Modelo do servomotor CC de íman permanente



Binário do motor:

$$T(t) = K' \phi(t) i(t)$$

Sendo o fluxo ϕ criado pelo circuito de campo constante,

$$T(t) = Ki(t)$$

Tensão aos terminais do rotor

$$e = K_b \omega$$

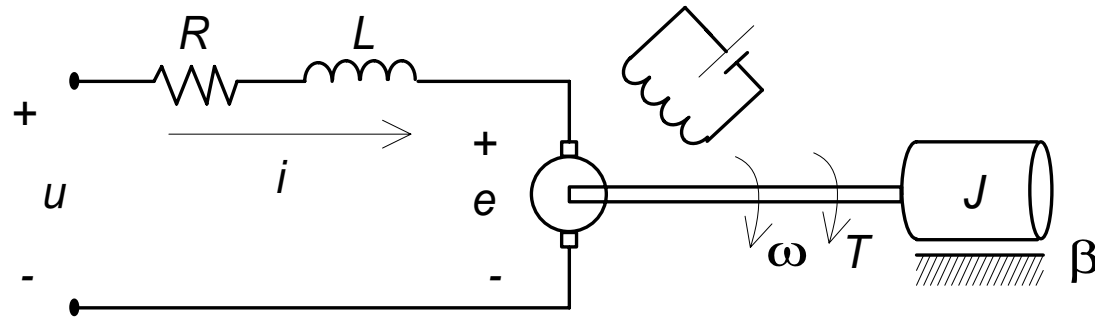
Escreva as equações que modelam o:

- Circuito do rotor;
- Movimento do rotor em termos da velocidade;
- Modelo de estado, tomando como saída a velocidade angular e estado

$$x_1 = \omega, \quad x_2 = i;$$

- Simplifique as equações supondo que a indutância do circuito do rotor é desprezável, por forma a obter um modelo de 1ª ordem;
- Modelo de estado, tomando como saída a posição angular e estado

$$x_1 = \theta, \quad x_2 = \omega, \quad x_3 = i;$$



Circuito do rotor do motor:

$$L \frac{di}{dt} + R i + e = u$$

Movimento do rotor do motor:

$$J \frac{d\omega}{dt} = T(t) - \beta \omega$$

Tomem-se como variáveis de estado do motor:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega \\ i \end{bmatrix}$$

obtêm-se as equações de estado, tomando como saída a velocidade ω :

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} -\frac{\beta}{J} & \frac{K}{J} \\ -\frac{K_b}{L} & -\frac{R}{L} \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{L} \end{bmatrix} u$$

$$y = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} x$$

Se quiséssemos modelar a posição, necessitaríamos de uma variável de estado adicional.

Modelo de estado tomando como saída a posição angular

$$x_1 = \theta, \quad x_2 = \omega, \quad x_3 = i$$

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{\beta}{J} & \frac{K}{J} \\ 0 & -\frac{K_b}{L} & -\frac{R}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{L} \end{bmatrix} u$$

$$y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} x$$

Modelo de complexidade reduzida

$$L \frac{di}{dt} + R i + e = u \quad J \frac{d\omega}{dt} = T(t) - \beta \omega \quad T(t) = K i(t) \quad e = K_b \omega$$

Assume-se a indutância do rotor desprezável: $L \approx 0$

$$R i + e = u \quad \rightarrow \quad i = \frac{u - e}{R} = \frac{u - K_b \omega}{R}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = -\frac{\beta}{J} \omega + \frac{K}{JR} (u - K_b \omega)$$

A tensão aplicada e a velocidade estão relacionadas pelo modelo simplificado:

$$\frac{d\omega}{dt} = -\left(\frac{\beta}{J} + \frac{K K_b}{JR}\right) \omega + \frac{K}{JR} (u - K_b \omega)$$

Mecânica Lagrangiana

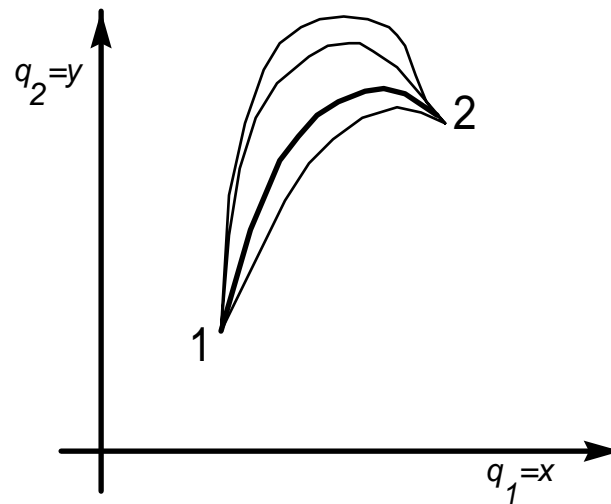
A aplicação da equação de Euler-Lagrange está baseada na descrição de um sistema físico com base num conjunto de quantidades denominadas ***coordenadas generalizadas***.

Designa-se o vector das coordenadas por q o qual existe no chamado ***espaço de configurações*** do sistema.

Por exemplo, dado um ponto material no plano, a configuração é descrita pelas coordenadas cartesianas do ponto $q_1 = x$ e $q_2 = y$.

A versão que vamos estudar aplica-se só a sistemas conservativos (sem atrito).

Imaginemos um ponto material no plano que é lançado, no instante t_1 do ponto 1 com uma dada velocidade inicial, atingindo o ponto 2 no instante t_2 . A trajectória seguirá uma trajectória única e bem definida, que se mostra a traço grosso. Podemos no entanto imaginar várias trajectórias virtuais.



Função Lagrangiana

Defina-se a **função Lagrangiana** L como a diferença entre as energias cinética T e potencial V :

$$L = T - V$$

A função Lagrangiana é uma função das coordenadas generalizadas q e das suas primeiras derivadas \dot{q} :

$$L = L(q, \dot{q})$$

Princípio de Hamilton

De todo o conjunto de condições admissíveis que um sistema pode assumir ao evoluir de uma configuração num dado instante, para outra configuração num instante sucessivo, aquela que de facto é seguida é a que torna mínimo o integral da Lagrangiana

$$I = \int_{t_1}^{t_2} (T - V) dt$$

nesse intervalo de tempo.

Um problema de optimização de dimensão infinita

A aplicação do Princípio de Hamilton requer a resolução de um problema de optimização num espaço de dimensão infinita. Quer dizer, o integral I é uma função que toma valores reais, mas cujo argumento é ele próprio uma função.

Este problema não pode pois ser resolvido com as técnicas básicas de “igualar a derivada a zero”. A sua solução é feita com outros métodos, ditos “variacionais” pois se baseiam em efectuar variações na trajectória óptima, relacionando-as com a correspondente variação em I . Estes métodos são estudados no âmbito do **Cálculo Variacional**.

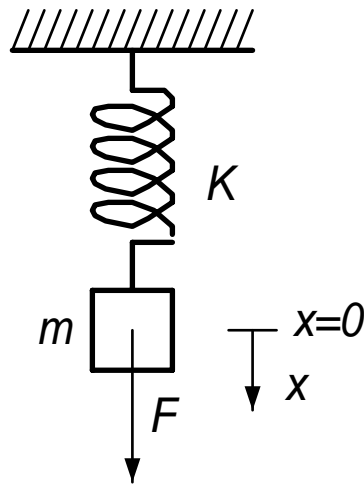
Equação de Euler-Lagrange

É condição suficiente de mínimo do integral I que a Lagrangiana satisfaça a equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = F_k \quad k = 1, \dots, n$$

em que F_k é o vector das forças generalizadas (momentos no caso dos movimentos de rotação) que agem positivamente na direcção da coordenada q_k .

Exemplo de aplicação da equação de Euler-Lagrange (massa/mola)



Neste caso:

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad V = \frac{1}{2} K x^2$$

Tome como coordenada generalizada $q = x$. Escreva o caso particular da equação de Euler-Lagrange para este sistema, obtendo uma equação diferencial ordinária para x .

Toma-se $q = x$ Lagrangiana: $L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}Kq^2$

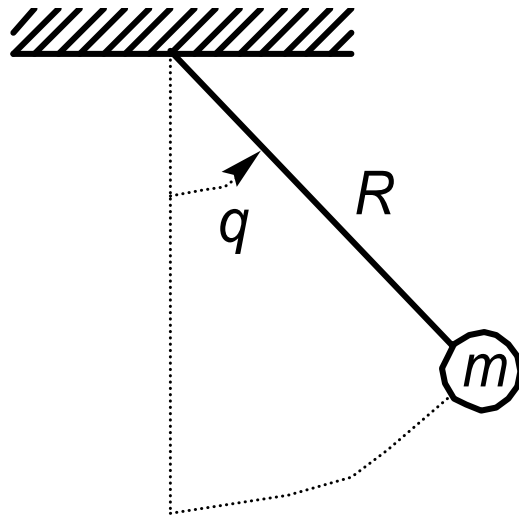
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = F$$

Substituindo a expressão da Lagrangiana na equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -Kq \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

$$\frac{d}{dt}(m\dot{q}) + Kq = F \quad \text{ou seja} \quad m\ddot{x} = F - Kx$$

Exemplos de aplicação da equação de Euler-Lagrange (Pêndulo)



Neste caso:

$$T = \frac{1}{2} m R^2 \dot{q}^2$$

$$V = mgR(1 - \cos q)$$

Escreva a equação de Euler Lagrange para este caso particular para obter uma equação diferencial para o ângulo q .

$$L = \frac{1}{2} mR^2 \dot{q}^2 - mgR(1 - \cos q)$$

Substituindo na equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -mgR \sin q \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = mR^2 \dot{q}$$

$$mR^2 \ddot{q} + mgR \sin q = 0$$

ou seja

$$\ddot{q} + \frac{g}{R} \sin q = 0$$

Referências

No âmbito da disciplina de Modelação e Simulação apenas se consideram casos muito simples de modelação com métodos da Mecânica Analítica. Para saber mais:

- Egeland e Gravdahl, cap. 8
- N. Maia (2000). *Introdução à Dinâmica Analítica*. IST Press.

Sistemas térmicos

Os sistemas térmicos dizem respeito ao aquecimento de objectos e ao transporte de energia térmica.

A **quantidade de calor** Q [J] necessária para aquecer um corpo de massa m , levando-o de uma temperatura inicial T_1 à temperatura T_2 é dado por:

$$Q = mc_p(T_2 - T_1)$$

em que c_p é o **calor específico** da substância de que é feito o corpo.

Fluxo de calor

O fluxo de calor é dado por

$$q = \frac{dQ}{dt} \quad [W]$$

O fluxo de calor para um corpo afecta a sua temperatura de acordo com

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{C} q$$

em que C é uma constante que depende da massa do corpo e das características térmicas da substância que o compõe. Esta expressão obtém-se derivando a expressão que relaciona a quantidade de calor e a temperatura.

Modos de transferência de energia

Comnsideram-se três modos de transferência de energia:

- Condução
- Convecção
- Radiação

Transferência de energia por condução

Um corpo à temperatura T_2 em contacto a outro à temperatura T_1 ($T_2 > T_1$) transfere energia para este com um fluxo de calor dado por:

$$q = \frac{1}{R}(T_2 - T_1)$$

em que $R [^{\circ}C / J / s]$ é a resistência térmica. A resistência térmica depende da condutividade térmica do material e da área de contacto dos dois corpos. A esta expressão dá-se o nome de Lei de Fourier.

Transferência de energia por convecção.

A transferência de energia por convecção está associada ao transporte de massa num fluido que se desloca. Não é possível ter um modelo geral simples para a convecção. Por vezes é razoável assumir

$$q = c_r (T_2 - T_1)$$

em que c_r é uma constante.

Transferência de energia por radiação

Um corpo à temperatura absoluta T [K] radia uma potência q [W] dada pela lei de Stefan-Boltzman:

$$q = A\varepsilon\sigma T^4$$

A [m²] é a área de exposição do corpo;

ε é a emissividade do corpo, número adimensional entre 0 e 1;

$\sigma = 5.670400 \times 10^{-8} \text{ Js}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzman.

Exemplo: Termómetro

Um termómetro de vidro cheio de mercúrio estabilizou-se na temperatura T_0 e é mergulhado no instante t_0 num líquido à temperatura T_L . Supõe-se que a massa do termómetro é tão pequena que não perturba a temperatura do líquido.

Supõe-se que a energia acumulada no vidro é desprezável.

Escreva uma equação diferencial que modele a evolução no tempo da temperatura T_m do mercúrio.

Sugestão: Escreva uma expressão que relaciona a quantidade de calor necessária para levar a temperatura do mercúrio de T_0 no instante t_0 à temperatura $T_m(t)$ no instante t .

Derive esta expressão para obter uma expressão para o correspondente fluxo de calor $q(t)$.

Por outro lado, admitindo que a transferência de calor se faz apenas por condução, pode escrever uma outra expressão para o mesmo fluxo em função das temperaturas do líquido e do mercúrio.

Quantidade de calor necessária para levar o mercúrio da temperatura T_0 à temperatura $T_m(t)$:

$$Q(t) = C(T_m(t) - T_0)$$

Derivando em ordem ao tempo: $q(t) = C \frac{dT_m(t)}{dt}$

Por outro lado $q(t) = \frac{1}{R}(T_L - T_m(t))$

Eliminando $q(t)$ entre as duas expressões:

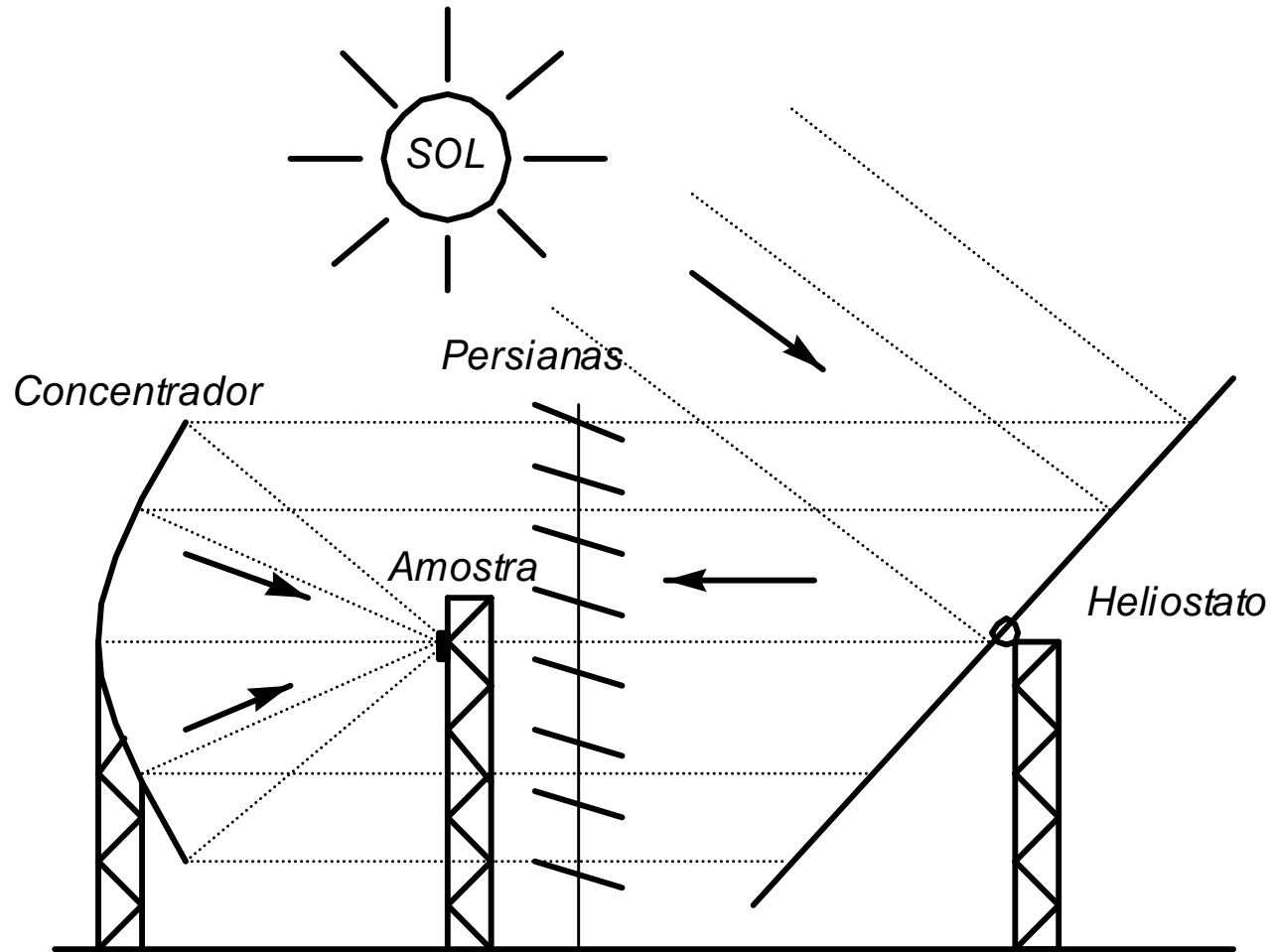
$$RC \frac{d}{dt} T_m(t) + T_m(t) = T_L$$

Exemplo: Modelo de um forno solar para tratamento de materiais



Grande forno solar para teste de materiais, Odeillo, Pirinéus franceses.

Referência: M. Berenguel, E. F. Camacho, F. J. García-Martin, and F. Rúbio (1999). Temperature control of a solar furnace. *IEEE Control Systems Magazine*, 19(1):8-24. Disponível na documentação auxiliary da disciplina.



Entrada manipulada: Comando da persiana

Perturbação: Potência da radiação solar

Saída: Temperatura da amostra

O modelo obtém-se fazendo um balanço da energia na amostra:

$$\frac{d}{dt}T = -\alpha_1 T^4 - \alpha_2 (T - T_{amb}) + g(u)R$$

T - Temperatura da amostra

T_{amb} - Temperatura ambiente

R - Potência da radiação solar

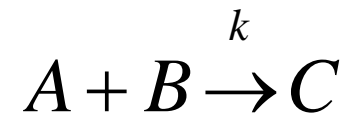
u - Comando da persiana. A função g depende da geometria.

Cinética Bioquímica

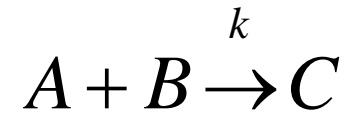
A cinética bioquímica diz respeito à determinação das concentrações de substâncias químicas nos sistemas biológicos como funções do tempo.

Lei de acção de massas

Se o químico A reage com o químico B para produzir o químico C :



A taxa de reacção é dada por $k[A][B]$ em que $[A] = c_A$ representa a concentração de A .



Considere-se um intervalo de tempo de comprimento Δt , entre t e $t + \Delta t$ e seja N_A o número de moléculas de A . Tem-se:

$$N_A(t + \Delta t) - N_A(t) = -kN_A N_B \Delta t$$

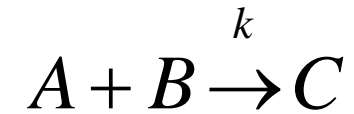
Dividindo pelo número total de moléculas e por Δt :

$$\frac{c_A(t + \Delta t) - c_A(t)}{\Delta t} = -kc_A c_B$$

$$\frac{c_A(t + \Delta t) - c_A(t)}{\Delta t} = -k c_A c_B$$

Fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, a razão incremental tende para a derivada e obtém-se a equação diferencial

$$\frac{dc_A}{dt} = -k c_A c_B$$

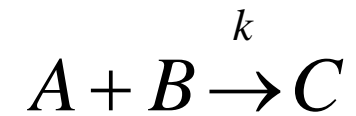


Analogamente para a espécie B :

$$\frac{dc_B}{dt} = -kc_A c_B$$

e para a espécie C (produto da reacção):

$$\frac{dc_c}{dt} = kc_A c_B$$



$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_A c_B$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -kc_A c_B$$

$$\frac{dc_c}{dt} = kc_A c_B$$

Defina-se o estado:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \end{bmatrix}$$

Equações de estado:

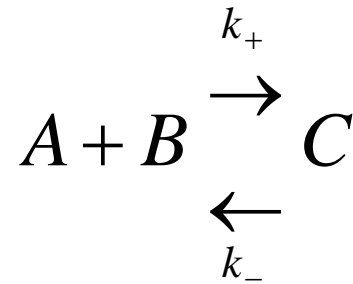
$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k x_1 x_2 \\ -k x_1 x_2 \\ k x_1 x_2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ f_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k x_1 x_2 \\ -k x_1 x_2 \\ k x_1 x_2 \end{bmatrix}$$

Repare-se que podíamos ter um sistema com apenas duas variáveis de estado se apenas escrevêssemos as equações para A e B:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k x_1 x_2 \\ -k x_1 x_2 \end{bmatrix}$$

Referência sobre este exemplo:

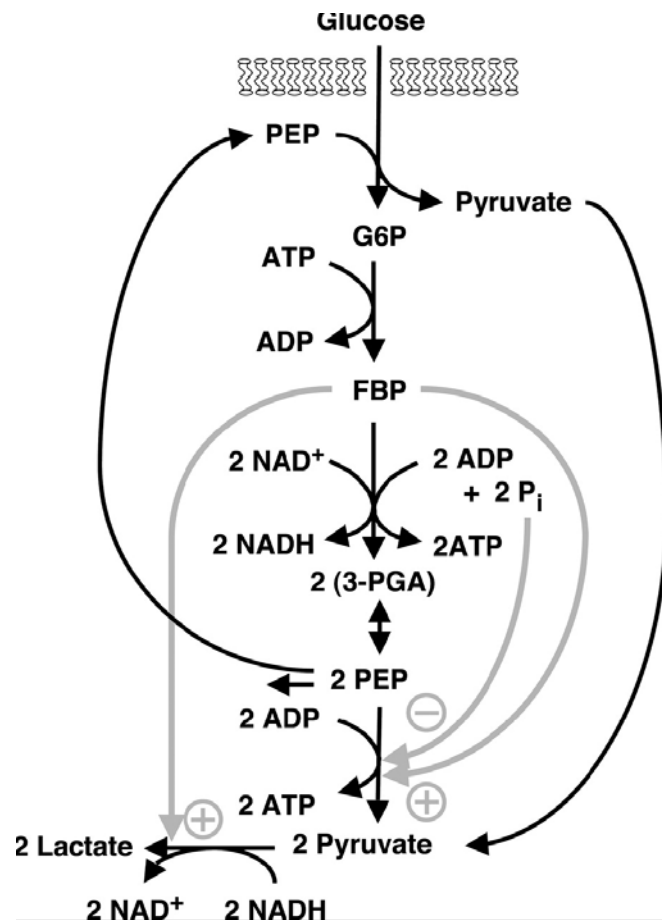
Cap. 6 de Britton, *Essential Mathematical Biology*, Springer.

Exemplo: Reacção reversível

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_+ c_A c_B + k_- c_C \quad \frac{dc_B}{dt} = -k_+ c_A c_B + k_- c_C$$

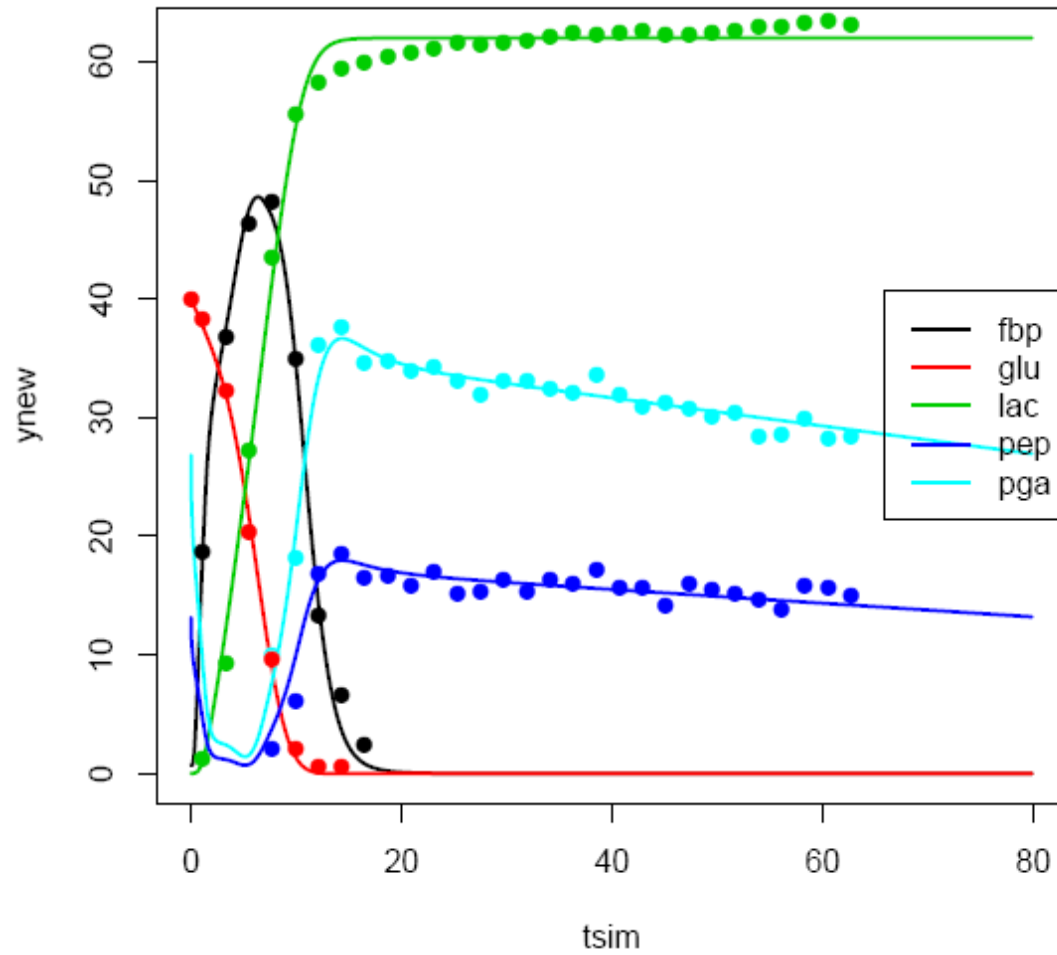
$$\frac{dc_C}{dt} = k_+ c_A c_B - k_- c_C$$

Exemplo: Metabolismo da glucose pelo *Lactococcus Latys*

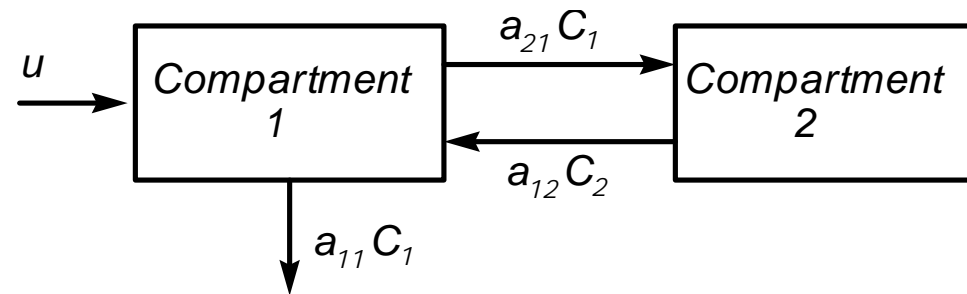


$$\begin{aligned}
 \dot{X}_1 &= -\beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} \\
 \dot{X}_2 &= \beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} - \beta_2 X_2^{h_{22}} \text{ATP}^{h_{2ATP}} \\
 \dot{X}_3 &= \beta_2 X_2^{h_{22}} \text{ATP}^{h_{2ATP}} - \beta_3 X_3^{h_{33}} P_i^{h_{3P_i}} \text{NAD}^{h_{3NAD}} \\
 \dot{X}_4 &= 2\beta_3 X_3^{h_{33}} P_i^{h_{3P_i}} \text{NAD}^{h_{3NAD}} + \alpha_4 X_5^{g_{45}} - \beta_4 X_4^{h_{44}} \\
 \dot{X}_5 &= \beta_4 X_4^{h_{44}} - \beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} - \alpha_4 X_5^{g_{45}} \\
 &\quad - \beta_{51} X_3^{h_{513}} X_5^{h_{515}} P_i^{h_{51P_i}} - \beta_{52} X_5^{h_{525}} \\
 \dot{X}_6 &= \beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} + \beta_{51} X_3^{h_{513}} X_5^{h_{515}} P_i^{h_{51P_i}} \\
 &\quad - \beta_{61} X_6^{h_{616}} X_3^{h_{613}} \text{NAD}^{h_{61NAD}} - \beta_{62} X_6^{h_{626}} \\
 \dot{X}_7 &= \beta_{61} X_6^{h_{616}} X_3^{h_{613}} \text{NAD}^{h_{61NAD}} \tag{2}
 \end{aligned}$$

40 mmol Aerobic



Modelos compartimentais



Varição da quantidade 1 no **compartimento 1**, D_1 , entre t e $t + \Delta t$:

$$D_1(t + \Delta t) - D_1(t) = (u - a_{21}c_1 + a_{12}c_2 - a_{11}c_1)\Delta t$$

Dividindo por Δt e pelo volume do compartimento V_1 e fazendo $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\dot{c}_1 = \frac{1}{V_1} (u - a_{21}c_1 + a_{12}c_2 - a_{11}c_1) \quad c_i = D_i / V_i$$

Equações de estado do modelo de 2 compartimentos:

$$\dot{c}_1 = \frac{1}{V_1} (u - a_{21}c_1 + a_{12}c_2 - a_{11}c_1)$$

$$\dot{c}_2 = \frac{1}{V_2} (a_{21}c_1 - a_{12}c_2)$$

Podem ser escritas na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{V_1}(a_{11} - a_{21}) & \frac{1}{V_1}a_{12} \\ \frac{1}{V_2}a_{21} & -\frac{1}{V_2}a_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{V_1} \\ 0 \end{bmatrix} u$$

As concentrações são sempre **positivas**. Isto pode ser explorado.

Exemplo: Modelos para a anestesia geral

Objectivo da anestesia: Levar o paciente a um estado clínico adequado à cirurgia.

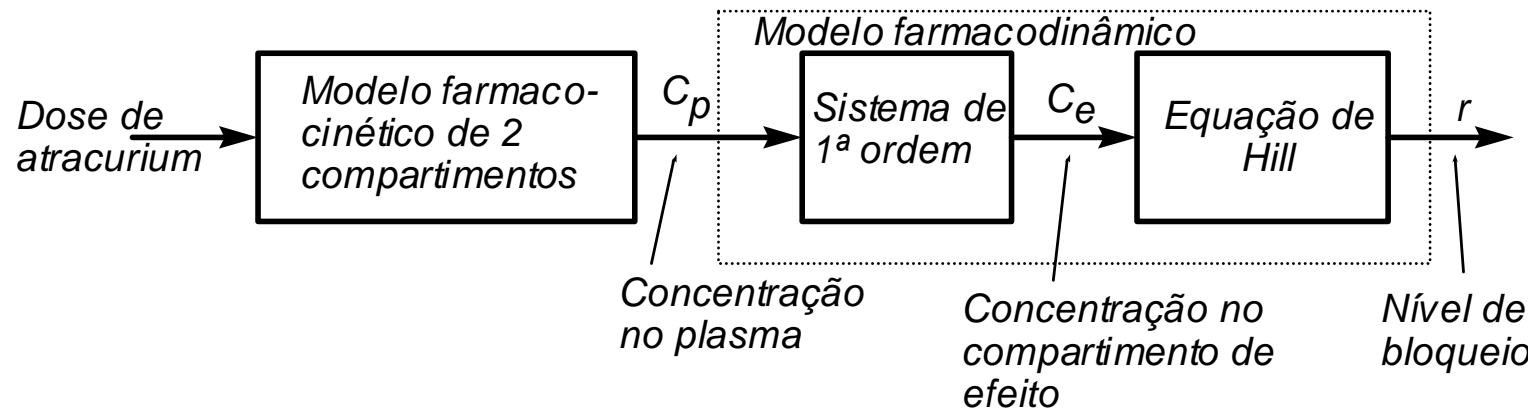
Componentes da anestesia:

- *Areflexia.* Perda de movimento causada pelo bloqueio neuromuscular.
- *Analgesia.* Ausência de resposta a estímulos nóxicos.
- *Hipnose.* Perda de consciência.

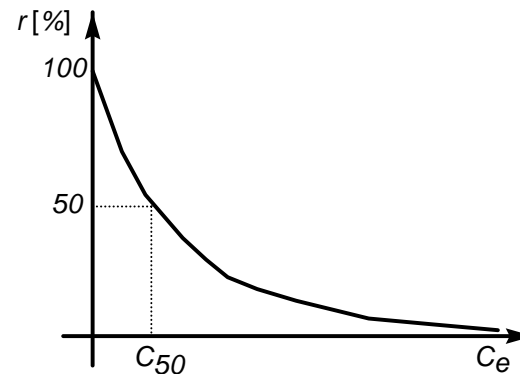
Estes efeitos podem ser obtidos através da infusão intravenosa de fármacos tal como o *atracurio* para o NMB, o *remifentanil* para a analgesia e o *propofol* para a hipnose. Entre outras coisas, o modelo depende do fármaco usado.



Modelo do bloqueio neuromuscular em anestesia

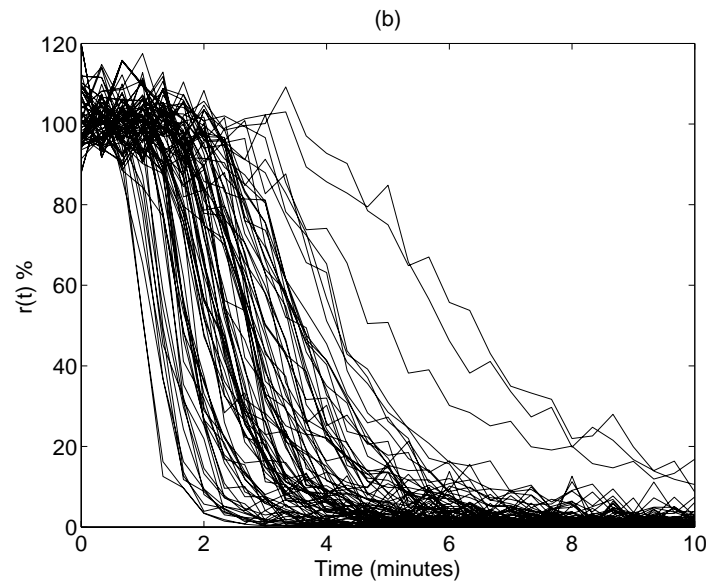


$$r = \frac{C_{50}^\gamma}{C_{50}^\gamma + C_e^\gamma}$$

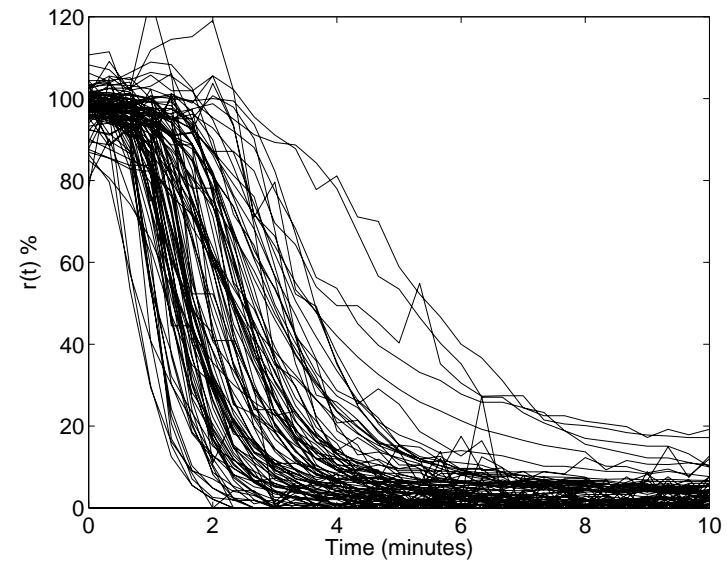


Este é um exemplo de um modelo de **Wiener**.

Resposta dos modelos vs. dados clínicos:



Modelos+ruído



Casos clínicos

Um problema na modelação: **Variabilidade**

Resultados obtidos pela FCUP em colaboração com o HGSA

Referências

Sobre modelos compartimentais e aplicações à anestesia:

J. M. Bailey e W. Haddad (2005). Drug dosing control in clinical pharmacology. *IEEE Control Systems Magazine*, 25(2):35-51.

Sobre a utilização de modelos para construir um controlador do nível de bloqueio neuromuscular, incluindo casos clínicos:

J. M. Lemos, H.- Magalhães, T. Mendonça e R. Dionísio (2005). Control of neuromuscular blockade in the presence of sensor faults. *IEEE Trans. Biomedical Engineering*, 52(11):1902-1911.

Estas referências podem ser encontradas na documentação complementar da disciplina.