

## Sistemas térmicos



## Sistemas térmicos

Os sistemas térmicos dizem respeito ao aquecimento de corpos 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.

Corpo de massa  $m$  inicialmente à temperatura  $T(t_0)$

Recebe uma quantidade de calor  $Q$  entre  $t_0$  e  $t$  e passa a estar à temperatura  $T(t)$ .

$$Q = \int_{t_0}^t q(\tau) d\tau = mc_p(T(t) - T(t_0))$$

Derivando em ordem a  $t$

$$q = mc_p \frac{dT}{dt} \quad C = mc_p \quad C \frac{dT}{dt} = q$$

As equações diferenciais para a temperatura obtêm-se contabilizando os fluxos de calor que entram e saem do corpo (**conservação de energia**).

## 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 com 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  $R$  [ $^{\circ}\text{C}/\text{J}/\text{s}$ ] é a **resistência térmica**. A resistência térmica depende da condutividade térmica do material e da área de contacto entre os 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:

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

$A$  [ $m^2$ ] é a área de exposição do corpo;

$\varepsilon$  é a emissividade do corpo, número adimensional entre 0 e 1;

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



## Exemplo: Termómetro

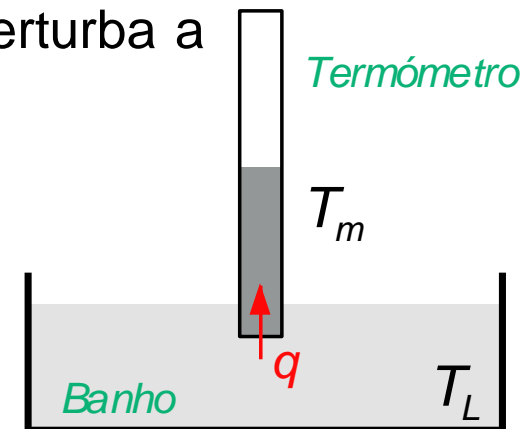
Um termómetro de vidro cheio de mercúrio estabilizou-se na temperatura  $T_0$  e é mergulhado no instante  $t_0$  num líquido à temperatura  $T_L$ . Supõe-se que:

- a massa do termómetro é tão pequena que não perturba a temperatura do líquido.
- a energia acumulada no vidro é desprezável.

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

Ajudas:  $C \frac{dT}{dt} = q$ ,

Transferência do calor por condução:  $q = \frac{1}{R} (T_2 - T_1)$



## Solução

Variação da temperatura termómetro  $C \frac{dT_m(t)}{dt} = q(t)$

Fluxo de calor por condução do banho para o termómetro  $q(t) = \frac{1}{R} (T_L - T_m(t))$

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

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

Condição inicial:  $T(0) = T_0$

Qual a relação entre  $T_m(t)$  e  $T_L$  no equilíbrio?

Mostre que no equilíbrio não há fluxo de calor entre o banho e o termómetro.

Repita o problema supondo a energia acumulada no vidro.

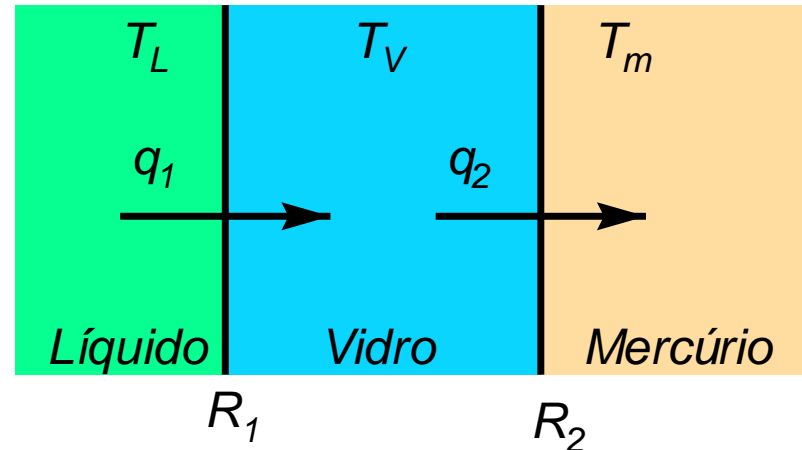
## Efeito de acumulação de energia no vidro

Equilíbrio de energia para o vidro

$$C_1 \frac{dT_v}{dt} = \frac{1}{R_1} (T_L - T_V) - \frac{1}{R_2} (T_V - T_m)$$

Equilíbrio de energia para o mercúrio

$$C_2 \frac{dT_m}{dt} = \frac{1}{R_2} (T_V - T_m)$$



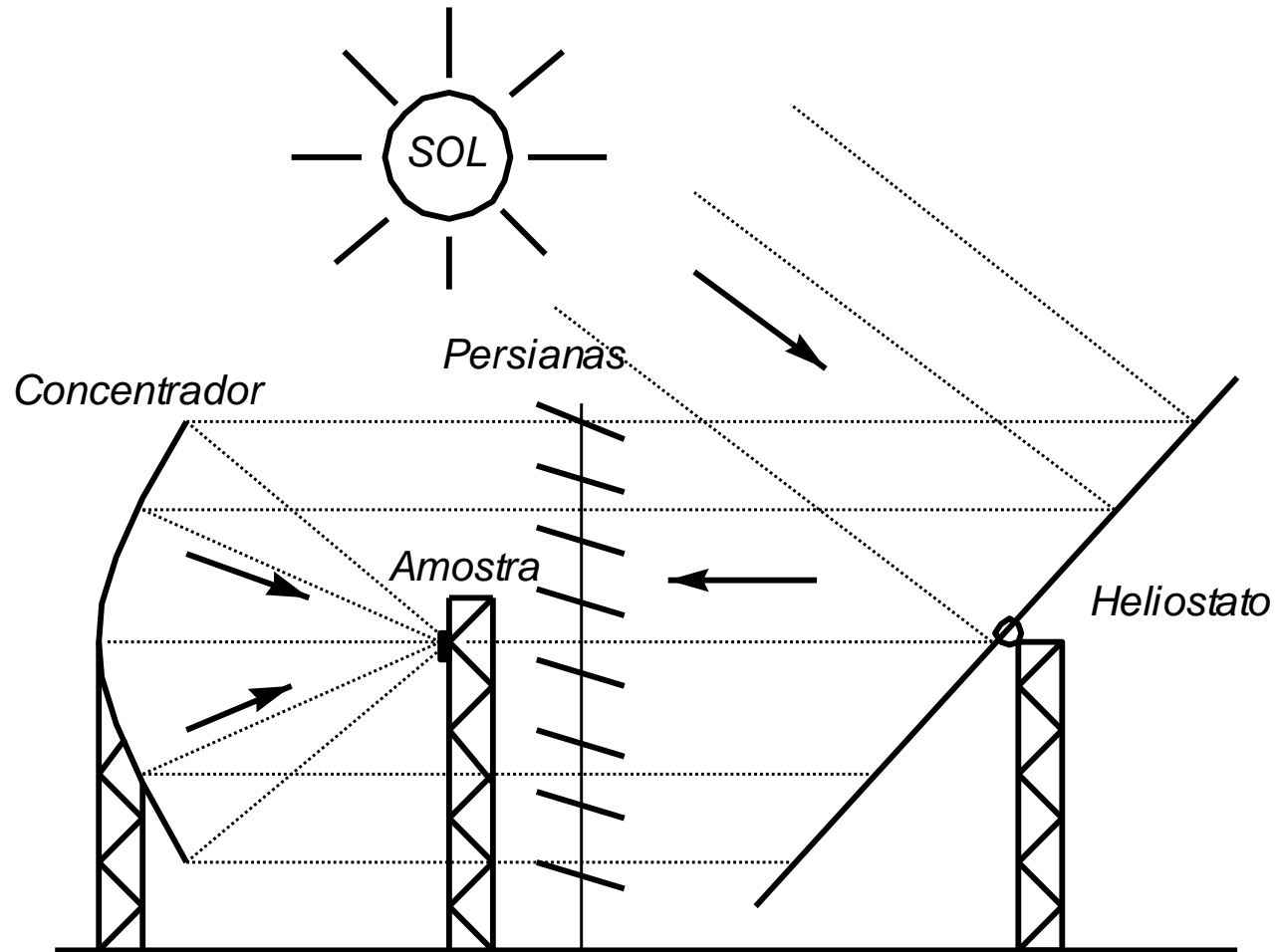
A temperatura do vidro é imposta exteriormente e constitui uma entrada do sistema

## 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.



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



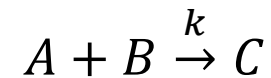
Fonte: blendspace.com

## Cinética Bioquímica

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

### *Lei de ação de massas*

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

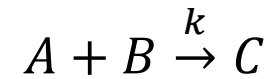


A taxa de reação é dada por  $k[A][B]$  em que  $[A] = c_A$  representa a concentração de  $A$ .

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

Aproximação válida para baixas concentrações.



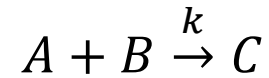


Analogamente para as espécies  $A$  e  $B$ :

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_Ac_B \qquad \frac{dc_B}{dt} = -kc_Ac_B$$

e para a espécie  $C$  (produto da reação):

$$\frac{dc_C}{dt} = kc_Ac_B$$



$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_Ac_B \quad \frac{dc_B}{dt} = -kc_Ac_B \quad \frac{dc_C}{dt} = kc_Ac_B$$

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 (não lineares):

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -kx_1x_2 \\ -kx_1x_2 \\ kx_1x_2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ f_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -kx_1x_2 \\ -kx_1x_2 \\ kx_1x_2 \end{bmatrix}$$

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

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -kx_1x_2 \\ -kx_1x_2 \end{bmatrix}$$

Em geral, a taxa de reação  $k$  depende de outros fatores como a temperatura (lei de Arrhenius), ou a concentração de outras espécies (catalisadores).

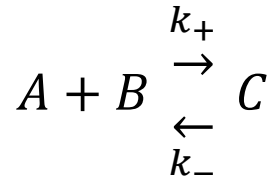
Uma aproximação melhor é em geral

$$\frac{dc_c}{dt} = kc_A^\alpha c_B^\beta, \quad \alpha \text{ e } \beta \text{ parâmetros que dependem da reação.}$$

Referência sobre este exemplo:

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

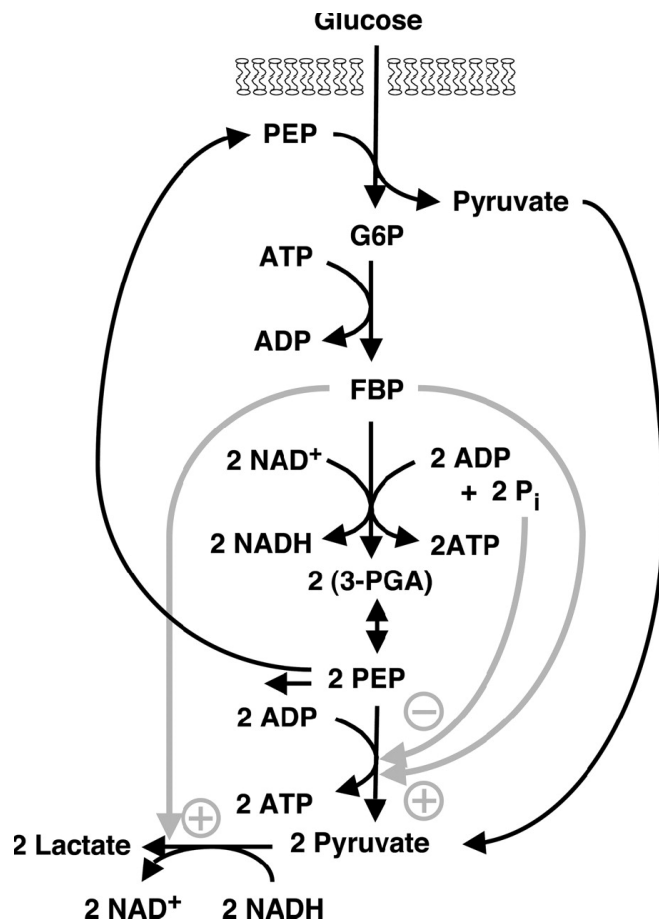
## Exemplo: Reacção reversível



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

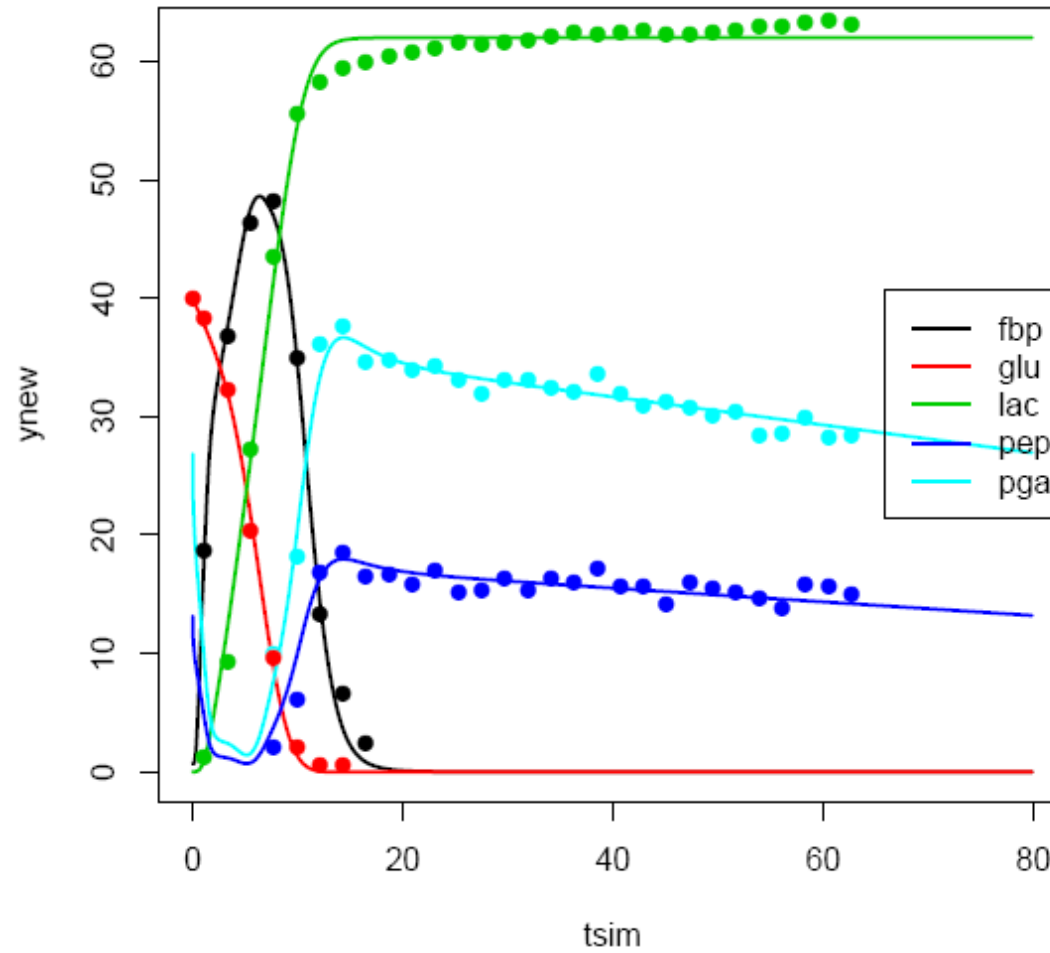
$$\frac{dc_C}{dt} = k_+c_Ac_B - k_-c_C$$

## Exemplo: Metabolismo da glucose pelo *Lactococcus Latys*



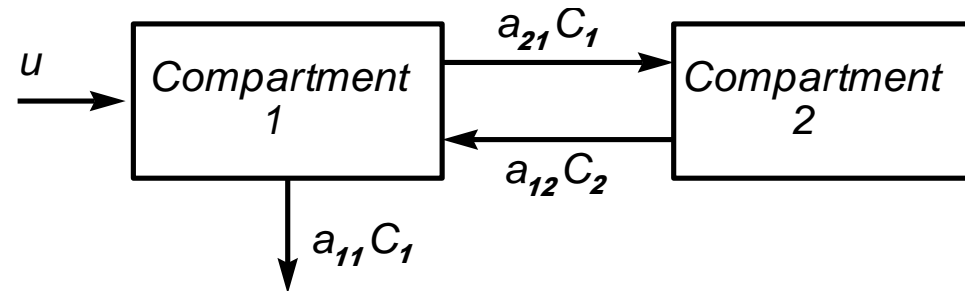
$$\begin{aligned}
 \dot{X}_1 &= -\beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} \\
 \dot{X}_2 &= \beta_1 X_1^{h_{11}} X_2^{h_{12}} X_5^{h_{25}} - \beta_2 X_2^{h_{22}} \text{ATP}^{h_{2ATP}} \\
 \dot{X}_3 &= \beta_2 X_2^{h_{22}} \text{ATP}^{h_{2ATP}} - \beta_3 X_3^{h_{33}} P_i^{h_{3P_i}} \text{NAD}^{h_{3NAD}}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

40 mmol Aerobic



Projeto DYNAMO. Resultados de modelação da tese de Rodrigo Piedade.

## Modelos compartimentais



Variação 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  $\Delta t$  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:

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



Para  $u = 0$  (não há administração de fármaco) e  $a_{11} = 0$  (sem excreção), é

$$\begin{bmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{V_1} a_{21} & \frac{1}{V_1} a_{12} \\ \frac{1}{V_2} a_{21} & -\frac{1}{V_2} a_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \frac{\dot{m}_1}{V_1} &= -\frac{1}{V_1} a_{21} \frac{m_1}{V_1} + \frac{1}{V_1} a_{12} \frac{m_2}{V_2} & \rightarrow & \dot{m}_1 = -a_{21} \frac{m_1}{V_1} + a_{12} \frac{m_2}{V_2} \\ \frac{\dot{m}_2}{V_2} &= \frac{1}{V_2} a_{21} \frac{m_1}{V_1} - \frac{1}{V_2} a_{12} \frac{m_2}{V_2} & \rightarrow & \dot{m}_2 = a_{21} \frac{m_1}{V_1} - a_{12} \frac{m_2}{V_2} \end{aligned}$$

Somando as duas equações

$$\dot{m}_1 + \dot{m}_2 = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{d}{dt}(m_1 + m_2) = 0$$

ou seja, **a massa total é constante**.

Para além disso, as concentrações são sempre positivas para  $u(t) \geq 0$ .

Estes dois factos podem ser explorados para projetar controladores que garantam a estabilidade do sistema controlado.

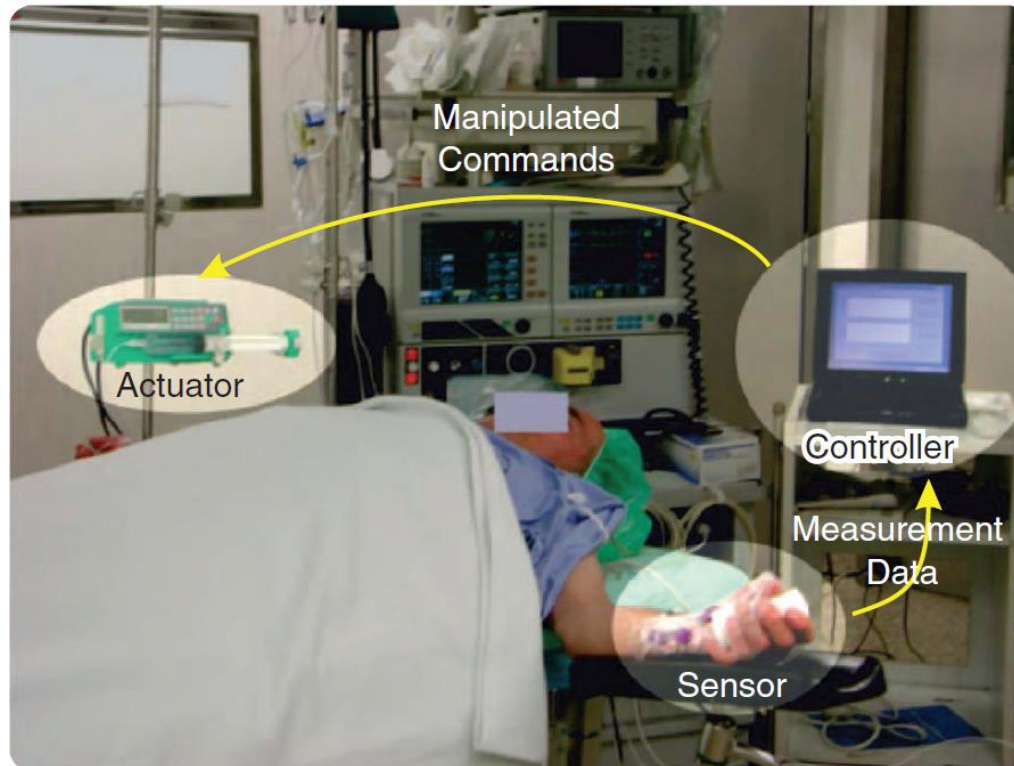
## Exemplo: Modelos para a anestesia geral

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

*Componentes da anestesia:*

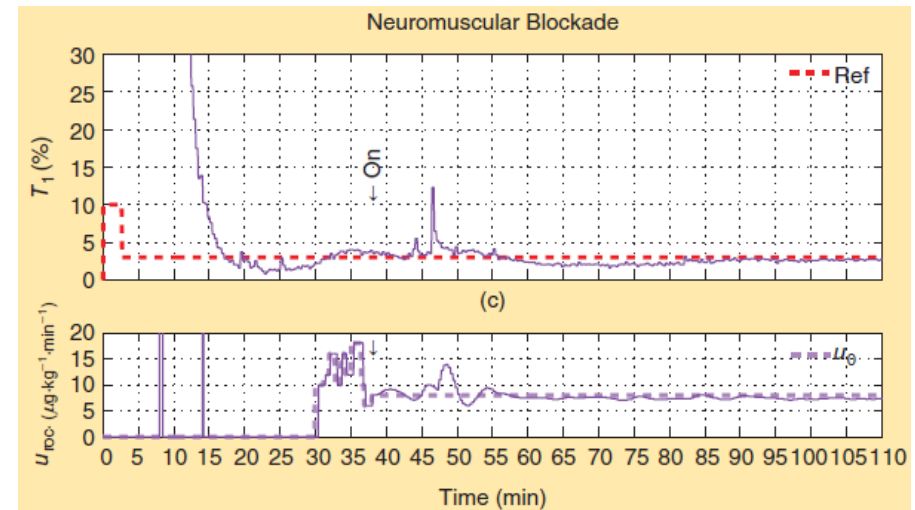
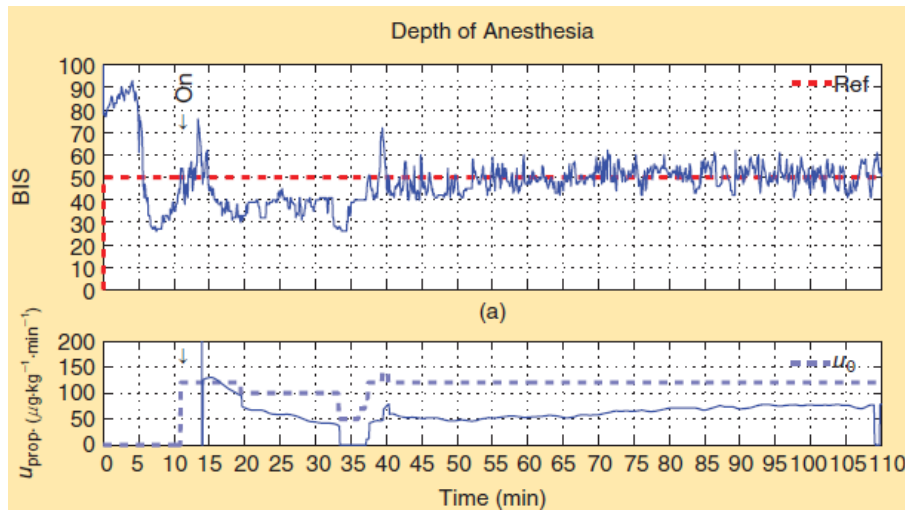
- *Areflexia.* Perda de movimento causada pelo bloqueio neuromuscular.
- *Analgesia.* Ausência de resposta a estímulos nóxicos.
- *Hipnose.* Perda de consciência.

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.



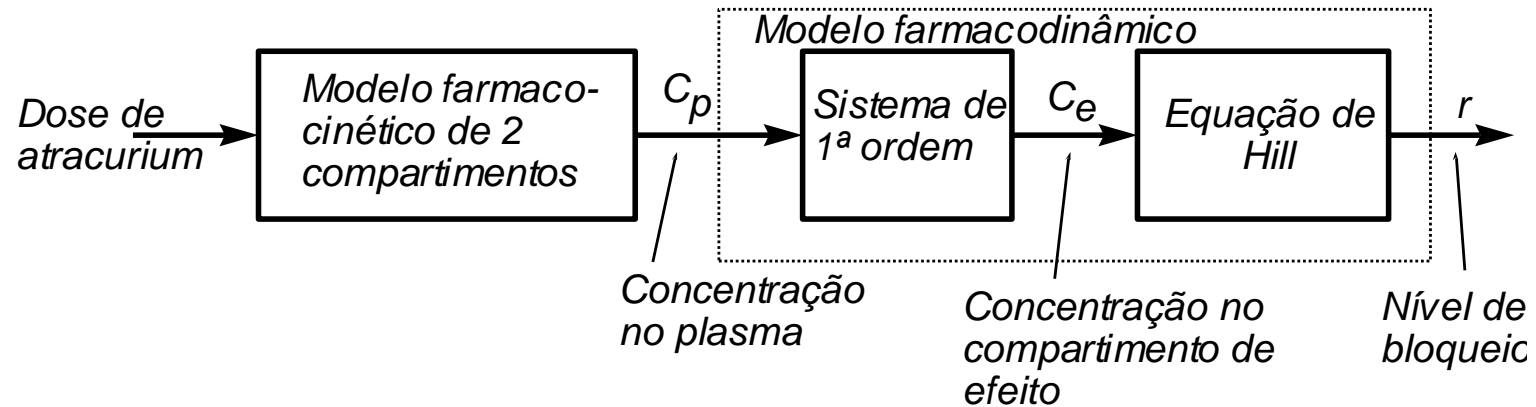
Fonte: Projeto GALENO, Hospital Geral de Santo António, Porto

J. M. Lemos *et. al.* (2014). Robust Control of Maintenance Phase Anesthesia. *IEEE Control Systems*, 34 (6): 24-38.

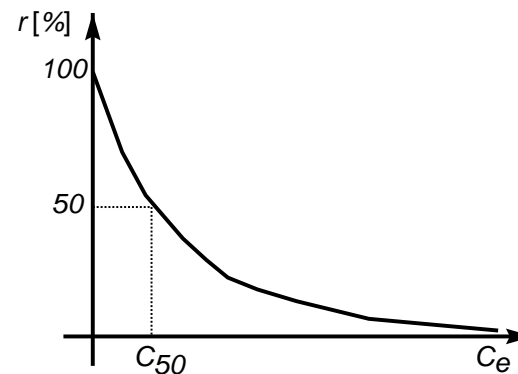


Como são os modelos usados para projetar estes controladores?

## Modelo do bloqueio neuromuscular em anestesia

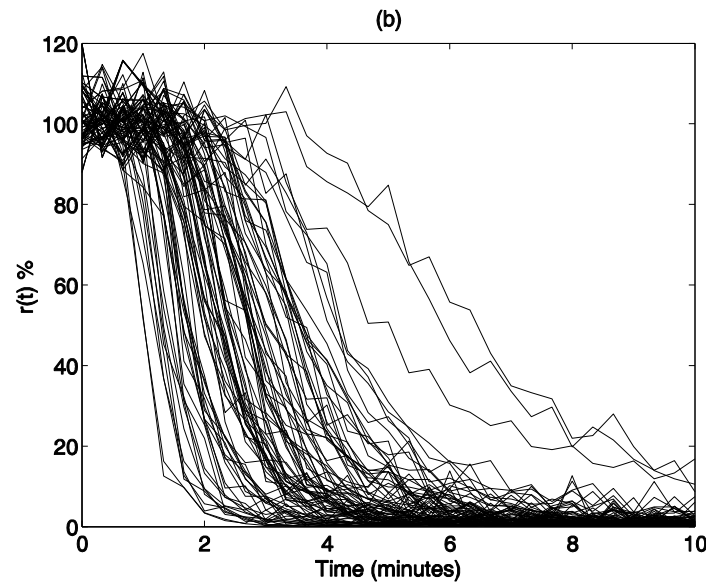


$$r = \frac{C_{50}^\gamma}{C_{50}^\gamma + C_e^\gamma}$$

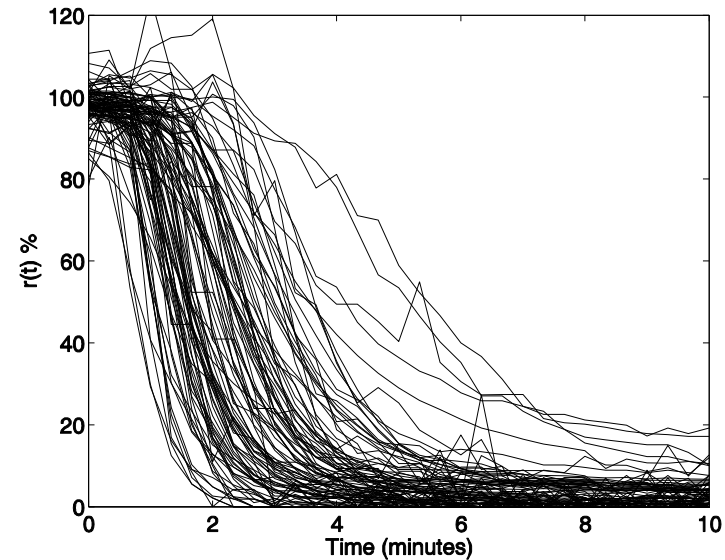


Este é um exemplo de um modelo de **Wiener**.

Resposta dos modelos vs. dados clínicos:



Modelos+ruído



Casos clínicos

Um problema na modelação: **Variabilidade**

Resultados obtidos pela FCUP em colaboração com o HGSA

## Outras 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 múltiplos** 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.