Javier Hipólito Marsal

47772532Z

Máster en Ingeniería Química

**Sesión 2 de ordenadores: Prácticas de convolución/deconvolución**

En la convolución se tiene una señal de entrada que interactúa con el sistema y se quiere determinar la señal de salida. En la deconvolución se tiene una señal de entrada y la de salida pero no sabe qué función ha perturbado el sistema anteriormente. Gráficamente véase la figura 1.

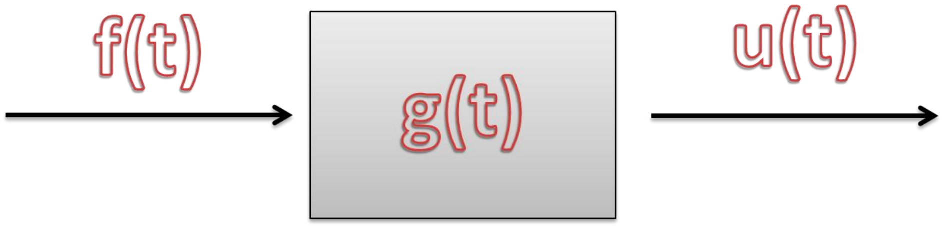


**Figure 1. Representación en diagrama de bloques de la convolución. Una función f(t) es transformada al sufrir una convolución con g(t) en una señal de salida u(t).**

Análisis matemático de la convolución

La convolución es la integral de dos funciones una vez una de ellas ha sido invertida y desplazada. Se entiende como la media ponderada de una función f($\tau$) en un momento t cuyo peso viene dado por g($-\tau$) con un desplazamiento t, lo que es lo mismo, el peso viene dado por g(t - $\tau$).

La expresión de la convolución es:

$$u(\tau) = (f * g)(t) = \int_{t=0}^{t=\boldsymbol{\tau}} f(\tau)\, g(t-\tau)\, d\tau = \int_{t=0}^{t=\boldsymbol{\tau}} f(t-\tau)\, g(\tau) d\tau \quad (1)$$

La primera igualdad de la ecuación (1) es la definición de la convolución, la segunda igualdad se cumple porque la propiedad conmutativa está asociada al operador de convolución.

Esta expresión es un tipo de transformada integral. Es decir, mediante el uso de una integral se busca un cambio de dominio, un mapeo, donde el problema es más fácil de resolver, como sucede con la transformada de Laplace o de Fourier. Se pasa del domino t al dominio $\boldsymbol{\tau}$. La convolución tiene en cuenta la contribución de cada uno de los posibles desplazamientos.

A efectos prácticos, reactores, el dominio $\boldsymbol{\tau}$ es un "supraconjunto" del tiempo t, incluye los elementos de los tiempos de la señal de entrada y además los elementos de tiempo correspondientes al tiempo de residencia del reactor.

En la **deconvolución** , en cambio, la solución no suele expresarse en términos matemáticos, se suele usar el concepto de convolución y algoritmos. El ejercicio 3 detalla una metodología de resolución.

Computación matricial de la convolución

Más allá del análisis matemático anterior, buscar una computación matricial es muy cómodo para la fácil determinación de convoluciones usando programación matemática.

El objetivo es escribir una matriz de forma sistemática, que albergue la expresión consecuencia de la aplicación de la integral discretizada.

$$C_{out}(\tau) = \sum_{t=0}^{t=\boldsymbol{\tau}} f(\tau) \cdot g(\tau - t)$$

( 2 )

$$C_{out\,(n+m-1\,x\,1)} = E_{n+m-1\,x\,m} \cdot C_{in\,(m\,x\,1)}$$

( 3 )

$$\begin{pmatrix} C_{out,1} \\ C_{out,2} \\ C_{out,3} \\ C_{out,4} \\ \dots \\ C_{out,n+m-1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ E_2 & E_1 & 0 & \dots & 0 \\ E_3 & E_2 & E_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ E_n & E_{n-1} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & E_n & E_{n-1} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & E_n & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_n \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_{in,1} \\ C_{in,2} \\ C_{in,3} \\ C_{in,m} \end{pmatrix}$$

( 4 )

Desarrollando para algunas concentraciones de salida (punto 1, punto 2, punto 3…)

$$C_{out,1} = E_1 \cdot C_{in,1}$$

$$C_{out,2} = E_2 \cdot C_{in,1} + E_1 \cdot C_{in,2}$$

$$C_{out,3} = E_3 C_{in,1} + E_2 \cdot C_{in,2} + E_1 \cdot C_{in,3}$$

( 5 )

Nótese que para cada concentración de salida el nuevo domino de tiempo $\boldsymbol{\tau}$ está formado por combinaciones de elementos para los que los subíndices de los sumandos suman el número del elemento de salida, menos 1. Se ha llamado $\boldsymbol{\phi}$ a la variable que representa los distintos tiempos de residencia en el reactor.

$$\boldsymbol{C_{out}(\tau)} = \sum_{\boldsymbol{\tau=0}}^{\boldsymbol{\tau}=\text{t}+\,\phi-1} \boldsymbol{C_{in}(\tau)} \cdot \boldsymbol{E}(\phi)$$

( 6 )

$$\boldsymbol{\phi} = \{\boldsymbol{\phi_1}, \boldsymbol{\phi_2}, \boldsymbol{\phi_3} \ldots \boldsymbol{\phi_n}\} \in \mathrm{R}^{n}$$

$$\tau = \{\tau_1, \tau_2, \tau_3 \ldots \tau_{t+\phi-1}\} \in \mathrm{R}^{t+\phi-1}$$

Sin embargo, es una cuestión de nomenclatura si se hubiese utilizado el 0 para nombrar al primer elemento de un conjunto entonces se podría definir así la concentración de salida:

$$\boldsymbol{C_{out}(\tau)} = \sum_{\boldsymbol{\tau=0}}^{\boldsymbol{\tau}=\text{t}+\,\phi} \boldsymbol{C_{in}(\tau)} \cdot \boldsymbol{E}(\phi)$$

( 7 )

$$\boldsymbol{\phi} = \{\boldsymbol{\phi_0}, \boldsymbol{\phi_1}, \boldsymbol{\phi_2} \ldots \boldsymbol{\phi_n}\} \in \mathrm{R}^{n}$$

$$\tau = \{\tau_0, \tau_1, \tau_2 \ldots \tau_{t+\phi}\} \in \mathrm{R}^{t+\phi}$$

De hecho es una relación más intuitiva y algunos lenguajes de programación como Python empiezan a contar sus elementos en 0. No obstante, el programado utilizado para esta práctica es Matlab que empieza a indexar en 1, así que se adoptará esta nomenclatura.

Con lo que se puede responder explícitamente a la siguiente pregunta: ¿Cuál es la relación del dominio $\boldsymbol{\tau}$ con el dominio temporal?

Para cada tiempo $\boldsymbol{\tau}$ se puede tener cualquier combinación lineal de $\boldsymbol{\phi}$ o de $\mathbf{t}$. Por ejemplo a un tiempo intermedio: Señales tempranas de entrada (entran antes al reactor) llevan más tiempo que otras señales más tardías y que se les asocia otro tiempo de residencia. Así se entiende que la convolución es una ponderación en el reactor de la proporción de moléculas viejas y nuevas en cada momento con su respectiva concentración.

$$C_{out,4} = E_4 C_{in,1} + E_3 \cdot C_{in,2} + E_2 \cdot C_{in,3} + E_1 C_{in,4}$$

( 8 )

Para el estudio de reactores se ha realizado la convolución en el tiempo. A modo de interpretación física $\boldsymbol{\tau}$ es el tiempo de reloj y $\boldsymbol{\phi}$ y $\mathbf{t}$ combinaciones de tiempos asociadas a las señales (tiempo transcurrido en un tramo u otro) que serán iguales al de reloj $\boldsymbol{\tau}$.

Sí

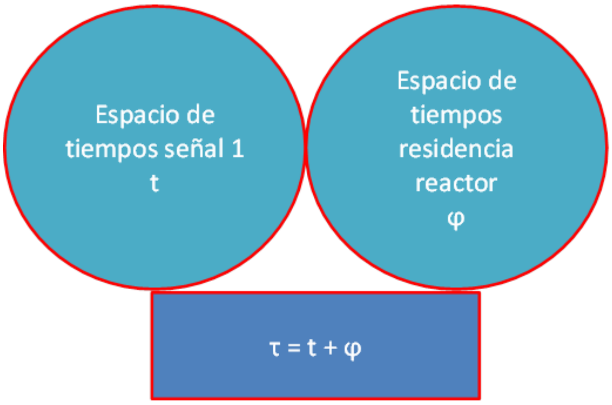


**Figure 2. Espacios de tiempos existentes y restricción.**

Para todos los casos el incremento de tiempo asociado a la convolución, señal de salida, se ha calculado usando la suma de los tiempos de cada señal.

$$\Delta t_{conv} = \frac{\left(t_m^{in} + t_m^{RTD}\right) - \left(t_1^{in} + t_1^{RTD}\right)}{m + n - 2} \tag{9}$$

A continuación se muestran aquellos algoritmos que representan la secuencia de los conceptos clave a calcular en cada problema. Por simplicidad, se ha mezclado nomenclatura matemática vectorial con instrucciones Matlab, en lo referente a concatenación de vectores en las matrices. En las leyendas, se ha llamado convolución a la señal de salida.

**Problema 1**

Para resolver el problema se han escrito los vectores correspondientes a cada señal y se han asignado a la combinación de fila y columnas correspondientes según se muestra en Figure 3.

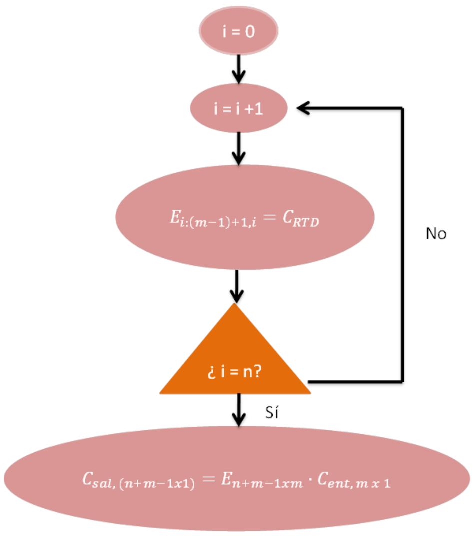


**Figure 3. Asignación de vectores a la matriz de convolución E.**

Lo más destacable de la señal de salida obtenida, es que de algún modo se corrige el mínimo a tiempos intermedios de la señal de entrada porque precisamente el reactor usado favorece un mayor tiempo de residencia en ese tramo de la señal. Si bien aquí se presenta como una curiosidad, este patrón podría usarse a la hora de construir un reactor con unos propósitos determinados.

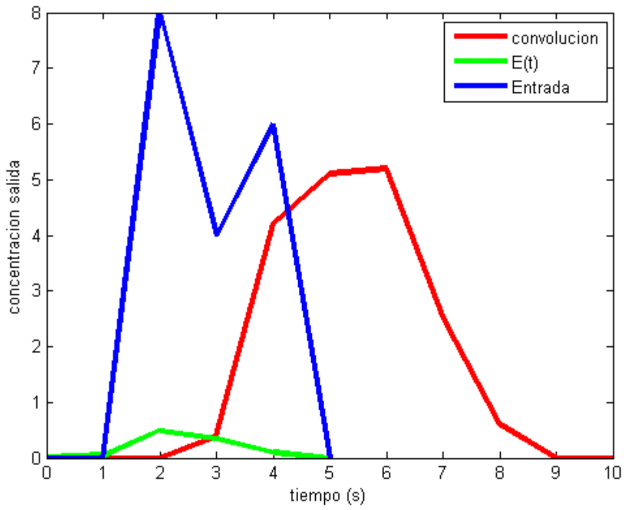


Figure 4. Señales del sistema reaccionante arbitrario 1.

**Problema 2**

Sigue el mismo patrón que el problema 1. La única diferencia es que ahora cambia la distribución de tiempos, que es la correspondiente a un reactor de tanque agitado.

Al no presentar el mismo orden de magnitud, no se aprecia la curva de distribución de tiempos de residencia "E(t)" idóneamente. Si se observa bien se trata de su representativa exponencial negativa en un RCTA. Nótese como la señal de salida imita en cierto modo la distribución de tiempos de residencia, ya que como se mencionó en la discusión teórica se tiene una ponderación de las permutaciones posibles.

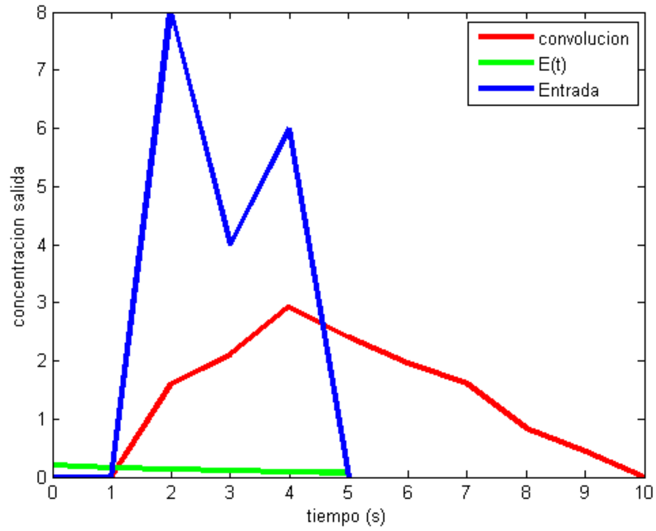


Figure 5. Señales del sistema, reactor continuo de tanque agitado.

Una vez vista la respuesta ante un reactor de tanque agitado, no es extraño preguntarse cuál sería en el caso de un reactor de flujo pistón. Así que los mismos datos se han resuelto, cambiando el reactor. Se obtiene exactamente la misma señal con un retraso equivalente al tiempo de residencia del reactor.

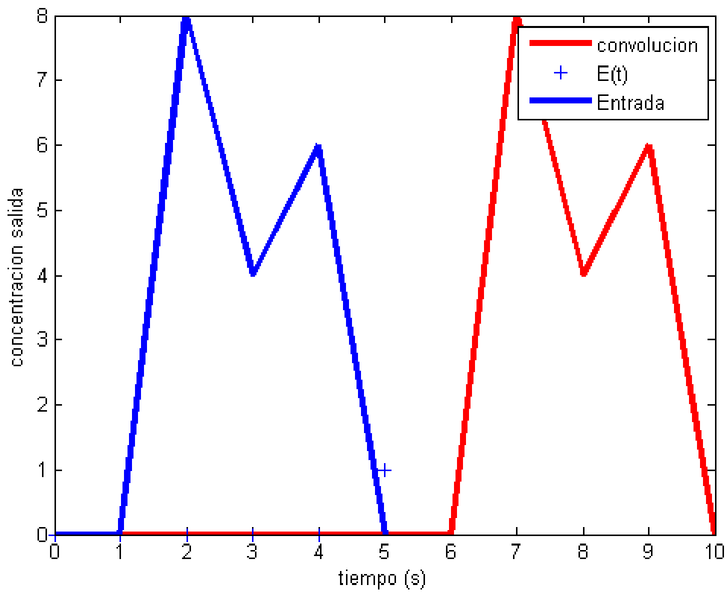


Figure 6. Señales del sistema, reactor de flujo pistón.

**Problema 3**

Este problema es un ejemplo de deconvolución. Se conoce la señal de salida y la entrada, pero no se conoce la intermedia. Se supone esta señal intermedia y por optimización se calculan sus elementos a cada tiempo, la única condición es que se cumpla la ecuación ( 3 ).

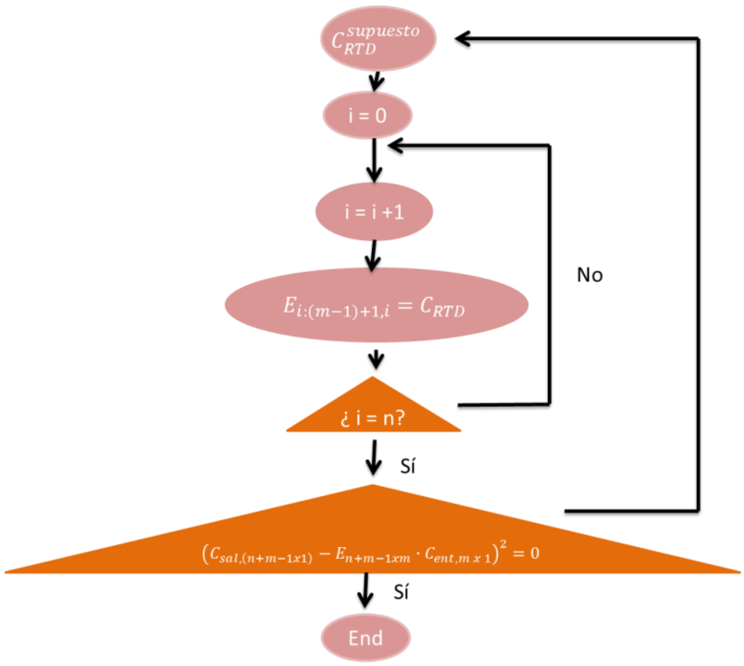


Figure 7. Asignación de señal RTD arbitraria y cálculo por optimización.

Pensando a la inversa que hasta ahora, veamos la lógica de la curva deconvolucionada obtenida. Para obtener la curva roja se debe tener cierto retardo y una distribución de tiempos que favorezca las concentraciones de tiempos intermedios en la señal de entrada.

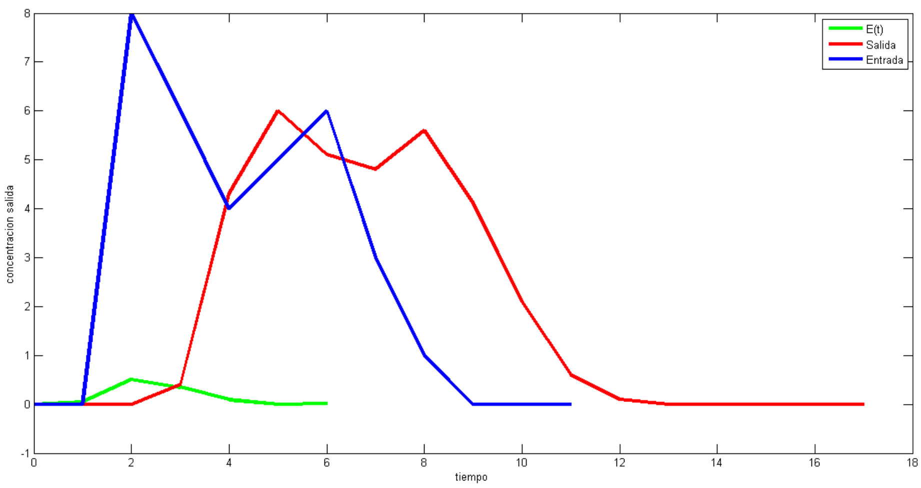


Figure 8. Señales de un reactor. La E(t) ha sido obtenida por deconvolución de las otras dos curvas.

**Otros ejemplos: Reactores en serie.**

Modificando ligeramente el script inicial, se ha modelado un reactor como combinación de reactores en serie. Se ha utilizado la señal de salida como entrada y el nuevo reactor para dar la salida del sistema modificado.

Convolución de reactores de flujo pistón en serie

Se reproduce la misma señal que la entrada al segundo reactor, pero con un retraso equivalente al tiempo de residencia, en este caso 3 segundos.

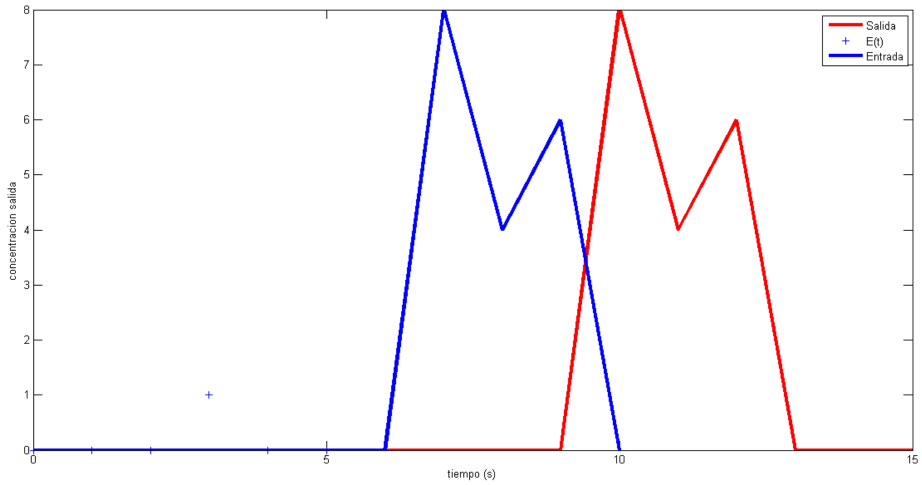


**Figure 9. Señales sistema PFR + PFR.**

Convolución de reactores de PFR + RCTA

Se tiene una solución como la del ejercicio 2, pero con un retardo inicial equivalente al tiempo de residencia del PFR.

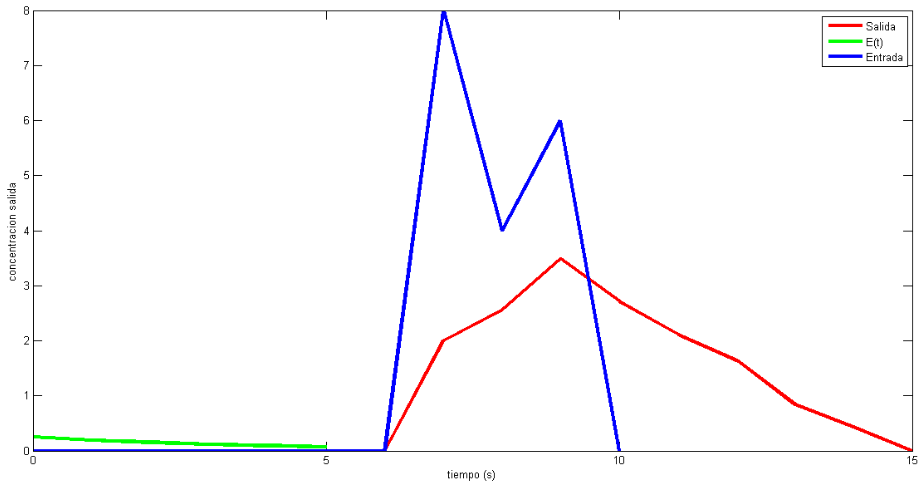


**Figure 10. Señales sisteam PFR + RCTA**

**Nota**

La distribución de tiempos de residencia y la curva de entrada han sido representadas en el mismo espacio temporal, una apreciación más realista es que una de las funciones se desplaza en el tiempo sobre el eje de abscisas. Veasé el gift animado de la Wikipedia. A mayor grado de solape entre curvas, mayor ponderación de la concentración en ese tiempo.

https://es.wikipedia.org/wiki/Convoluci%C3%B3n#/media/File:Convolucion_Funcion_Pi.gif

Referencias


https://es.wikipedia.org/wiki/Transformada_integral

https://es.wikipedia.org/wiki/Oliver_Heaviside (como padre de las funciones transferencia)

http://colah.github.io/posts/2014-12-Groups-Convolution/ (muy recomendable)

http://colah.github.io/posts/2014-07-Understanding-Convolutions/ (explica sentido físico convolución)