

RESOLUCIÓN DE UN PROBLEMA INVERSO VÍA SUBESTIMACIÓN LINEAL A TROZOS

* Javier Hernández Benítez ** José Meza

Recibido: 09/07/2012 Aprobado: 10/12/2012

Resumen

En el diseño de reactores trifásicos tipo columna de burbujeo (CBT), se requiere tener la distribución de sólidos dentro del reactor. Esta distribución satisface una ecuación diferencial ordinaria (EDO) de orden dos, con condiciones de frontera que fue desarrollada por D. R. Cova [2], y posteriormente por D. N. Smith y J. A. Ruether [8]. Algunos elementos de esta ecuación están dados por correlaciones que dependen de ciertos parámetros que son desconocidos, pero se pueden obtener a partir de datos experimentales. La metodología utilizada para determinar dichos parámetros es la sub-estimación lineal a trozos desarrollada por O. L. Mangasarian, J. B. Rosen y M. E. Thompson [6].

Palabras clave: Problemas inversos, minimización global, sub-estimación lineal a trozos, programación lineal.

AN INVERSE PROBLEM RESOLUTION VIA PIECEWISE LINEAR UNDERESTIMATION

Abstract

In reactor design phase bubble column type (CBT) is required to have the distribution of solids within the reactor. This distribution satisfies an ordinary differential equation (ODE) of order two, with boundary conditions that was developed by D. R. Cova [2], followed by D. N. Smith and J. A. Ruether [8]. Some elements of this equation are given by correlations that depend on certain parameters that are unknown but may be obtained from experimental data. The methodology used to determine these parameters is the sub-piecewise linear underestimation developed by O. L. Mangasarian, J. B. Rosen, M. E. Thompson [6].

Keywords: Inverse problems, global optimization, piecewise linear underestimation, linear programming.

* *Departamento de Matemáticas. Decanato de Ciencias y Tecnología, Universidad Centroccidental Lisandro Alvarado, Barquisimeto, Venezuela, jbenitez@ucla.edu.ve*

** *Departamento de Investigación de Operaciones y Estadística. Decanato de Ciencias y Tecnología, Universidad Centroccidental Lisandro Alvarado, Barquisimeto, Venezuela, jmeza@ucla.edu.ve*

Introducción

El diseño de reactores trifásicos tipo columna de burbujeo (CBT) se puede presentar como un modelo inverso en el cual se requiere determinar de la concentración de sólidos en función de la posición dentro de un reactor. Esta distribución generalmente se calcula usando un modelo de sedimentación-dispersión [5].

En estas columnas, el sólido tiende a sedimentar, pero es impulsado hacia arriba por el líquido, que a su vez es agitado por las burbujas gaseosas. Por lo tanto hay un decrecimiento gradual de la concentración de sólidos desde el fondo hacia el tope del reactor. El líquido y el gas operan en forma continua y las partículas sólidas son suspendidas por el movimiento del líquido inducido por el gas.

El flujo neto del sólido en el área transversal de la columna en una determinada posición, satisface una ecuación diferencial de orden 2, descrita por D. R. Cova [2], D. N. Smith y J. A. Ruether [8] y estudiado luego por J. Hernández (ver [3]).

Los coeficientes de dicha ecuación diferencial contienen ciertos parámetros que son desconocidos y nuestro trabajo es encontrar valores a dichos parámetros que mejor se ajusten a los datos experimentales mostrados en el cuadro 1. Este ajuste origina un problema de optimización global donde la función objetivo no se conoce en forma explícita, y el cálculo de su valor en un punto puede ser costoso en términos de tiempo y de recursos de computación, más aún, la función objetivo puede no ser diferenciable, y en consecuencia, no resulta conveniente aplicar los algoritmos convencionales que requieren diferenciability en la función objetivo.

La estrategia aplicada en el trabajo realizado por J. Hernández [3] fue realizada en dos etapas; la primera fue ejecutar un algoritmo presentado en [1] que consiste en “llenar” el dominio de puntos, luego tomar un simplex de forma aleatoria y luego encontrar un nuevo punto que sustituya al que tiene el peor valor objetivo. Ese proceso se repite hasta tener agrupado los puntos en “zonas de atracción”. La segunda etapa es aplicar el algoritmo de Nelder y Mead (ver [7]) en cada zona de atracción y finalmente, escoger el punto óptimo.

La estrategia antes descrita conlleva a realizar muchas evaluaciones de la función objetivo, lo que no es conveniente para el problema que estudiamos. Es por ello que se implementa el método de sub-estimación lineal a trozos desarrollado por O. L. Mangasarian, J. B. Rosen, y M. E. Thompson [6], para obtener el ajuste de los parámetros del modelo ya que solo una cantidad muy pequeña, comparada con la descrita en el párrafo anterior.

Este artículo esta organizado de la siguiente manera; en la Sección 2, se describe el modelo de reactores trifásicos tipo columna de burbujeo CBT considerado en este trabajo, que también fue estudiado por J. Hernández [3], donde se describe el modelo CBT mediante una ecuación diferencial con condiciones de frontera, que depende de correlaciones desconocidas. En la Sección 3, se formula el problema inverso que va a permitir ajustar los parámetros o correlaciones que están presentes en los coeficientes de la mencionada ecuación diferencial, con datos experimentales conocidos. En la Sección 4, se describe el método de sub-estimación lineal a trozos desarrollado por O. L. Mangasarian, J. B. Rosen, y M. E. Thompson [6], utilizada para obtener el ajuste de estos parámetros. En la sección 5, se presentan los resultados obtenidos al implementar la metodología usada y finalmente, en la sección 6, se indican las conclusiones que se obtienen de los resultados.

Modelo de columnas de burbujeo trifásicos

El modelo inverso CBT considerado en este trabajo, formulado por J. Hernández [3], consiste en el diseño de reactores trifásicos tipo columna de burbujeo CBT el cual requiere del conocimiento de la distribución de sólidos en función de la posición dentro del reactor. Esta distribución generalmente se calcula usando un modelo de sedimentación-dispersión (ver [5]). En estas columnas, el sólido tiende a sedimentar, pero es impulsado hacia arriba por el líquido, que a su vez es agitado por las burbujas gaseosas.

Por lo anterior hay un decrecimiento gradual de la concentración de sólidos desde el fondo hacia el tope del reactor. El líquido y el gas operan en forma continua y las partículas sólidas son suspendidas por el movimiento del líquido inducido por el gas.

Para conocer el flujo neto del sólido en el área transversal de la columna en una determinada posición, medida desde la boca de alimentación del reactor, partimos de la siguiente igualdad

$$\frac{d}{dz} [F_s(z)A_l(z)] = 0, \quad (1)$$

donde $F_s(z)$ es el flujo másico de sólido por unidad de área transversal de lodo, $A_l(z)$ es el área transversal de lodo (m^2) y z es la dirección axial en el reactor.

A continuación, se describe un bosquejo del modelo formulado por Hernández [3], donde utiliza la formulación desarrollada por D. R. Cova [2], para modelar el flujo $F_s(z)$ a fin de obtener la ecuación diferencial de orden 2 dada por:

$$\frac{d}{dz} \left[A(z)(1 - \epsilon_g(z))(C_s(z) \left(\frac{\bar{u}_{sl}^*(z)}{1 - \epsilon_g(z)} - \psi_l(z)u_t^*(z) \right) - E_s(z) \frac{d}{dz} C_s(z)) \right] = 0, \quad (2)$$

la cual puede ser resuelta directamente como un problema con las condiciones de frontera,

$$A(z)(1 - \epsilon_g(z))(C_s(z) \left(\frac{\bar{u}_{sl}^*(z)}{1 - \epsilon_g(z)} - \psi_l(z)u_t^*(z) \right) - E_s(z) \frac{d}{dz} C_s(z))|_{z=0} = M_s, \quad (3)$$

$$C_s(z)|_{z=L} = \gamma \cdot C_s^0, \quad (4)$$

donde $C_s(z)$ es la concentración de sólidos en el lodo dependiente de la posición z (m) en la columna ($\frac{kg}{m^3}$), $A(z)$ es la sección transversal de la columna (m^2), $\epsilon_g(z)$ es el *hold up* gaseoso, ϵ_l es el *hold up* líquido, $\bar{u}_{sl}^*(z)$ es la velocidad superficial del lodo basada en la sección transversal de la columna ($\frac{m}{s}$), $\psi_l(z)$ es la fracción volumétrica de líquido en el lodo, $u_t^*(z)$ es la velocidad de sedimentación referida a la sección transversal de la columna ($\frac{m}{s}$), $E_s(z)$ es el coeficiente de dispersión del sólido referido al lodo, M_s es el caudal másico de sólido, L es la altura total de la columna (m), C_s^0 es la concentración de sólido en la entrada de la columna (alimentación) ($\frac{kg}{m^3}$) y γ es un parámetro a ajustar.

El parámetro γ a ajustar en la condición de frontera, representa una relación de la concentración en la alimentación con concentración en el tope de la columna. Esta relación fue usada en [8]. Se hace este ajuste porque no hay forma exacta de conocer la concentración en el tope.

La soluciones de estos problemas requieren de expresiones que permitan calcular $\psi_l(z)$, $A(z)$, $\epsilon_g(z)$, $u_t^*(z)$ y $E_s(z)$, estas expresiones se describen a continuación. La fracción volumétrica de líquido en el lodo viene dada por

$$\psi_l(z) = 1 - \frac{C_s^0}{\rho_s} C_s(z). \quad (5)$$

Al sustituir esta expresión en la ecuación (2) se obtiene que la ecuación diferencial ordinaria no es lineal. El valor de $A(z)$ se calcula a partir de la geometría de la columna. Si la posición z entonces

$$A(z) = \begin{cases} A_0 \left(1 + \frac{z \tan \theta}{r_0} \right)^2 & \text{si } 0 \leq z \leq h_{cono}, \\ A_0 \left(\frac{r_{cil}}{r_0} \right)^2, & \text{si } h_{cono} \leq z \leq L, \end{cases} \quad (6)$$

donde r_0 es el radio de la entrada a la columna (m) y A_0 es el área de la sección transversal de la entrada a la columna (m^2), r_{cil} es el radio de la parte cilíndrica de la columna, θ ángulo del cono inferior de la columna.

La altura del cono viene dada por, $h_{cono} = (r_{cil} - r_0) \cot \theta$. El *hold up* gaseoso, ϵ_g , puede ser calculado a través de varias correlaciones publicadas en la literatura. Para este caso se siguió la elección de D. N. Smith y J. A. Ruether [8] quienes utilizaron la correlación de G. A. Hughmark [4]

$$\epsilon_g(z) = \left[2 + \left(\frac{0,35}{u_g(z)} \right) \left(\frac{\rho_l \cdot \sigma}{72} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1},$$

donde $u_g(z)$ es la velocidad superficial del gas $\left(\frac{m}{s}\right)$, σ es la tensión superficial $\left(\frac{kg}{s^2}\right)$.

La velocidad superficial del gas puede calcularse a partir del caudal molar de gas, Ω , mediante la fórmula

$$u_g(z) = \frac{\Omega RT}{A(z) [P_a + (L - z) g (\rho_l \epsilon_l + \rho_s \epsilon_s)]},$$

donde R es la constante universal de los gases, T es la temperatura absoluta (K), P_a es la presión atmosférica, ρ_s es la densidad del sólido $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$, g es la aceleración de la gravedad $\left(\frac{m}{s^2}\right)$, ϵ_s es el *hold up* sólido.

La velocidad de sedimentación referida a la sección transversal de la columna se puede obtener mediante la siguiente correlación (ver [8, 9]),

$$u_t^*(z) = \alpha_1 \cdot u_g(z)^{\alpha_2} \cdot u_{t_\infty}^{\alpha_3} \cdot \psi_l(z)^{\alpha_4}, \quad (7)$$

donde u_{t_∞} es la velocidad de sedimentación de una partícula en medio líquido puro, y α_1 , α_2 , α_3 y α_4 son los parámetros de la correlación. El coeficiente de dispersión axial, $E_s(z)$, se correlaciona de la forma (ver [9])

$$E_s(z) = \frac{u_g(z)D}{Pe_p(z)},$$

donde

$$Pe_p(z) = \beta_1 \left(\frac{Fr_g(z)^{\beta_2}}{Re_g(z)} \right)^{\beta_3} + \beta_4 Re_p(z)^{\beta_5}, \quad (8)$$

$$Re_g(z) = \frac{u_g(z)D\rho_l}{\mu_l}, \quad Fr_g(z) = \frac{u_g(z)}{(gD)^{\frac{1}{2}}}, \quad Re_p(z) = \frac{d_p\rho_l u_{t_\infty}}{\mu_l},$$

donde D es el diámetro de la columna (m), μ_l es la viscosidad $\left(\frac{kg}{m \cdot s}\right)$, Pe_p es el número de Peclet, Fr_g es número de Froude, Re_g es el número de Reynolds del gas, Re_p es el número de Reynolds de la partícula, β_i es el parámetros de la correlación ($i = 1, \dots, 5$).

Formulación del problema inverso

El modelo inverso de CBT desarrollado por J. Hernández [3], descrito en la sección anterior queda formulado como un problema de fronteras, dado por la ecuación diferencial ordinaria no lineal de orden 2 expresada por (2) y las condiciones de frontera dadas por (3) y (4), donde los parámetros que intervienen en las expresiones (4), (7) y (8) son desconocidos. Estos se determinan haciendo un ajuste de la solución de la ecuación diferencial (2) en función de datos experimentales. Estos datos se conforman de una cierta cantidad de experimentos, que dependen de las velocidades $u_g(z)$ y $\bar{u}_{s_l}^*(z)$ y la concentración en la alimentación del reactor C_s^0 , y consisten en mediciones de la concentración de sólidos a diferentes alturas del reactor (ver cuadro 1).

El ajuste del modelo CBT a los datos experimentales permitirá tener la correlación final para la distribución de sólidos en las columnas de burbujeo que constituyen los reactores del proceso HDH^1 .

¹ HDH es un proceso catalítico para la conversión de los residuos, provenientes de las destiladoras atmosféricas y de vacío, en productos de mayor valor comercial

Esto ayudará al mejoramiento de las herramientas del diseño de un reactor en dicho proceso. Los resultados de este trabajo se usarán para predecir el comportamiento en un reactor de tamaño comercial.

Denotemos al número de experimentos por n_{exp} y al número de muestras o mediciones que se realizan en el experimento j por m_j para $j = 1, \dots, n_{\text{exp}}$. Sean $(\tilde{f}_{1j}, \dots, \tilde{f}_{m_j j})$, el vector de mediciones realizadas para el experimento j para $j = 1, \dots, n_{\text{exp}}$, $x \in \mathbb{R}^{10}$ distribuidos a lo largo del reactor. Denotemos el vector de parámetros del modelo CBT dado por

$$x = (\alpha_1, \dots, \alpha_4, \beta_1, \dots, \beta_5, \gamma)^t = (x_1, \dots, x_{10})^t,$$

y el vector $(f_{1j}(x), \dots, f_{m_j j}(x))$ representa las concentraciones de sólidos obtenidas por el modelo en cada posición del reactor donde se realizó el experimento j . El propósito es minimizar la función

$$f(x) = \frac{1}{n_{\text{exp}}} \sum_{j=1}^{n_{\text{exp}}} \sum_{i=1}^{m_j} (f_{ij}(x) - \tilde{f}_{ij})^2, \quad (9)$$

que representa el promedio de las distancias entre los datos experimentales y los valores obtenidos al modelar la concentración. Por tal motivo, el objetivo es resolver el problema dado por

$$\min_{x \in \Lambda} f(x) \quad \text{con} \quad \Lambda = \prod_{i=1}^{10} [a_i, b_i]. \quad (10)$$

Obsérvese:

- Para $j = 1, \dots, n_{\text{exp}}$, al fijar los parámetros $x \in \Lambda$, el vector $(f_{1j}(x), \dots, f_{m_j j}(x))$, es la solución del modelo inverso de CBT formulado por el problema de fronteras ((2),(3),(4)) en los puntos z_1, \dots, z_{m_j} a lo largo del reactor. Es decir, para el experimento j , $f_{ij}(x) = C_s^x(z_i)$, donde $0 \leq z_1 \leq \dots \leq z_{m_j} \leq L$ son puntos a lo largo del reactor de altura L y C_s^x es la solución del problema de frontera que representa al modelo inverso CBT que se obtiene a fijar el parámetro x .
- La función objetivo $f(x)$ no se conoce explícitamente aunque se tenga la expresión (9), ya que para la evaluación de la función $f(x)$ se requiere resolver n_{exp} veces, la ecuación diferencial ordinaria no lineal de orden 2 (2) con las condiciones de frontera dadas por (3) y (4), lo cual el cálculo numérico y computacional es costoso.
- Es posible que se encuentre más de una solución $x \in \Lambda$ que satisfaga la condición (10). También podríamos estar en presencia de puntos donde $f'(x) = 0$, pudiendo haber un mínimo local o un punto silla de la función $f(x)$ en dicho punto.

Resumiendo lo anterior, estaríamos en presencia de un problema de optimización global donde la función objetivo no se conoce en forma explícita, y el cálculo de su valor en un punto puede ser costoso en términos de tiempo y de recursos de computación.

Sub-estimación lineal a trozos

En esta sección se describe el método numérico utilizado para resolver el problema inverso planteado, este es el algoritmo de linealización sucesiva (SLA) presentado por O. Mangasarian, J. Rosen y M. Thompson [6]. A continuación se hace una breve descripción de este algoritmo (ver [6] para obtener mas detalles) para luego adaptarlo al problema planteado.

El problema que estamos interesados en resolver es encontrar el mínimo global de una función $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, dados $x^1, x^2, \dots, x^m \in \mathbb{R}^n$ y los valores de la función f

$$f(x^k) = y^k, k = 1, \dots, m.$$

Mangasarian, J. Rosen y M. Thompson [6], encuentran una sub-estimación lineal a trozas de la función f resolviendo el problema

$$\begin{aligned} \min_{\alpha, c, A, b, s^k} \sum_{k=1}^m (y^k - (\alpha + c^t x^k + e^t |Ax^k + b|) + \epsilon e^t s^k) \\ \text{s.a.} \quad \alpha + c^t x^k + e^t s^k \leq y^k, \quad k = 1, \dots, m \\ -s^k \leq Ax^k + b \leq s^k, \quad k = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (11)$$

donde $\epsilon \in (0, \bar{\epsilon}]$ para algún $\bar{\epsilon} > 0$ y $s^k \in \mathbb{R}^\ell$, $k = 1, \dots, m$, y $e \in \mathbb{R}^\ell$ es un vector de unos.

Definiendo $\theta(z) = \sum_{k=1}^m (y^k - (\alpha + c^t x^k + e^t |Ax^k + b|) + \epsilon e^t s^k)$, y

$$Z = \left\{ z \in \mathbb{R}^{1+n+\ell n+\ell+\ell m} \mid \begin{array}{l} \alpha + c^t x^k + e^t s^k \leq y^k, \quad k = 1, \dots, m \\ -s^k \leq Ax^k + b \leq s^k, \quad k = 1, \dots, m \end{array} \right\},$$

entonces (11), se puede expresar como:

$$\min_{z \in Z} \theta(z). \quad (12)$$

Además, el subgradiente de $\theta(z)$ con respecto a z es dado por,

$$\partial\theta(z) = \sum_{k=1}^m - \left[\begin{array}{c} 1 \\ x^k \\ \partial|A_i x^k + b_i| x^k, \quad i = 1, 2, \dots, \ell \\ \partial|A_i x^k + b_i|, \quad i = 1, 2, \dots, \ell \\ -\frac{1}{m} \epsilon e \end{array} \right], \quad (13)$$

donde $e \in \mathbb{R}^{\ell m}$, para $i = 1, 2, \dots, \ell$ y $k = 1, 2, \dots, m$:

$$\partial|A_i x^k + b_i| = \left[\begin{array}{cccc} 1 & si & A_i x^k + b_i & > 0 \\ \in [-1, 1] & si & A_i x^k + b_i & = 0 \\ -1 & si & A_i x^k + b_i & < 0 \end{array} \right]. \quad (14)$$

Para resolver este problema, en [6] plantearon el algoritmo 1

Algoritmo 1 Algoritmo de linealización sucesiva (SLA) [6]

Punto inicial: $z^0 \in \mathbb{R}^{1+n+\ell n+\ell+\ell m}$, $k = 0$.

repeat

Obtener z^{k+1} como solución vértice del problema

$$\min_{z \in Z} \partial\theta(z^k)(z - z^k). \quad (15)$$

$k \leftarrow k + 1$

until $\partial\theta(z^k)(z^{k+1} - z^k) = 0$

Notemos que, para $z \in \mathbb{R}^{1+n+\ell n+\ell+\ell m}$,

$$z = \left(\alpha, \quad c^t, \quad A_1, \quad \dots, \quad A_\ell, \quad b^t, \quad s^{1t}, \quad \dots, \quad s^{mt} \right)^t, \quad (16)$$

donde $\alpha \in \mathbb{R}$, $c \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$ siendo $A_i = (a_{i1} \ a_{i2} \ \dots \ a_{in})$, su i -ésima fila, $b, s^i \in \mathbb{R}^\ell$ y ℓ es el número de funciones lineales que generan la sub-estimación lineal a trozos.

Notese que $z \in \mathbb{R}^{1+n+\ell n+\ell+\ell m}$ se puede expresar como, $z = (z_1, z_2, \dots, z_{1+n+\ell n+\ell+\ell m})^t$, donde cada componente está determinada de la siguiente forma:

$$z_{\bar{i}} = \begin{cases} \alpha & \text{si } \bar{i} = 1, \\ c_{\bar{i}-1} & \text{si } 2 \leq \bar{i} \leq n+1, \\ a_{ij} & \text{si } \bar{i} = in+j+1, \text{ con } 1 \leq i \leq \ell, 1 \leq j \leq n, \\ b_i & \text{si } \bar{i} = i+n(\ell+1)+1, \text{ con } 1 \leq i \leq \ell, \\ s_i^h & \text{si } \bar{i} = (n+1)(\ell+1) + (h-1)\ell+i, \text{ con } 1 \leq i \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \end{cases}$$

Denotemos $f_k(z) = (\partial\theta(z^k))^t z$, entonces en el Algoritmo (SLA) se tiene que:

$$\partial\theta(z^k)^t(z - z^k) = f_k(z) - f_k(z^k). \quad (17)$$

Además, $f_k(z)$ esta expresada por:

$$f_k(z) = -m\alpha - \left(\sum_{h=1}^m x^h \right)^t c - \sum_{i=1}^{\ell} \left(\sum_{h=1}^m \alpha |A_i^k x^h + b_i^k| x^h \right)^t A_i^t - \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{h=1}^m \alpha |A_i^k x^h + b_i^k| b^i + \epsilon \sum_{h=1}^m \sum_{i=1}^{\ell} s_i^h.$$

Por lo indicado anteriormente, la función $f_k(z)$ es lineal y esta se puede expresar como

$$f_k(z) = (p^k)^t z,$$

donde las componentes del vector p^k están dadas por:

$$p_i^k = \begin{cases} -m & \text{si } \bar{i} = 1, \\ -\sum_{h=1}^m x_{\bar{i}-1}^h & \text{si } 2 \leq \bar{i} \leq n+1, \\ -\sum_{h=1}^m \alpha |A_i^k x^h + b_i^k| x_j^h & \text{si } \bar{i} = in+j+1, \text{ con } 1 \leq i \leq \ell, 1 \leq j \leq n, \\ -\sum_{h=1}^m \alpha |A_i^k x^h + b_i^k| & \text{si } \bar{i} = i+n(\ell+1)+1, \text{ con } 1 \leq i \leq \ell, \\ \epsilon & \text{si } \bar{i} = (n+1)(\ell+1) + (h-1)\ell+i, \\ & \text{con } 1 \leq i \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \end{cases} \quad (18)$$

Como en cada iteración del algoritmo SLA minimiza en z a la función definida por (17) la cual es una función afín, por lo tanto es suficiente minimizar en cada iteración a la función $f_k(z)$. Así en la expresión (15) en el algoritmo 1 se puede expresar por:

$$\begin{aligned} \min \quad & f_{k-1}(z) = (p^{k-1})^t z \\ \text{s. a.} \quad & Hz \leq t \end{aligned} \quad (19)$$

donde el vector $t \in \mathbb{R}^{(m+2\ell m)}$, cuyas componentes están determinadas por:

$$t_{\bar{i}} = \left\{ \begin{array}{ll} y_{\bar{i}} & \text{si } \bar{i} = 1, \dots, m \\ 0 & \text{si } \bar{i} = (m+1), \dots, (m+2\ell m) \end{array} \right\} \quad (20)$$

y la matriz $H \in \mathbb{R}^{(m+2\ell m) \times (1+n+\ell n+\ell+\ell m)}$ donde sus componentes están definidas de la siguiente manera

$$h_{\bar{i}\bar{j}} = \begin{cases} 1 & \text{si } 1 \leq \bar{i} \leq m, \quad \bar{j} = 1, \\ x_{\bar{j}-1}^{\bar{i}} & \text{si } 1 \leq \bar{i} \leq m, \quad 2 \leq \bar{j} \leq n-1, \\ x_{\bar{j}}^h & \text{si } \begin{array}{l} \bar{i} = m + (h-1)\ell + i \quad \text{y} \quad \bar{j} = in + j + 1, \\ 1 \leq \bar{i} \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \quad 1 \leq j \leq n, \end{array} \\ -x_{\bar{j}}^h & \text{si } \begin{array}{l} \bar{i} = m + (m+h-1)\ell + i \quad \text{y} \quad \bar{j} = in + j + 1, \\ 1 \leq \bar{i} \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \quad 1 \leq j \leq n, \end{array} \\ 1 & \text{si } \begin{array}{l} \bar{i} = m + (h-1)\ell + i \quad \text{y} \quad \bar{j} = (\ell+1)n + i, \\ 1 \leq \bar{i} \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \end{array} \\ -1 & \text{si } \begin{array}{l} \bar{i} = m + (m+h-1)\ell + i \quad \text{y} \quad \bar{j} = (n+1)\ell + i + 1, \\ 1 \leq \bar{i} \leq \ell, 1 \leq h \leq m, \end{array} \\ -1 & \text{si } \begin{array}{l} \bar{i} = m + (h-1)\ell + i \quad \text{y} \quad \bar{j} = (n+1)(\ell+1) + (h-1)\ell + i, \\ 1 \leq \bar{i} \leq \ell, 1 \leq h \leq 2m, \end{array} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (21)$$

Por tal motivo el algoritmo 1 se puede reescribir de la siguiente manera

Algoritmo 2 Algoritmo SLA adaptado

Considerar un punto inicial $z_0 \in \mathbb{R}^{1+n+\ell n+\ell+\ell m}$, $l \in \mathbb{Z}_+$ y $\epsilon > 0$,

$k = 0$.

repeat

Calcular t y H mediante las expresiones (20) y (21) respectivamente,

Calcular p^k mediante la expresión (18),

Determinar z^k resolviendo el problema de programación lineal (19)

until $|f_{k-1}(z^k) - f_{k-1}(z^{k-1})| < TOL$

Así, se presenta un bosquejo del algoritmo que resuelve el problema inverso considerado en este trabajo:

Paso 1: Para $k = 1, \dots, m$ obtener $y^k = f(x^k)$. Esto se obtiene resolviendo m veces el problema de frontera que representa el modelo inverso CBT al fijar el parámetro x^k para evaluar la función (9).

Paso 2: Se determina la sub-estimación lineal a trozos para obtener el vector z aplicando el algoritmo 2, de donde se extraen los valores α , c , A y b que determinan la sub-estimación.

Paso 3: Se resuelve el problema programación lineal

$$\begin{aligned} \min \quad & \alpha + c^t x + e^t y \\ \text{s.a.} \quad & -y \leq Ax + b \leq y, \\ & x \in \Lambda, y \geq 0, \end{aligned} \quad (22)$$

donde α , c , A y b se obtienen del Paso 2 y $\Lambda = \prod_{i=1}^{10} [a_i, b_i]$, son las cotas inferior y superior conocidas del vector de parámetros x .

Obsérvese que la función objetivo presente en el Paso 3 es una función afín, por tal motivo es suficiente minimizar la función lineal $f = c^t x + e^t y$.

El punto x que se obtiene en el Paso 3, es la solución óptima del funcional (9), es decir, este va a representar los parámetros que ajustan al problema inverso CBT.

Resultados numéricos

Todas las corridas se hicieron en un computador Intel Core 2 Duo de 2.4 GHz con 2 GB de memoria RAM, en el lenguaje MATLAB R2008a para utilizar la librería que éste posee. El modelo inverso CBT considerado para aplicar la nueva metodología es el mismo modelo que consideró J. Hernández [3] en su trabajo, este está definido de la siguiente manera: $n_{\text{exp}} = 32$, para $j = 1, \dots, n_{\text{exp}}$ se considera $m_j = 13$, la altura del reactor es de $L = 1$ mts, $\Lambda = [2.0, 3.0] \times [0.05, 0.25] \times [0.1, 0.8] \times [1.1, 1.8] \times [5.0, 7.0] \times [7.0, 9.2] \times [0.05, 0.2] \times [0.003, 0.005] \times [1.0, 1.5] \times [1.5, 2.0]$ y los datos experimentales considerados son los mismos utilizados por Hernández estos fueron proporcionados en su momento por la empresa INTEVEP S. A. y fueron realizados en un reactor experimental en la Universidad Simón Bolívar. Estos datos experimentales están descritos en el cuadro (1).

En la metodología utilizada por J. Hernández [3], obtuvo como resultado que los parámetros x^* que mejor se ajustan al modelo CBT considerado son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= 2.34 & \beta_1 &= 6.44 & \gamma &= 1.923 \\
 \alpha_2 &= 0.05 & \beta_2 &= 9.061 \\
 \alpha_3 &= 0.751 & \beta_3 &= 0.149 \\
 \alpha_4 &= 1.142 & \beta_4 &= 0.0037 \\
 & & \beta_5 &= 1.145
 \end{aligned} \tag{23}$$

Estos valores son el punto de comparación de los resultados obtenidos con la metodología implementada.

Para la implementación de los programas, se consideró una distribución de 100 puntos en Λ , los resultados obtenidos se presentan en el Cuadro 2, donde la primera fila se indican los parámetros $x = (\alpha_1, \dots, \alpha_4, \beta_1, \dots, \beta_5, \gamma)$ obtenidos en cada corrida, seguido una aproximación valor del funcional ($\tilde{f}(x)$) en estos valores, el tiempo (*tiempo*) que se tardó en obtener la solución, el número de iteraciones (*Niter*) que se necesitaron para obtener la sub-estimación lineal a trozos y el error relativo de los resultados con respecto a la solución (23) obtenida por J. Hernández [3]. El punto inicial para obtener la sub-estimación y los subgradientes se generaron aleatoriamente.

Al observar los resultados obtenidos, hay que resaltar que el tiempo de CPU que se necesita para obtener la solución con la nueva metodología, en el peor de los casos fue de 218 minutos lo que equivale a 3.63 horas, lo cual es muy bueno en comparación con los resultados obtenidos por J. Hernández [3], (se utilizaban un tiempo promedio de CPU de 15 horas en la primera etapa y 5 horas en la segunda etapa). Es evidente que el tiempo de CPU consumido mejora, encontrando el sub-estimador lineal a trozos. Mientras más ajuste se le agregue a los parámetros l , ϵ y tol del método, este tiende a ajustar mejor la solución, pero aumenta el tiempo de CPU. Una ventaja del método es que no depende del valor inicial para obtener la sub-estimación.

Como el menor error relativo en los resultados obtenidos es de 0.0657, entonces los parámetros que mejor se ajustan a los datos experimentales con la nueva metodología son:

caso	u_g m/s	u_{sl} m/s	C_s^0 Kg/m ³	Alturas (m)															
				0.041	0.124	0.207	0.29	0.374	0.455	0.529	0.603	0.677	0.751	0.825	0.899	0.973			
1	0.0297	0.0040	48.	470.	446.	373.	300.	217.	171.	137.	129.	104.	103.	88.	79.	70.			
2	0.0572	0.0039	23.	178.	125.	119.	97.	71.	54.	63.	75.	52.	53.	50.	43.	41.			
3	0.0267	0.0020	74.	731.	741.	711.	630.	557.	504.	478.	418.	360.	325.	292.	207.	190.			
4	0.0583	0.0040	139.	666.	640.	673.	596.	527.	491.	443.	462.	446.	435.	398.	360.	341.			
5	0.0903	0.0050	148.	572.	606.	562.	499.	498.	419.	391.	368.	342.	324.	331.	291.	225.			
6	0.0943	0.0034	198.	674.	663.	630.	588.	527.	465.	466.	461.	443.	431.	394.	395.	371.			
7	0.1646	0.0019	111.	685.	650.	539.	462.	470.	409.	396.	381.	347.	328.	312.	267.	275.			
8	0.1581	0.0038	215.	618.	635.	597.	551.	549.	450.	427.	402.	402.	392.	380.	333.	309.			
9	0.0569	0.0040	68.	317.	258.	216.	193.	171.	146.	140.	132.	126.	124.	116.	112.	106.			
10	0.0970	0.0028	62.	425.	350.	255.	240.	193.	160.	164.	156.	147.	130.	125.	124.	109.			
11	0.1593	0.0040	19.	165.	109.	103.	78.	70.	66.	50.	48.	57.	46.	43.	36.	34.			
12	0.1571	0.0041	36.	195.	143.	130.	142.	137.	96.	87.	92.	92.	72.	77.	73.	70.			
13	0.1607	0.0040	61.	387.	332.	258.	228.	248.	154.	146.	144.	149.	131.	129.	121.	115.			
14	0.0149	0.0023	35.	633.	652.	582.	461.	354.	253.	157.	111.	85.	77.	58.	59.	52.			
15	0.0139	0.0048	36.	498.	624.	618.	518.	410.	353.	207.	106.	78.	59.	59.	50.	49.			
16	0.0269	0.0039	46.	544.	547.	502.	386.	295.	261.	220.	183.	165.	142.	107.	97.	87.			
17	0.0574	0.0035	48.	544.	474.	394.	348.	287.	261.	236.	210.	217.	182.	164.	170.	135.			
18	0.0569	0.0040	108.	552.	507.	454.	371.	332.	296.	264.	250.	237.	222.	195.	188.	186.			
19	0.0930	0.0038	80.	409.	427.	373.	347.	279.	225.	222.	208.	200.	188.	172.	167.	161.			
20	0.1710	0.0016	70.	482.	385.	313.	296.	266.	222.	204.	202.	190.	178.	170.	164.	155.			
21	0.0140	0.0041	65.	651.	812.	900.	911.	800.	758.	755.	745.	734.	734.	703.	700.	661.			
22	0.0328	0.0039	143.	834.	874.	853.	807.	743.	696.	687.	675.	679.	646.	633.	596.	533.			
23	0.0266	0.0038	248.	812.	880.	897.	846.	824.	787.	759.	736.	742.	697.	688.	667.	634.			
24	0.0962	0.0037	509.	813.	833.	801.	790.	736.	687.	702.	651.	659.	627.	643.	624.	592.			
25	0.0974	0.0014	326.	825.	851.	831.	804.	782.	700.	720.	687.	638.	646.	629.	597.	631.			
26	0.1525	0.0033	290.	786.	807.	772.	713.	697.	643.	633.	612.	612.	607.	575.	543.	530.			
27	0.0140	0.0040	12.	395.	303.	189.	148.	87.	70.	62.	57.	46.	41.	41.	33.	35.			
28	0.0145	0.0046	37.	391.	410.	349.	251.	167.	152.	116.	95.	79.	71.	62.	42.	49.			
29	0.0148	0.0044	37.	447.	472.	418.	304.	227.	194.	147.	118.	98.	77.	61.	58.	59.			
30	0.0274	0.0037	18.	203.	136.	116.	88.	71.	47.	48.	45.	40.	36.	32.	38.	33.			
31	0.0272	0.0021	23.	262.	180.	118.	113.	57.	55.	53.	45.	47.	49.	42.	42.	41.			
32	0.0281	0.0044	61.	439.	373.	334.	263.	188.	164.	143.	125.	124.	109.	106.	88.	81.			

Cuadro 1: Datos experimentales utilizados en el ajuste de los parámetros

$l =$	30	30	30	45	50	50	50	50
$\epsilon =$	10^{-5}	10^{-10}	10^{-5}	10^{-10}	10^{-5}	10^{-8}	10^{-5}	10^{-10}
$tol =$	10^{-5}	10^{-10}	10^{-10}	10^{-10}	10^{-5}	10^{-8}	10^{-10}	10^{-5}
α_1	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00
α_2	0.05	0.05	0.25	0.05	0.25	0.05	0.25	0.25
α_3	0.80	0.80	0.80	0.80	0.80	0.80	0.80	0.793
α_4	1.80	1.80	1.80	1.10	1.10	1.5284	1.2084	1.10
β_1	7.00	7.00	7.00	7.00	7.00	7.00	7.00	7.00
β_2	9.20	9.20	9.20	9.20	9.2	9.20	9.20	9.20
β_3	0.1967	0.1010	0.1069	0.1950	0.20	0.1413	0.164	0.20
β_4	0.0030	0.0045	0.0050	0.0049	0.0030	0.0030	0.0030	0.0050
β_5	1.00	1.00	1.50	1.50	1.50	1.3396	1.50	1.3871
γ	1.50	1.5094	2.00	2.00	2.00	1.7607	2.00	1.50
$\tilde{f}(x)$	510.46	543.25	558.49	524.67	548.82	505.10	542.67	507.58
<i>tiempo</i> (min)	57.18	144.59	110.45	288.07	116.44	197.98	117.62	218.14
<i>Niter</i>	18	52	25	55	11	29	14	20
$\frac{\ x-x^*\ }{\ x^*\ }$	0.0894	0.0891	0.0882	0.0657	0.0679	0.0699	0.0679	0.0734

Cuadro 2: Aplicado a una distribución de 100 puntos en Λ

$$\alpha_1 = 2.00 \quad \beta_1 = 7.00 \quad \gamma = 2.00$$

$$\alpha_2 = 0.05 \quad \beta_2 = 9.20$$

$$\alpha_3 = 0.80 \quad \beta_3 = 0.1950$$

$$\alpha_4 = 1.10 \quad \beta_4 = 0.0049$$

$$\beta_5 = 1.5$$

Conclusiones

Se propone una metodología, que consiste en la implantación de un método de optimización global, eficiente para ajustar los parámetros desconocidos en el modelo de la concentración de sólidos en columnas de burbujeo trifásicas. Además mejora el tiempo de CPU que se necesita para obtener el resultado. Hay que destacar que el algoritmo implementado no depende del valor inicial para obtener la solución, esto significa que la convergencia es global.

Como las implementaciones se hicieron con el software MATLAB, se presentaron limitaciones al momento de aumentar la cantidad de puntos considerados en la region Λ del problema y al hacer un mayor ajuste en l debido a que se presentaba un problema en la memoria en el software.

Es evidente que ajustando los parámetros en el algoritmo la solución obtenida, se aproximaría mejor a la solución óptima (23) del problema y al hacer mayor ajuste en los parámetros en el algoritmo trae como consecuencia, que se utiliza mayor tiempo de CPU para obtener la solución como se evidencia en los resultados obtenidos.

Cabe destacar que existe la posibilidad que el modelo de la concentración considerada no represente, de la manera más precisa, el problema físico, para verificar esto sería necesario realizar un estudio más a fondo sobre el modelo del problema y verificar la confiabilidad de los datos experimentales. Sin embargo, verificar esta posibilidad no es parte de este trabajo.

Referencias

- [1] S. Buitrago, G. Gedler, & E. Rodriguez, (1994) Determining the optimum location of a production well in oil reservoirs, 4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery. Topic E: History Match and Recovery Optimization. (Roros, Noruega).
- [2] D. R. Cova, (1996) Catalyst suspension in gas-agitated tubular reactor, *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.* 5, no. 1, 20-25.
- [3] J. Hernandez, (1997) Métodos numéricos en el modelado de columnas de burbujeo trifásicas, Masters thesis, Universidad Simon Bolívar.
- [4] G. A. Hughmark, (1967) Holdup and mass transferring bubble columns, *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.* 6, 218-220.
- [5] R. H. Jean, W. T. Tang, and L. S. Fan, (1989) The sedimentation-dispersion model for slurry bubble columns, *AIChE J.* 35, no. 4, 662- 665.
- [6] O. L. Mangasarian, J. B. Rosen, and M. E. Thompson, (2004) Global optimization via piecewise-linear underestimation., *Journal of Global Optimization* 32, 1-9.
- [7] J. A. Nelder and R. Mead, (1965) A simplex method for function minimization, *Computer Journal* 7, 308-313.
- [8] D. N. Smith and Ruether J. A., (1985) Dispersed solid dynamics in a slurry bubble column, *Chemical Engineering Science* 40, no. 5, 741-754.
- [9] D. N. Smith, J. A. Ruether, T. Shah, and M. N. Badgular, (1986) Modified sedimentation - dispersion model for solids in a three phase slurry column, *AIChE J.* 32, 426-436.