

Fascículo

8

Cursos y  
seminarios  
de  
matemática

**Serie B**

ISSN 1851-149X

*Javier Etcheverry*

*Ignacio Ojea*

*(Editores)*

**TAMI 2012**

Taller de Matemática Industrial

**Departamento de Matemática**

**Facultad de Ciencias Exactas y Naturales**

**Universidad de Buenos Aires**

**2014**

# Cursos y Seminarios de Matemática – Serie B

## Fascículo 8

### Comité Editorial:

Carlos Cabrelli (Director)  
Departamento de Matemática, FCEyN, Universidad de Buenos Aires  
E-mail: [cabrelli@dm.uba.ar](mailto:cabrelli@dm.uba.ar)

Gabriela Jerónimo  
Departamento de Matemática, FCEyN, Universidad de Buenos Aires  
E-mail: [jeronimo@dm.uba.ar](mailto:jeronimo@dm.uba.ar)

Claudia Lederman  
Departamento de Matemática, FCEyN, Universidad de Buenos Aires  
E-mail: [clerderma@dm.uba.ar](mailto:clerderma@dm.uba.ar)

Leandro Vendramin  
Departamento de Matemática, FCEyN, Universidad de Buenos Aires.  
E-mail: [lvendramin@dm.uba.ar](mailto:lvendramin@dm.uba.ar)

ISSN 1851-149X (Versión Electrónica)

ISSN 1851-1481 (Versión Impresa)

Derechos reservados

© 2014 Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,

Universidad de Buenos Aires.  
Departamento de Matemática  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Universidad de Buenos Aires  
Ciudad Universitaria – Pabellón I  
(1428) Ciudad de Buenos Aires  
Argentina.

<http://www.dm.uba.ar>

e-mail. [secre@dm.uba.ar](mailto:secre@dm.uba.ar)

tel/fax: (+54-11)-4576-3335

# Matemática Industrial

## SEGUNDO TALLER DE MATEMÁTICA INDUSTRIAL

II TAMI 2012

Buenos Aires, 30 de Julio - 4 de Agosto de 2012

**Editores**

Javier Etcheverry

Ignacio Ojea



# Segundo Taller de Matemática Industrial

## Instituciones Organizadoras

Departamento de Matemática, FCEN, Universidad de Buenos Aires, Argentina.  
ASAMACI - Asociación Argentina de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial.  
AR-SIAM - Sección Argentina de SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics - EE.UU.

## Comité Organizador:

Gabriel Acosta, FCEN-UBA, CONICET. Buenos Aires.  
Liliana Castro, UNS, Bahía Blanca  
Javier Etcheverry, Tenaris-Siderca REDE-AR y FCEN-UBA.  
Fernando Reitich, UMN-USA.  
Rubén Spies, IMAL (CONICET – UNL), Santa Fe.  
Domingo Tarzia, CONICET – UA, Rosario.  
Cristina Turner, CONICET – UNC, Córdoba.  
Miguel Virasoro, UNGS, Buenos Aires.  
Adrián Will, UNT, Tucumán.

## Comité Local:

Gabriel Acosta, FCEN-UBA, CONICET. Buenos Aires.  
Javier Etcheverry, Tenaris-Siderca REDE-AR y FCEN-UBA.  
Manuel Maurette, FCEN-UBA. Buenos Aires.  
Ignacio Ojea, FCEN-UBA. Buenos Aires.  
Mariana Prieto, FCEN-UBA - CONICET. Buenos Aires.  
Constanza Sánchez de la Vega, FCEN-UBA. Buenos Aires.

Hicieron posible el II TAMI 2012:





## Prólogo

El Taller de Matemática Industrial, TAMI, nació de la necesidad de articular el mundo académico y en particular las facultades de Ciencias Exactas, con los desafíos y las necesidades de la industria. Por ejemplo, interesa mostrar a los estudiantes y graduados cómo es el trabajo fuera del mundo académico, asegurarles contacto con posibles aplicaciones de sus conocimientos y una comprensión de las múltiples dimensiones en juego en su aplicación a la industria. También, conectar a los industriales con las capacidades de los graduados de las carreras de Exactas, físicos, matemáticos, etc., y vincularlos con estudiantes y graduados, y con un núcleo de docentes de la Facultad que puedan servirles de puente en caso necesario. El formato elegido para esto fue el de un Taller donde los industriales proponen problemas y trabajan por una semana codo a codo con estudiantes y graduados, auxiliados por los organizadores, en estudiar, entender, acotar y resolver dichos problemas. Las ventajas de esta idea, que tiene una larga historia en países del primer mundo, pero sigue siendo pionera en Latinoamérica, son que promueve el contacto directo entre industriales y estudiantes y graduados, el conocimiento recíproco, el trabajo en equipo necesario para atacar la complejidad de los problemas reales, el desarrollo de la confianza en las propias herramientas y la capacidad de diálogo para articularlas en un proyecto común, el descubrimiento por parte de los industriales del talento y capacidad de los estudiantes, etc.

El II TAMI 2012 se llevó a cabo del 30 de Julio al 4 de Agosto de 2012, en el Departamento de Matemática de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires. Se presentaron siete problemas industriales, respaldados por la presencia constante a lo largo del taller de representantes de cada industria (YPF, Siderar, Siemens, Wintershall Energía, Apply Physics y el Instituto Nacional de Tecnología Industrial INTI). Los siete temas propuestos abarcaron una temática muy variada, desde el análisis de procesos (YPF), el estudio de problemas en un laminador de hojalata (Siderar), el estañado electrolítico de chapa (Siderar), la interpolación de datos geofísicos (Wintershall), un problema de scheduling para la asignación de tareas (Siemens), el estudio de resonancias para determinar la integridad de los cojinetes de motores (Apply Physics) y el diseño del acoplamiento de impedancias para transductores de ultrasonido (INTI).

Desde el lado estudiantil, participaron 50 estudiantes y graduados, la mayoría de las carreras de Matemática y Física de la FCEN, UBA, y también de la Universidad Nacional del Sur, de la Universidad Nacional del Tucumán, del Instituto Balseiro, del ITBA y de la Facultad de Ingeniería de la UBA.

La discusión en todos los grupos fue muy exitosa, con recomendaciones e ideas que tendrán sin dudas un impacto significativo en las industrias proponentes, generando un gran entusiasmo tanto en los participantes industriales como en los estudiantes y graduados de la Universidad, contribuyendo así a generar un vínculo tan necesario en nuestro país. Una clara visión del nivel de los resultados alcanzados se obtiene de la lectura de los reportes de avance contenidos en esta publicación, que no obstante el estilo algo desestructurado lógico de un reporte de actividad del trabajo de una semana, muestra el alcance de la comprensión del problema y de las recomendaciones en cada caso. Quisiéramos agradecer a los organismos y empresas que apoyaron la realización de este Taller (Dto. Matemática e Instituto de Cálculo, FCEN, UBA, Agencia de Promoción Científica y Tecnológica, ASAMACI, YPF, Tenaris) y expresar nuestras felicitaciones a todos los participantes por un muy exitoso Taller. Personalmente, deseo también reconocer la invaluable ayuda del comité organizador local (Gabriel Acosta, Manuel Maurette, Ignacio Ojea, Mariana Prieto y Constanza Sánchez de la Vega) que supo facilitar todos los aspectos prácticos del Taller.

Javier Etcheverry  
Comité Organizador  
II TAMI 2012



## Prólogo de ASAMACI

La Asociación Argentina de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (ASAMACI) fue creada en la ciudad de Santa Fe el 31 de octubre de 2008 por 65 asociados fundadores y obtuvo su personería jurídica el 19 de mayo de 2009 como una asociación civil sin fines de lucro. Su antecedente previo, en Argentina, fue AR-SIAM, la Sección Argentina de la Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, EE.UU.), creada en julio de 2006.

Entre los objetivos de ASAMACI se encuentran, entre otros, los siguientes:

- Procurar una mayor sensibilización y conciencia en y de la comunidad científica, la Administración del Estado, el sector Industrial, las empresas, organizaciones y de la sociedad en general respecto de la importancia de la Matemática Aplicada;
- Proveer un foro y un ámbito adecuados para la discusión y el desarrollo de la Matemática Aplicada en el país;
- Promover aplicaciones de la matemática en las Ciencias, la Ingeniería, las Empresas, la Industria y la Tecnología;
- Promover el acercamiento de todos los actores señalados, fomentando propuestas que conduzcan a la consolidación de las colaboraciones existentes y facilitando la iniciación de otras;
- Promover la investigación básica y la educación en Matemática cuyos resultados conduzcan a aplicaciones concretas, procurando su transferencia al medio;
- Promover la investigación interdisciplinaria con las diferentes disciplinas de la Ciencias y la Ingeniería en áreas y sectores que involucren a la Matemática, priorizando su interés. A tal fin ASAMACI estimula y realiza estudios e investigaciones de carácter científico, técnico y económico en todo lo relativo a la especialidad, con el propósito de incrementar el nivel y conocimiento de la labor que cumplen sus asociados;
- Participar y organizar congresos, ciclos, reuniones, conferencias, seminarios y otros eventos similares, sean nacionales o internacionales que se celebren con relación a los temas afines con la Matemática Aplicada, Computacional e Industrial.

Estamos plenamente convencidos de que en una industria crecientemente tecnificada la Matemática constituye una herramienta cada vez más importante, que tiene un impacto decisivo en el control y mejoramiento de los procesos productivos, en el control de calidad, en la creación de nuevas alternativas de procesamiento, en la disminución de los costos, en la racionalización de los sistemas de distribución, etc. Por todo ello, y en cumplimiento de los objetivos previamente enunciados, es que ASAMACI decidió apoyar incondicionalmente la iniciativa del Dr. Javier Etcheverry, surgida en el año 2008, de la organización del Primer Taller de Matemática Industrial (TAMI 2010) que se desarrolló en las instalaciones de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires durante la semana del 1 al 6 de marzo de 2010 y posteriormente del presente Segundo Taller de Matemática Industrial (II TAMI 2012) que se desarrolló en el mismo lugar físico durante la semana del 30 de julio al 4 de agosto de 2012. Dichas actividades son de gran importancia para el desarrollo industrial del país.

ASAMACI agradece profundamente a las empresas e instituciones que participaron del Segundo Taller a través de la presentación de los problemas industriales a resolver (APPLY PHYSICS, INTI, SIDERAR, SIEMENS, WINTERSHALL e YPF), al Departamento de Matemática de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires por el apoyo

---

brindado y de modo muy especial a Javier Etcheverry y Gabriel Acosta y a todos sus colegas por la excelente organización local de este Segundo Taller de Matemática Industrial en la Ciudad Autónoma de Buenos Aires.

Domingo A. Tarzia  
Presidente de ASAMACI,  
Rubén D. Spies  
Vicepresidente 1° de ASAMACI.

# Índice

<b>Monitoreo de desgaste de rodamientos por análisis de vibraciones (APPLY PHYSICS)</b>	<b>1</b>	
1	Introducción . . . . .	1
2	Objetivos . . . . .	1
3	Modelo . . . . .	1
4	Análisis . . . . .	2
5	Resultados . . . . .	3
6	Conclusiones . . . . .	4
7	Trabajo Futuro . . . . .	4
<b>Adaptación de la impedancia eléctrica de un transductor de ultrasonido piezoeléctrico (INTI)</b>	<b>5</b>	
1	Introducción . . . . .	5
2	Planteo del problema . . . . .	6
3	Formulación matemática . . . . .	7
4	Un primer intento de solución . . . . .	8
5	Un segundo intento de solución . . . . .	8
6	Complementos . . . . .	9
7	Resultados y conclusiones . . . . .	9
<b>Chattering en el laminador de hojalata (SIDERAR)</b>	<b>11</b>	
1	El problema . . . . .	11
2	Primeros Pasos . . . . .	12
3	Paso de la soldadura como fuente de información . . . . .	13
4	Correlaciones de la frecuencia de amortiguación . . . . .	15
5	Laminación de soldaduras y casos de trepidación . . . . .	15
6	Análisis de Fourier en ventanas de tiempo . . . . .	16
7	Estudio de mecanismos de vibración . . . . .	16
7.1	Mecanismo de realimentación de vibraciones de un stand . . . . .	17
8	Conclusiones y propuestas . . . . .	18
8.1	Frecuencia de amortiguación de oscilaciones de los stands . . . . .	18
8.2	Facetado de los cilindros . . . . .	19
8.3	Teoría de la realimentación de las vibraciones . . . . .	19
<b>Modelo fluidodinámico y corriente límite en cuba de Estañado Electrolítico de bobinas (SIDERAR)</b>	<b>21</b>	
1	Resumen del problema . . . . .	21
2	Introducción . . . . .	21
3	Modelo fluidodinámico . . . . .	23

3.1	Estructura del flujo turbulento . . . . .	25
3.2	Aplicación de los diferentes modelos matemáticos . . . . .	25
3.3	Cálculo aproximado del esfuerzo de la pared . . . . .	26
3.4	Aplicación del modelo de Couette al caso de la cuba de estañado electrolítico . . . . .	27
4	Resultados . . . . .	27
5	Transferencia de iones de $Sn^{2+}$ del seno de la cuba a la chapa. . . . .	28
5.1	Modelo de capa límite de concentración. . . . .	28
5.2	Dependencia de la corriente límite con la temperatura y la velocidad de la chapa. . . . .	30
6	Resultados . . . . .	30
7	Sugerencias para la mejora del control del proceso . . . . .	30

**Metodología para la optimización en la planificación de asignación de tareas a recursos (SIEMENS) 33**

1	Introducción . . . . .	33
1.1	El Problema: . . . . .	34
2	Objetivos . . . . .	36
3	Trabajo Realizado . . . . .	36
3.1	Planteo teórico del problema: . . . . .	36
3.2	Restricciones: . . . . .	37
3.3	Función objetivo: . . . . .	39
3.4	Tiempo de Ejecución y Uso de Memoria . . . . .	40
3.5	Postprocesamiento . . . . .	41
4	Resultados . . . . .	41
5	Conclusiones . . . . .	42
6	Trabajo Futuro . . . . .	43

**Mapeo automático y generación de mapas a partir de información de pozos petroleros (WINTERSHALL) 45**

1	Introducción . . . . .	45
1.1	Mapeo Automático . . . . .	45
1.2	Exploración Petrolera y Geometría Computacional . . . . .	47
1.3	Marco Geológico . . . . .	48
2	Objetivos . . . . .	49
2.1	El Problema del Mapeo . . . . .	50
2.2	El Problema de la detección de una falla geológica . . . . .	50
3	Trabajo realizado . . . . .	50
3.1	Mapeo a partir de muestras dispersas . . . . .	50
3.2	Búsqueda de la falla . . . . .	53
4	Resultados . . . . .	59
4.1	Mapeo . . . . .	59
4.2	Detección de fallas geológicas . . . . .	59
5	Conclusiones . . . . .	66
6	Trabajo Futuro . . . . .	66
7	Agradecimientos . . . . .	66

---

<b>Optimización de métodos de detección y diagnóstico de fallas en la industria petroquímica (YPF)</b>		<b>69</b>
1	Descripción del problema . . . . .	69
2	Soluciones Presentadas . . . . .	73
2.1	Branch and Bound . . . . .	73
2.2	Diagonal Dominancia . . . . .	74
2.3	Cota del Determinante . . . . .	75
3	Otros métodos propuestos . . . . .	76
3.1	Métodos para reducir matrices relacionadas a grafos a forma de bloques . . . . .	76
3.2	Eliminación de variables excesivamente correlacionadas . . . . .	76
3.3	Otros métodos algebraicos . . . . .	77
3.4	Cálculo del autovalor más chico de la matriz de correlación en lugar de PCA . . . . .	77



# Monitoreo de desgaste de rodamientos por análisis de vibraciones

APPLY PHYSICS

**Responsables:** Luis Montenegro, Diego Helguera, César Senar, APPLY PHYSICS

**Participantes:** Mariano Barraco<sup>†</sup> y Mauro Lioy<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

## 1 Introducción

Un rodamiento es un elemento mecánico diseñado para reducir la fricción entre un eje y las piezas conectadas al mismo por medio de rodadura, por ejemplo podemos pensar en los rulemanes de las masas de una bicicleta.

Su uso se halla difundido en una enorme cantidad de dispositivos industriales, tales como cintas transportadoras, volantes, tornos, etc. Si se piensa en la función de estos dispositivos se puede deducir que cualquier defecto en la constitución de los mismos puede redundar en una pérdida de calidad en la línea de producción, sobre todo cuando se trata de equipos a los que se les pide cierto grado de precisión,

Es por esto que conocer el estado de las rodaduras presentes en instalaciones industriales es importante para la prevención de fallas en los productos y de posibles desperfectos y accidentes.

La inspección directa de rodamientos implica desmontar la máquina en cuestión, con la consiguiente pérdida de tiempo de trabajo, se desprende entonces que tener un método de medición “no invasivo” del estado de las piezas redundará en ahorro de tiempo y dinero.

En *Apply Physics* se trabaja con equipos que permiten analizar el estado de los rodamientos de una máquina mediante la medición de las vibraciones producidas por el funcionamiento de la misma. La medición y el procesamiento de datos se realizan con el mismo equipo y es éste quien emite un informe sobre el estado general del rodamiento.

Los resultados del trabajo mediante los equipos que posee la empresa permiten detectar fallas y advertir cuando existen anomalías en el régimen oscilatorio de la máquina estudiada. Pero estos equipos no dan información sobre la estructura del defecto.

## 2 Objetivos

El objetivo será entonces encontrar una forma de describir el estado de un rodamiento conociendo solamente las vibraciones presentes en la máquina en la cual se halla instalado.

Pensaremos al rodamiento fallado como una fuente de excitación que actúa sobre la máquina en la cual está instalado que será entendida como un sistema oscilante.

Con esto en mente el análisis lo realizaremos utilizando el modelo del Oscilador Armónico forzado y con disipación.

## 3 Modelo

Uno de los modelos matemáticos fundamentales en la física moderna es el *Oscilador Armónico*. Es apropiado llamarlo fundamental pues tiene un uso que se extiende desde la Mecánica clásica

hasta la cuántica, pasando por el Electromagnetismo y la Teoría de campos.

Supongamos que tenemos un cuerpo puntual y de masa  $m$  adherido a un resorte con el otro extremo fijo. Estará inmerso en un medio disipativo y será excitado con una fuerza cuya intensidad varíe sinusoidalmente en el tiempo. El carácter restitutivo de la fuerza efectuada por el resorte otorga al sistema la capacidad de efectuar un movimiento oscilatorio.

Proponemos las siguientes ecuaciones que modelan la situación, obtenidas a partir de la Segunda ley de Newton <sup>1</sup>:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \tilde{\sigma} \frac{dx}{dt} + kx = C_0 \text{sen}(\Omega t) \quad (1a)$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \sigma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{C_0}{m} \text{sen}(\Omega t) \quad (1b)$$

En la primer ecuación el primer término es el producto de la masa por la aceleración,  $\tilde{\sigma}$  es el coeficiente de disipación del medio y es multiplicado por la velocidad y  $k$  es la constante del resorte, es decir el número que caracteriza la fuerza restititiva que éste ejerce sobre la masa. Definimos el cociente  $\frac{k}{m} \equiv \omega_0^2$ , como veremos más adelante,  $\omega_0$  es la frecuencia de oscilación característica del sistema.

Podemos pensar también en una excitación periódica resultado de la suma de diversas componentes armónicas, con lo cual el modelo tomaría la siguiente forma:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \sigma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{C_n}{m} e^{in\Omega_0 t} \quad (2)$$

Proponemos una solución de la forma

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{in\Omega_0 t} \quad (3)$$

Si reemplazamos  $x(t)$  en (2) encontramos que los  $A_n$  deberían ser:

$$A_n = \frac{C_n}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - (n\Omega_0)^2 + i\sigma n\Omega_0} \quad (4)$$

Hasta aquí hemos definido un sistema físico y un conjunto de ecuaciones que lo modelan. Encontramos una expresión funcional para el movimiento debido a una excitación externa al sistema, periódica en el tiempo.

## 4 Análisis

Consideraremos un sistema donde la máquina aporta la masa inercial y el coeficiente de disipación, mientras que el rodamiento defectuoso jugará de forzante.

Si existiera una falla en alguna de las superficies de las jaulas del rulemán tendría sentido suponer que el funcionamiento rotatorio del mismo resultará en una excitación periódica en el tiempo, por ello tiene sentido considerar un forzante con periodicidad temporal. Más aún, nuestra idea es encontrar una forma de caracterizar el defecto.

Para ello simulamos la transferencia a través de un sistema resonante como el descrito en la sección anterior de un par de señales: un pulso cuadrado y uno *diente de sierra*.

<sup>1</sup> $F = m \cdot a$  (F: fuerza, m: masa y a: aceleración)

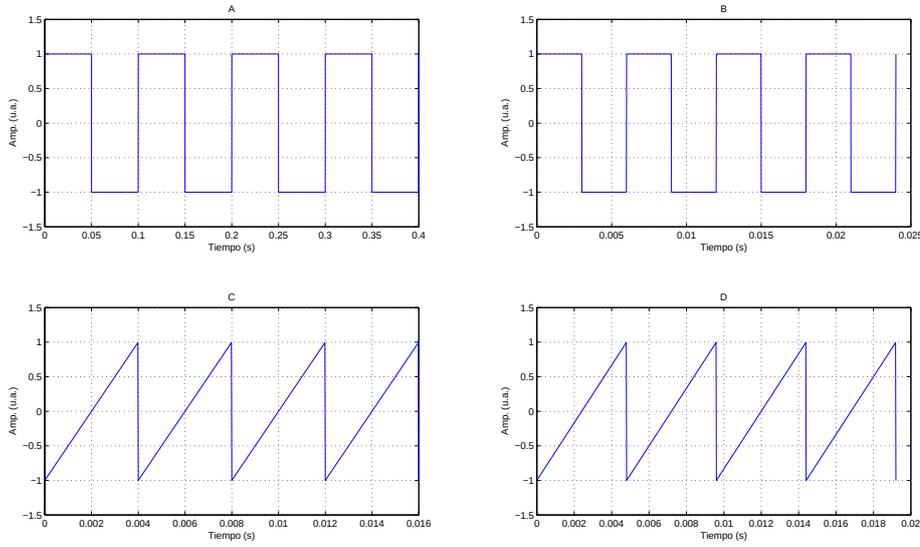


Figura 1: Pulsos cuadrado y diente de sierra utilizados.

Calculamos la Transformada de Fourier (discreta) de cada una de esas señales y la modulamos con una función transferencia como la propuesta en la ecuación (4).

La frecuencia de resonancia del sistema simulado fue fijada en 2387,32 Hz, lo cual nos da un  $\Omega_0 = 1500$ . El factor  $\sigma$  y las amplitudes de las señales fueron elegidos arbitrariamente.

Localizamos los picos de la señal modulada en la zona cercana a la resonancia ( $\Omega_0$ , ver figura), generando con ellos un nuevo conjunto de datos.

El siguiente paso fue ajustar estos picos mediante el mismo modelo que usamos para generarlos, proponiendo:  $C_n = \frac{C_0}{n^\alpha}$ . De esta forma los parámetros de ajuste fueron  $C_0$ ,  $\alpha$ ,  $\Omega_0$  y  $\sigma$ .

Utilizamos el método de optimización no lineal sin restricciones mediante la función de MATLAB *fminsearch*.

## 5 Resultados

En la tabla siguiente se muestran los resultados de los parámetros  $\alpha$  y  $\Omega_0$  ajustados para cuatro señales. En estos casos los resultados fueron satisfactorios: recuperamos los valores de  $\alpha$  y de  $\Omega_0$  con un error entre el 2% y el 6 %.

Es interesante observar que el valor encontrado para  $\alpha$  (en todos los casos cercano a 1) nos dice que los coeficientes de las componentes armónicas de las señales trabajadas decrecen en forma inversamente proporcional al número de armónico en cuestión, lo cual es cierto para el caso del pulso *cuadrado* y el pulso *diente de sierra*.

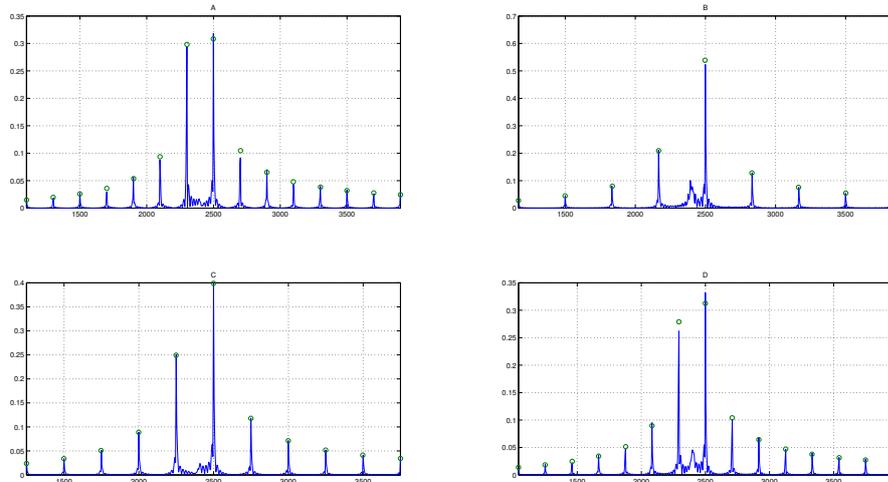


Figura 2: Localización de picos alrededor de la frecuencia de resonancia del sistema. Cada figura corresponde cada una de las señales mostradas en la figura anterior.

Parámetro	Pulso cuadrado ( $T = 0.01s$ )	Pulso cuadrado ( $T = 0.006s$ )	Pulso sierra ( $T = 0.004s$ )	Pulso sierra ( $T = 0.0048s$ )
$\Omega_0$	15094.04	15076.72	15078.70	15120.29
$\alpha$	1.03	1.06	1.06	1.04

Table 1: Resultados del ajuste

## 6 Conclusiones

Si bien el alcance de nuestro análisis presenta claras limitaciones, presentamos una idea sobre cómo obtener información sobre el tipo de falla que afecta a un rodamiento, pues conseguimos ajustar la forma de los coeficientes armónicos con aceptable precisión. Claro que esto es sólo una simulación, mas prepara el terreno para un procesamiento de datos reales a realizarse en un futuro.

En esa dirección el paso siguiente es estudiar la validez de este modelo para señales adquiridas en un entorno real.

## 7 Trabajo Futuro

El trabajo futuro debiera ser la validación del análisis con datos empíricos. Será importante entender si aceptable caracterizar una máquina con un rodamiento fallado como un oscilador armónico forzado. También se deberá probar cuán adecuado es el proceso de ajuste para datos reales.

# Adaptación de la impedancia eléctrica de un transductor de ultrasonido piezoeléctrico

INTI

**Responsables:** Sergio Gwirc y Federico Dos Reis, INTI

**Participantes:** Julian Haddad<sup>†</sup> y Quimey Vivas<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

En este trabajo se exploró un método para la adaptación eléctrica de estos transductores piezoeléctricos para imágenes ultrasónicas en un ancho de bandas alrededor de la frecuencia de resonancia. Utilizando el modelo de cuádrupolos eléctricos se trabajó en el cálculo de los componentes eléctricos pasivos de la misma. Se trabajó en un primer momento con un modelo analítico y numérico. Se encontró que las soluciones encontradas con el método heurístico de recocido simulado fue más satisfactoria.

## 1 Introducción

Este problema está vinculado con el desarrollo de una matriz de transductores piezoeléctricos. Los mismos emiten y reciben ultrasonido. Con el armado de matrices del orden de 64 (también hay de 128) se puede realizar un trabajo de enfoque para realizar imágenes. En particular imágenes para uso medicinal, la conocida ecografía.

El efecto piezoeléctrico es un efecto característico de ciertos materiales que al aplicárseles una tensión se deforman proporcionalmente a la misma y viceversa, al deformarlos, producen una tensión.

Las cerámicas piezoeléctricas (CP) se han establecido como el material más apto para la fabricación de dispositivos electromecánicos y particularmente para la generación de ondas acústicas en la región espectral del ultrasonido. Su eficiente capacidad de generar ultrasonido ha sido preponderante para que gran parte de sus aplicaciones se orientaran a la determinación de estructuras internas en cuerpos ópticamente opacos, dado que el uso de radiaciones electromagnéticas más penetrantes, como los rayos X, sólo muestran una proyección plana de las mismas.

El aporte de los trabajos del Laboratorio reside en la introducción de la tecnología de película gruesa que presenta enormes ventajas en la realización de arreglos, comparada con la tecnología tradicional. El empleo de serigrafía permite la automatización y al mismo tiempo una gama alta de posibilidades para realizar geometrías arbitrarias de uno o varios elementos e imprimirlos en tamaños reducidos. La preparación y el estudio de transductores de gran cantidad de elementos es la meta actual tanto en la tecnología como en investigación con imágenes de ultrasonido. La tecnología de película gruesa modifica la forma tradicional de preparar y ver al transductor de ultrasonido en general y los arreglos bidimensionales en especial.

Debido a sus características estructurales, los transductores de película gruesa suelen presentar impedancias tanto acústicas como eléctricas que son 2 y/o 3 veces menores que los realizados con una cerámica tradicional. Por lo tanto, la energía aplicada es mucho más fácil de aprovechar eléctricamente y también más eficiente en la emisión y recepción en medios de baja impedancia acústica como el agua o el cuerpo humano. En la producción de imágenes, cada cerámica se utiliza para emitir un pulso en su modo de resonancia en espesor. Esto se logra excitando la

misma mediante la aplicación de pulsos cuadrados que tienen una duración coincidente con el semiperíodo de la frecuencia de resonancia del transductor.

## 2 Planteo del problema

El problema planteado es el estudio de un circuito de adaptación de la impedancia eléctrica de un transductor de ultrasonido piezoeléctrico. El mismo es necesario para que cuando se manda un pulso desde la fuente, no se produzcan reflexiones que vuelvan a la fuente, reboten y vuelvan al piezo. Este efecto hace que la oscilación en el piezoeléctrico se mantenga más allá del amortiguamiento propio, empeorando la resolución temporal del sistema. La situación ideal para que se transmita toda la señal y no haya reflexiones es el desarrollo de una adaptación que haga que la impedancia que ve la fuente sea una impedancia compleja de módulo  $50\Omega$  y fase 0 (que es la impedancia de las fuentes que están normalizadas).

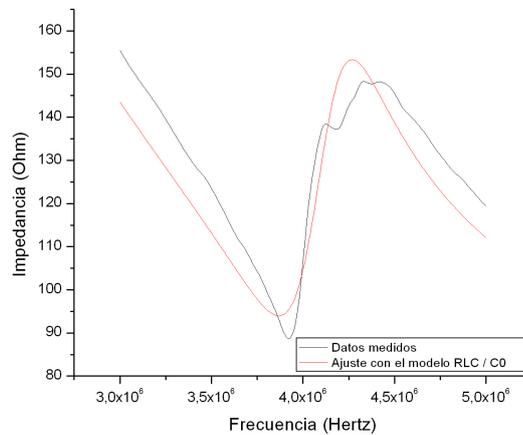


Figura 1: Entorno de la resonancia de transductor piezoeléctrico ajustada con el modelo de circuito RLC serie en paralelo con una capacidad  $C_0$

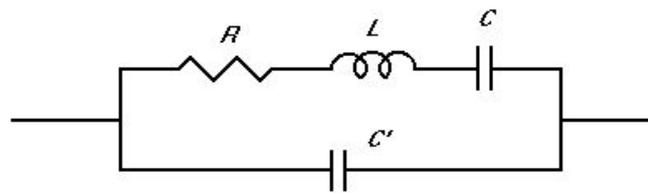


Figura 2: Circuito equivalente para un entorno de la resonancia de un dispositivo piezoeléctrico. Modelo de Butterworth Van Dyke

La impedancia del piezo varía con la frecuencia (Ver Figura 1 con datos de un piezo desarrollado en el INTI) y en un entorno de la resonancia puede modelarse con un circuito RLC (Resistencia inductancia Capacidad) con una capacidad ( $C_0$ ) en paralelo (Figura 2). Un primer trabajo que

realizamos es la obtención de los valores de  $R$ ,  $L$ ,  $C$  y  $C_0$  de este circuito equivalente. A partir de esto, nuestro problema pasa a ser adaptar una impedancia que tiene una forma funcional determinada por estos componentes.<sup>2</sup>

El objetivo es el desarrollo del circuito de adaptación de impedancias, que va entre la fuente y el piezo (ver Fig 3).

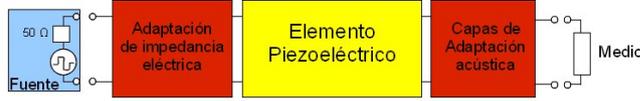


Figura 3: Esquema de transductor piezoeléctrico de ultrasonido

### 3 Formulación matemática

El problema que nos encontramos se puede plantear matemáticamente partiendo de dos funciones que modelan la impedancia en función de la frecuencia de dos tipos de circuitos elementales:

- Un *bloque RLC serie* que depende de tres parámetros reales positivos  $R$ ,  $L$  y  $C$  (resistencia, inductancia y capacidad) tiene una impedancia dada por

$$Z_s(w) = R + i(Lw - \frac{1}{Cw})$$

- Un *bloque RLC paralelo* que depende de tres parámetros  $R$ ,  $L$  y  $C$  (resistencia, inductancia y capacidad) tiene una impedancia dada por

$$Z_p(w) = \left( \frac{1}{R} + i(Cw - \frac{1}{Lw}) \right)^{-1}$$

Para conectar estos circuitos entre si vamos a usar una estructura de cuadripolos, dos polos de entrada (Tensión y corriente) y dos de salida. La ventaja de este modelo es que nos permite trabajar fácilmente con distintos esquemas de adaptación. Además permite calcular la tensión y corriente de salida de un circuito cuadripolar simple  $C$  en función de la tensión y corriente de entrada mediante la fórmula

$$\begin{pmatrix} V_{in} \\ I_{in} \end{pmatrix} = M_C \cdot \begin{pmatrix} V_{out} \\ I_{out} \end{pmatrix}$$

donde  $M_C$  es una de las siguientes dos matrices

$$M_{s,z} = \begin{pmatrix} 1 & z(w) \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad M_{p,z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -z(w)^{-1} & 1 \end{pmatrix}$$

dependiendo de si la impedancia  $z(w)$  se conecta en serie o paralelo.

Para un circuito formado por la composición de varios cuadripolos  $C_1 \dots C_n$  en serie obtenemos

$$\begin{pmatrix} V_{in} \\ I_{in} \end{pmatrix} = M_{C_1} \dots M_{C_n} \begin{pmatrix} V_{out} \\ I_{out} \end{pmatrix} \quad (1)$$

<sup>2</sup>En la primera parte del trabajo se utilizó el modelo de circuito equivalente calculado como dato y se trabajó en la adaptación del mismo. Luego, por las características del código desarrollado se pudo prescindir de este modelo y trabajar en la adaptación directamente con los datos medidos.

y la impedancia total de entrada se despeja de la fórmula  $z \cdot I_{in} = V_{in}$ .

El objetivo es entonces encontrar una familia de matrices  $M_{\bullet}$  y sus respectivos parámetros para que la impedancia que se obtiene de la fórmula (1) se aproxime a  $50\Omega$  al tomar el vector

$$\begin{pmatrix} V_{out} \\ I_{out} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_{piezo}(w) \\ 1 \end{pmatrix}$$

donde  $z_{piezo}(w)$  es la impedancia (en función de la frecuencia) del piezoeléctrico medida.

## 4 Un primer intento de solución

Lo primero que pensamos cuando nos contaron el problema fue en resolverlo simbólicamente usando un software similar al Mathematica de Wolfram. La idea era considerar *pocos* bloques cuadripolo y tomar una variable para cada parámetro. Una vez fijados los parámetros la impedancia de entrada resulta una función racional de la frecuencia. Calculamos la diferencia en norma  $L_2$  entre dicha función y 50 que ahora es una función racional de los parámetros y obtenemos un problema de minimización en varias variables (del orden de 10 variables).

El software que utilizamos fue incapaz de calcular simbólicamente la integral que se necesita para calcular la norma  $L_2$ . Creemos que la dificultad radica en que para integrar por fracciones simples es necesario factorizar el denominador de esta función racional cuyo grado era demasiado alto y además tiene coeficientes simbólicos.

Como ya habíamos escrito una cantidad considerable de código en el Mathematica probamos usar sus rutinas numéricas y sorprendentemente funcionaron muy bien.

Las primeras simulaciones resultaron en una respuesta extremadamente plana y con pocos componentes. Después de analizar estas soluciones notamos que había sospechosamente una resistencia de  $50\Omega$  y que los demás parámetros convergían a los extremos de la región donde se minimizaba la función. Físicamente esta solución corresponde a desconectar el transductor piezoeléctrico y reemplazarlo con una resistencia.

Esta situación se ve reflejada en el hecho de que la tensión de salida (sobre el transductor) es mucho más chica que la de entrada. Para sortear este inconveniente modificamos la función objetivo sumándole una penalización relacionada con esta relación de tensiones.

Las rutinas numéricas del Mathematica ofrecieron resultados poco satisfactorios ya que la impedancia oscilaba en un rango de  $\pm 10\%$ .

## 5 Un segundo intento de solución

Para mejorar la convergencia a la solución pensamos en usar alguna metaheurística como algoritmos genéticos o recocido simulado. En base a la experiencia personal de los participantes decidimos intentar con recocido simulado. También empezamos a usar **C++**. El algoritmo parte de una solución factible cualquiera y de una temperatura inicial. Al principio la solución puede moverse al azar. A medida que pasa el tiempo la temperatura va bajando y a su vez se va restringiendo la posibilidad de moverse, de las soluciones. Más concretamente, para una temperatura  $T$ , la probabilidad de moverse de una solución con valor  $v_0$  a una solución con valor  $v_1$  es

$$e^{-\max(0, \frac{v_1 - v_0}{T})}$$

Para poder implementar este algoritmo hay que definir quiénes son las soluciones *vecinas* a una dada. En virtud de las propiedades particulares de nuestro problema decidimos que un parámetro

$\lambda$  (ya sea  $R$ ,  $L$  o  $C$ ) puede cambiar según

$$\lambda \mapsto (1 + \alpha)\lambda$$

donde  $\alpha$  es una variable aleatoria uniforme en  $[-\varepsilon, \varepsilon]$ . Esta elección de vecinos tiene la ventaja de dejar fijos al 0 y al  $\infty$ , incluyendo estos valores se puede modelar un circuito que no tenga algunos de los componentes  $R$ ,  $L$  o  $C$ .

Las metaheurísticas en general tienen varios parámetros que hay que ajustar experimentalmente. En nuestro caso: la temperatura inicial, cuántas iteraciones se hacen para cada temperatura, cuánto baja la temperatura después de hacer las iteraciones, el  $\varepsilon$  que mencionamos antes, etc. Dedicamos los últimos días del TAMI a ajustarlos.

## 6 Complementos

Como forma de complementar este programa, programamos una interfaz para llamar nuestros algoritmos desde MATLAB. Esto permite interactuar a nuestro programa con el resto del software con el que se estaba trabajando en el laboratorio. Esta interfaz se basa en el uso de la herramienta MEX incorporada al MATLAB.

Usando un componente del Mathematica llamado Manipulate se puede visualizar la impedancia, de forma interactiva: Se pueden modificar los parámetros y el gráfico se adapta en tiempo real. Esto puede ser muy útil a la hora de reajustar los parámetros dado que algunos de ellos pueden no estar disponibles comercialmente.

## 7 Resultados y conclusiones

La experiencia fue enriquecedora tanto desde el punto de vista del modelado físico como de la implementación de los algoritmos. El software Mathematica sirvió como punto de partida para encarar el problema y para testear nuestra intuición. Una vez que el problema estuvo bien planteado y supimos dónde radicaban las dificultades en cuanto a la optimización pudimos programarlo en lenguaje C++.

Desde el punto de vista del trabajo en piezoeléctricos de película gruesa esta es una herramienta importante que permitirá realizar una exploración en la adaptación eléctrica de este tipo de dispositivos, particularmente para el trabajo con la segunda frecuencia de resonancia. Además, el código puede trabajar directamente con los datos de la curva de impedancia del transductor, independientemente del cálculo del circuito equivalente.



# Chattering en el laminador de hojalata

SIDERAR

Responsable: Esteban Kemerer, SIDERAR

Participantes: Marcos Cossarini<sup>†</sup> y Tomás Guozden<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

<sup>‡</sup>Instituto Balseiro

## 1 El problema

La hojalata es una delgada lámina de acero de bajo carbono, habitualmente producida en espesores 0.18 – 0.25mm. Se lamina a partir de chapa laminada en frío de espesor 1.8mm. Los anchos laminados varían entre 650 a 1220, el más habitual es 934mm.

El laminador consta de 4 stand similares, cada uno compuesto por un marco (housing), y cuatro rodillos (ver Esquema). Los rodillos de laminación que están en contacto con la chapa tienen un diámetro 495 a 549 mm, mientras que los rodillos de respaldo, que contribuyen a aumentar la masa del sistema, tienen un diámetro de 1192 a 1354 mm. Los diámetros de los rodillos son muy variables en el tiempo porque deben ser rectificadas periódicamente.

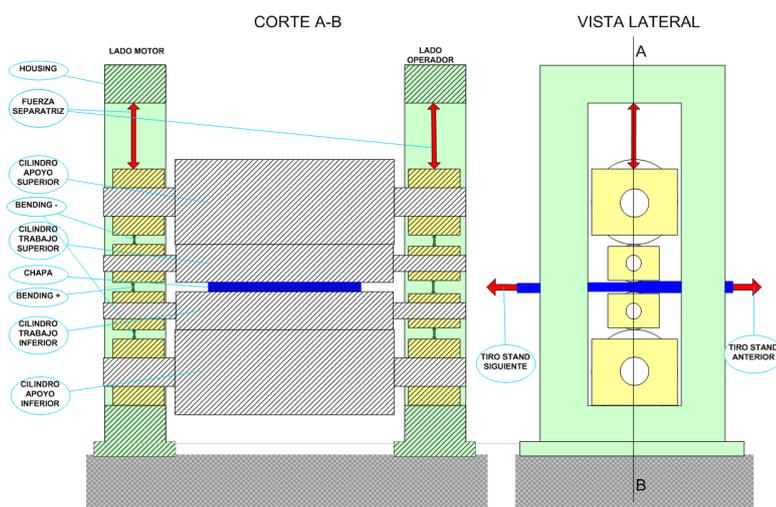


Figura 1: Esquema del laminador.

Trabajando en cierto rango de espesores y velocidades se producen oscilaciones que aumentan en el tiempo (chatter) y que impiden la laminación. Las oscilaciones son de alta frecuencia, del orden de 150 – 200 Hz.

Se sabe que en algunas situaciones se puede atribuir el origen del problema a rodamientos defectuosos, o a un defecto de fabricación de los rodillos de laminación (facetado), estado de la emulsión de laminación, etc. Estos defectos excitan la oscilación, que se amplifica en el tiempo

hasta impedir la producción. Un diagnóstico certero ayuda a salir de la situación rápidamente, por ejemplo cambiando el cilindro de trabajo que tiene problemas

Esta situación motiva varias preguntas.

1. ¿Cómo determinar el origen con las señales de proceso?
2. ¿Qué se puede hacer para prevenirla, en lo posible sin afectar la productividad?
3. ¿Cómo se detecta tempranamente, y cuáles son las acciones correctivas correctas?

Se dispone de mediciones de siete sensores de vibraciones (velometer), que miden la oscilación del marco de cada jaula y de las señales más importantes de proceso: espesores, velocidades, tiros, fuerzas, etc.

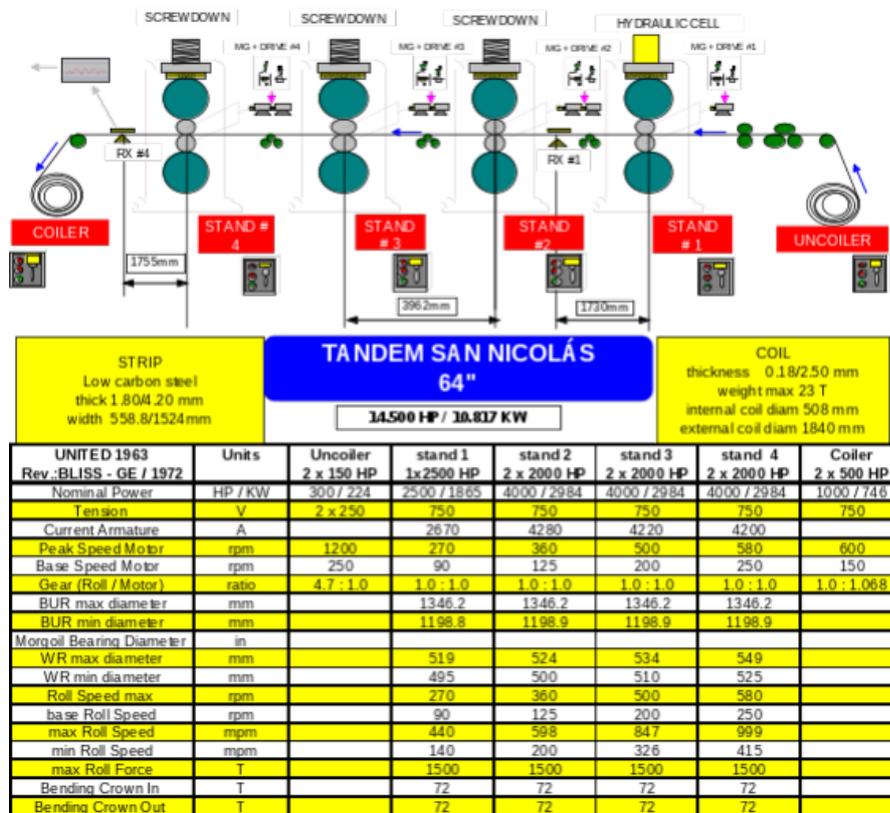


Figura 2: Características del laminador.

## 2 Primeros Pasos

Luego de discutir extensamente el problema, el primer contacto con el proceso lo tuvimos mediante la observación de las señales adquiridas, tanto en casos de funcionamiento normal como en la aparición de “trepidaciones” (vibraciones descontroladas). El procesamiento y visualización se

hicieron mediante el software *IbaAnalyzer*, que mostró ser una herramienta muy útil, de uso sencillo, ágil y flexible.

El proceso de laminación completo dura del orden de los 5 minutos, tiempo en el cuál se procesan 2 bobinas. Pero para cada proceso se registran cientos de señales del proceso, además de set points de operación, la mayoría de ellas muestreadas a una frecuencia de 1kHz. Nosotros enfocamos nuestra atención en las siguientes señales de proceso:

- Sensores de vibración (vertical) de los 4 stands (lado motor y lado operador, excepto en el primer stand que sólo tiene lado operador). Miden la velocidad con la que se está moviendo el stand ([mm/seg]).
- Medidores por rayos X de espesor de la chapa. Hay uno en la zona 1 (salida del stand 1) y otro en la zona 4 (salida del stand 4).
- Medidores de velocidad ([RPM]) de los rodillos de trabajo (encoders).
- Medidores de fuerza separatriz ([Tn]) aplicada en los stands (celdas de carga).

### 3 Paso de la soldadura como fuente de información

El laminador no funciona en continuo, sino que procesa bobinas. Algunas de esas bobinas son "simples" de aproximadamente 10Tn, pero la mayoría son "dobles" de alrededor de 20Tn. Antes de que las bobinas se laminen en el Tandem, la línea de producción anterior (línea de Decapado), puede soldar el final de la bobina simple con el comienzo de una segunda bobina del mismo tipo y así lograr bobinas dobles. Esto se hace para aprovechar mejor el lugar de las playas de bobinas y para disminuir a la mitad cantidad de cargas, enhebrado, salidas de cola y evacuación de bobinas.

La soldadura de las bobinas dobles constituye una discontinuidad en el espesor y en las propiedades mecánicas de la chapa, cuyo paso por los rodillos de laminación es generalmente detectado por los sensores de espesor y además produce un golpe al pasar por cada una de las etapas, muy bien detectado por los sensores de vibración.

Este golpe, habitual en el proceso, actúa como una perturbación cuya respuesta nos brinda información acerca del sistema. En la Figura 3 mostramos las señales de los sensores de vibración en cada etapa. Vemos en la figura que el tiempo transcurrido entre etapas se reduce, dado que la velocidad de la chapa aumenta al reducir su espesor.

Una prueba que se hizo fue tomar varias bobinas (93, tomadas de dos días distintos), hallar la soldadura automáticamente mediante una rutina programada en *ibaAnalyzer*, cortar y exportar las señales a *Matlab* y aproximar la vibración con una oscilación armónico amortiguado por medio de la rutina *fminsearch*.

En la Figura 4 mostramos el pasaje de la soldadura a través de la última etapa de laminación, para 4 casos distintos.

Para cada una de las señales aisladas ajustamos los coeficientes de un oscilador armónico amortiguado:

$$u(t) = Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t - b) \quad (1)$$

En la Figura 4 mostramos los resultados en 4 casos distintos en donde vemos, además de que el modelo elegido es adecuado, un buen acuerdo entre la función ajustada (líneas) con los datos del sistema (puntos).

Cada vez que una soldadura pasa por debajo de los stands de laminación genera una excitación mecánica tipo impulso ya que la dureza de la soldadura normalmente es mucho mayor que la del

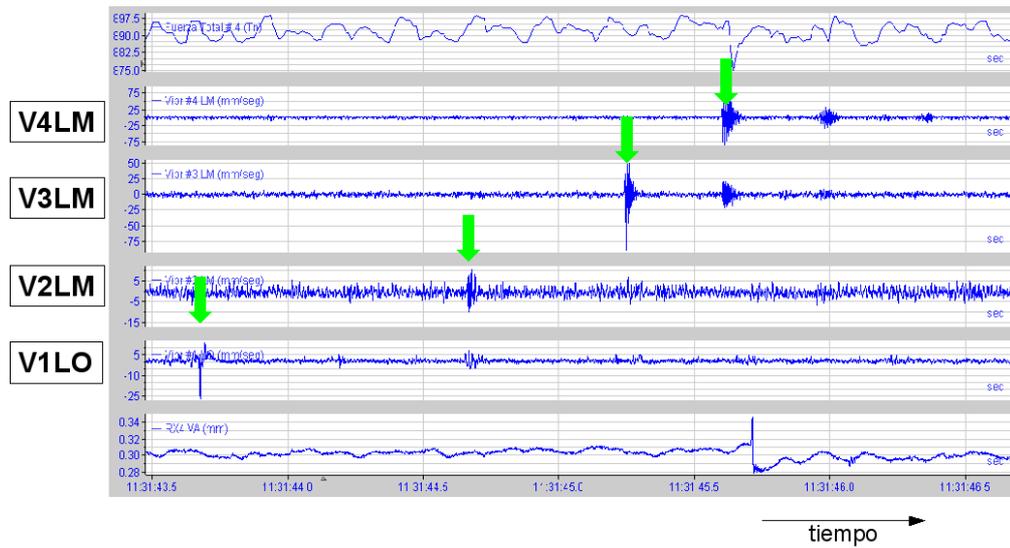


Figura 3: El paso de la soldadura es detectado sucesivamente por los sensores de vibración en cada etapa de laminación. LM y LO son sensores instalados del lado motor y lado operador respectivamente.

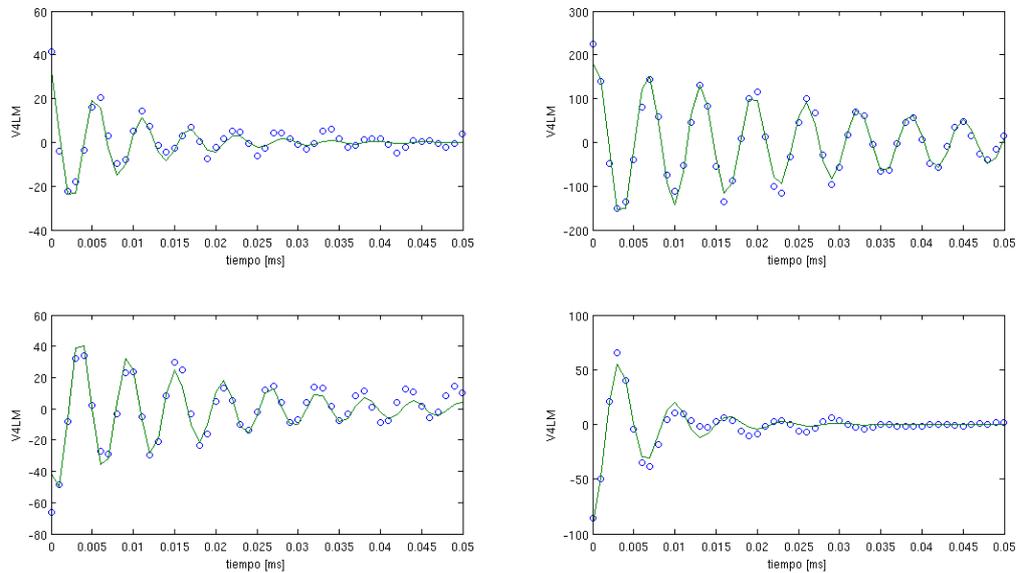


Figura 4: En círculos azules graficamos la señal de vibración al pasar una soldadura, en líneas verdes el ajuste de por medio de una oscilación armónica amortiguada (ecuación (1)).

resto del material laminado. En la figura 3 mostramos un histograma de los valores ajustados para la frecuencia de amortiguación  $f = \frac{\omega}{2\pi}$ .

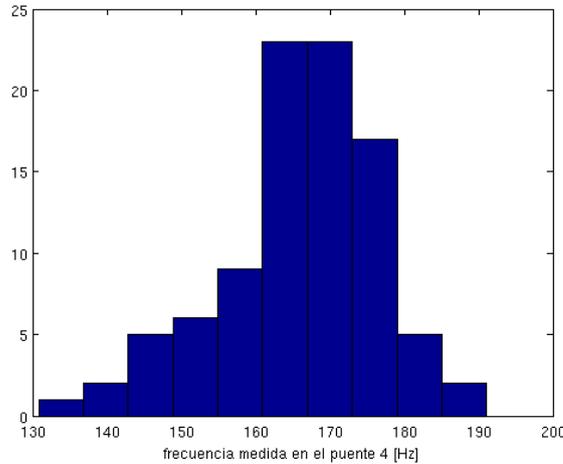


Figura 5: Histograma de las frecuencias de vibración del puente 4 al ser excitado por el paso de la soldadura. Se analizaron 93 casos, encontrando una media de 165Hz y un desvío estándar de 10Hz.

## 4 Correlaciones de la frecuencia de amortiguación

¿Qué parámetros determinan la frecuencia de vibración?

Si la vibración, como se sospecha, corresponde a un modo del puente de laminación, es probable que la frecuencia dependa de la presión aplicada en los rodillos. Esta es una variable medida en el sistema por celdas de carga. En la Figura 6 graficamos la frecuencia encontrada versus la fuerza aplicada, tanto para el puente 3 como para el puente 4. Encontramos una débil correlación positiva entre la frecuencia y la fuerza.

Esta dependencia puede explicarse suponiendo que, a mayor presión, las superficies logran un mayor contacto y por lo tanto el volumen de material a deformar es mayor. Esto sería equivalente a un modelo de resortes en paralelo tal que a mayor carga, mayor es la cantidad de resortes que entran en juego, generando un aumento de la constante elástica efectiva del oscilador. Una mejora que puede hacerse en el análisis de estos datos es utilizar el ancho de la chapa, que varía entre aprox. desde 600mm a 1 metro, para poner un valor más representativo de la presión ejercida entre superficies.

## 5 Laminación de soldaduras y casos de trepidación

Se analizaron muchas bobinas. Se halló que en la mayoría de los casos, la vibración al pasar una soldadura se extingue rápidamente (hasta 150 ms) sin generar problemas. Si la vibración dura más tiempo, en cambio, es probable que se generen trepidación. Sería interesante poder realizar mediciones en línea de todas las soldaduras a medida que transcurre el proceso de laminado de manera tal de poder ir apreciando las variaciones de frecuencia, amplitud y tiempo

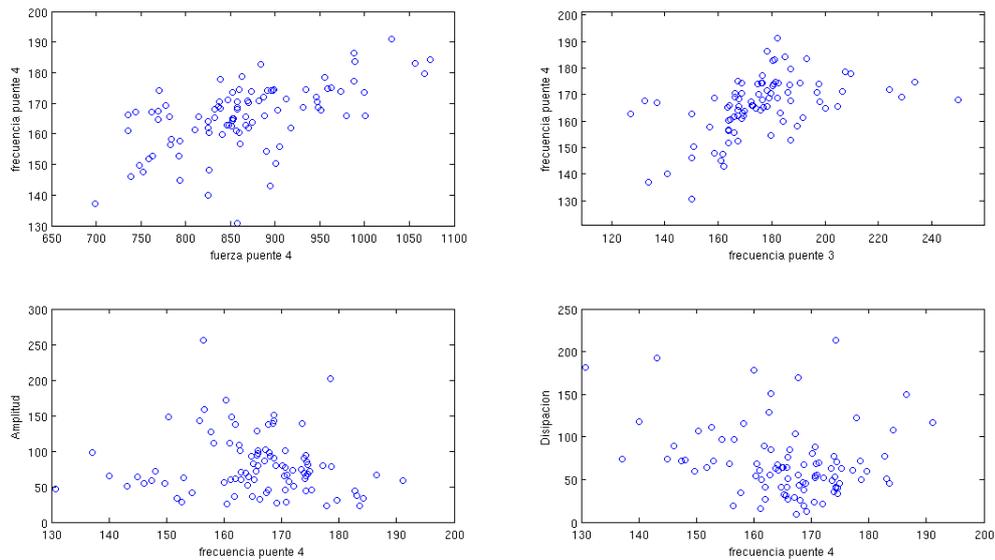


Figura 6: Correlación Fuerza de Laminación Std4 Vs Frecuencia amortiguación luego de laminar una soldadura. Mayor fuerza implica mayor frecuencia de amortiguación. El resto de las correlaciones analizadas no presentan relación.

de amortiguación de las vibraciones generadas por las mismas. Esto permitiría enriquecer la nube de puntos para precisar mejor la relación de las mismas con las distintas variables de proceso (fuerza, velocidad, reducción, ancho de chapa, etc) y evaluar cuantitativamente el la capacidad del laminador para amortiguar vibraciones.

## 6 Análisis de Fourier en ventanas de tiempo

Se calculó la transformada de Fourier de una señal de vibración en ventanas de tiempo de 10s, cada 1s, en una bobina en la que se había observado vibración apreciable durante todo el laminado, ver Figura 7. En este caso se observó que la frecuencia de vibración acompañaba a la velocidad de laminado (que fue incrementada luego de completarse la primera mitad de la bobina). Además, la frecuencia de vibración del stand era 18 veces la frecuencia de rotación del cilindro de trabajo correspondiente, sugiriendo un defecto del rodillo de trabajo (facetado de 18 caras). Aplicando el mismo procedimiento a una bobina común (con bajos niveles de vibración) se observan vibraciones de intensidad variable durante todo el laminado, con lo cual la transformada de Fourier en ventanas de tiempo podría servir para monitorear continuamente la frecuencia de vibración de los stands.

## 7 Estudio de mecanismos de vibración

El mecanismo principal de vibración de los stands individuales no fue modelado cuantitativamente. Sólo se sabe que su frecuencia es de aproximadamente 165 Hz, y que la frecuencia es mayor mientras mayor es la fuerza de compresión que se aplica en los rodillos. Esta propiedad es compatible con un modelo de elementos elásticos cuya libertad de movimiento se extingue al

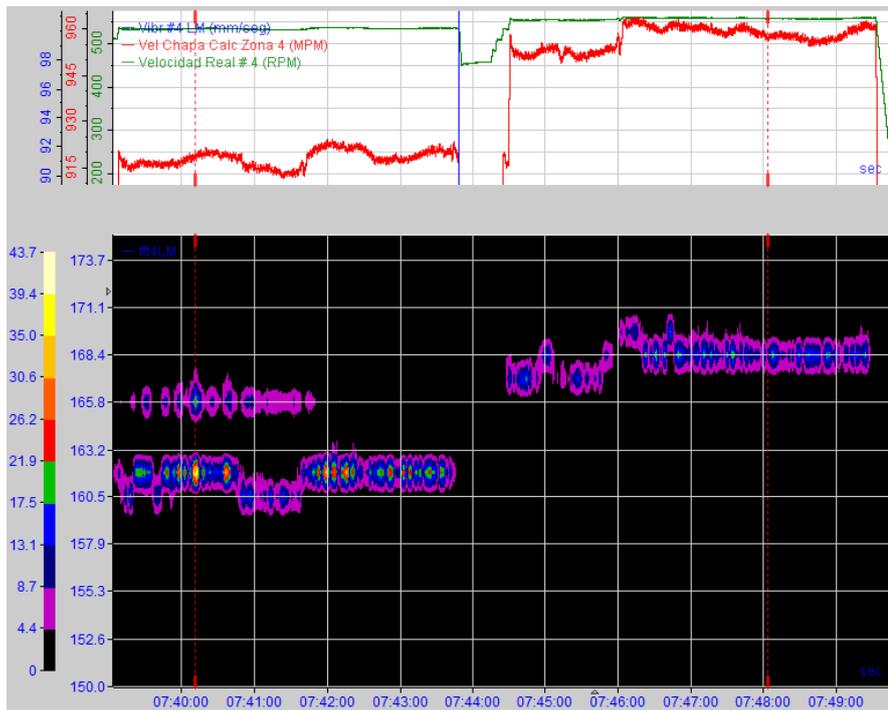


Figura 7: Transformada de Fourier en ventanas de tiempo de 10s. Durante la primera mitad de la bobina, se observa una vibración de 160 – 162Hz. Durante la segunda mitad, aumenta la velocidad de laminado y también la frecuencia de vibración.

aumentar la precarga por compresión, generando un aumento de la constante elástica efectiva del oscilador, lo cual aumenta la frecuencia natural de vibración.

Existen varios posibles mecanismos de alimentación de la vibración de un stand:

- Facetado de sus cilindros (observado en un caso de vibración constante, usando Fourier en ventanas).
- Oscilación del espesor de chapa que viene del stand anterior o del líneas anteriores, provocado por vibraciones del stand (no estudiado).
- Oscilación del espesor de chapa que sale del stand anterior, provocado por variaciones en la tensión con el stand siguiente debido a la oscilación de este ultimo. (Observado particularmente en la en laminación de soldaduras.). Este caso nos resultó mas interesante debido a que las variaciones de espesor en este caso tendrían la misma frecuencia con la que vibro el stand. La denominamos “realimentación de vibraciones de un stand” (estudiado a continuación).

### 7.1 Mecanismo de realimentación de vibraciones de un stand

La reducción de espesor en un stand de rodillos está dada por la compresión entre los rodillos y por las fuerzas de tiro en la entrada y salida , que se controla variando la velocidad de rotación del rodillo del stand en cuestión y sus dos vecinos.

Cada stand está diseñado para mantener el espesor de salida de chapa aproximadamente constantes. Por lo tanto, el caudal de salida (y, por lo tanto, el caudal de entrada) son aproximadamente constantes. Por ejemplo al ingresar un sobre-espesor de chapa al stand 4, debe reducirse la velocidad de la chapa entrante (para mantenerse constante el caudal). Esto provoca una disminución en la tensión de la chapa entre el stand 3 y el 4. Al laminar el stand 3 con menor tensión en la chapa que sale, se produce un sobre-espesor en dicho material, que se dirige nuevamente al stand 4.

Por lo tanto, el sobre-espesor que ingresa al stand 4 tiene dos destinos: en parte “rebota” de vuelta al stand 3, y en parte atraviesa el stand 4, generando una oscilación de la separación de los cilindros de trabajo.

Este mecanismo de realimentación de las vibraciones del stand 4 está mencionado en la literatura, y fue observado en algunos pasajes de soldaduras, ver Figura 8. También puede producirse entre los stands 3 y 2.

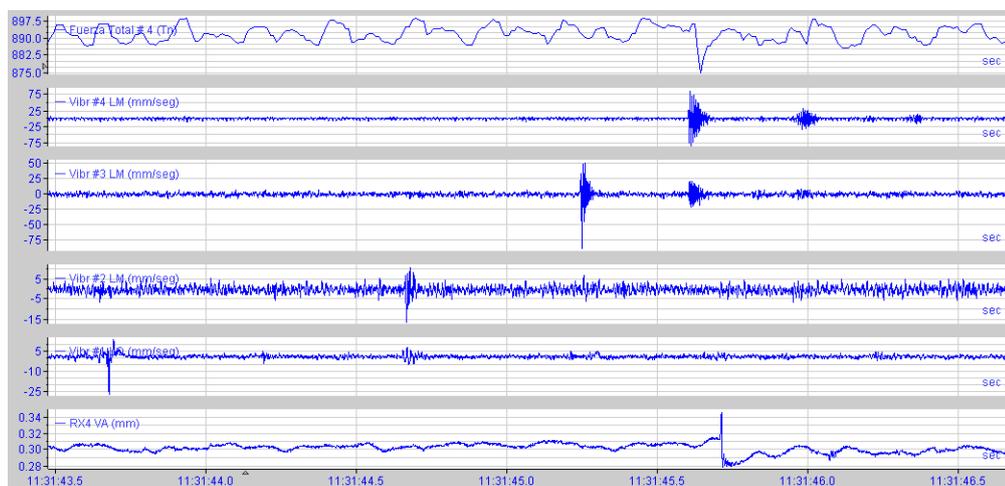


Figura 8: Pasaje de una soldadura por el laminador. En el segundo 45.6 vibra el stand 4 por el pasaje de la soldadura, generando una irregularidad en el espesor a la salida del stand 3. En el segundo 46, el stand 4 vibra nuevamente al pasar esta irregularidad.

Soldadura pasa por debajo de A :Stand1, B:Stand2, C:Stand3, D:Stand4;

E y G: Vibración del STd4 en el mismo momento hace vibrar STd3.

F y H: llega el fuera de espesor engendrado a la salida del stand 3 al stand 4.

## 8 Conclusiones y propuestas

En general se puede comprender que el fenómeno de las trepidaciones es muy complejo debido a la variedad de variables que afectan al proceso de laminado, no obstante esto hemos podido encontrar enfoques del problema que ayuden a su entendimiento.

### 8.1 Frecuencia de amortiguación de oscilaciones de los stands

La frecuencia de resonancia medida en este caso fue de 165 Hz en promedio, pero notamos dependencia de la misma con algunas variables de proceso. Para obtener mejores correlaciones

sería necesario analizar muchos mas pasajes de soldaduras y aumentar la nube de puntos. Predecir con mayor precisión la frecuencia de amortiguación de las perturbaciones puede ser muy útil para buscar puntos de operación del laminador que no contribuyan a las trepidaciones.

## 8.2 Facetado de los cilindros

Suponiendo que el facetado de los cilindros sea causado o magnificado por el uso de los mismos, sería conveniente evitar en la manera de lo posible que la frecuencia de giro de los cilindros sea un divisor exacto de la frecuencia de resonancia medida (165 Hz). En caso de que esto no sea posible aunque sea intentar que este divisor sea siempre distinto. Evaluar automáticamente el desempeño de los cilindros cada vez que los mismos ingresan al laminador, alimentar una base de datos, esto ayudaría a determinar dentro del parque de cilindros cuáles son los más propensos a generar trepidaciones.

## 8.3 Teoría de la realimentación de las vibraciones

Monitorear la intensidad de vibraciones al variar la velocidad de trabajo lentamente. Si la frecuencia de vibración no acompaña la velocidad de giro, la intensidad debería pasar de alta a baja al pasar la fase de realimentación de la situación constructiva a la situación destructiva, lo cual se logra variando aproximadamente 0,7

Monitorear la velocidad de la chapa entre los stands (usando nuevos encoders en los rodillos intermedios) para controlar la fase de realimentación, evitando la interferencia constructiva.

Monitorear el tiempo de extinción de las vibraciones por pasaje de soldadura, para alertar al operario de que pueden aparecer vibraciones descontroladas en una bobina próxima.



# Modelo fluidodinámico y corriente límite en cuba de Estañado Electrolítico de bobinas

SIDERAR

**Responsable:** Damián Levin, SIDERAR

**Participantes:** Eugenio Caprioglio<sup>‡</sup>, Patricia Durán<sup>†</sup>, Verónica Moyano<sup>†</sup>, Diego Passarella<sup>†</sup> y Gabriel Salierno<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

<sup>‡</sup>UTN

## 1 Resumen del problema

En el proceso de estañado electrolítico de bobinas de acero, la chapa pasa por varias celdas electrolíticas similares (seis en el caso de la línea de Ternium Siderar) donde se sumerge en una solución acuosa conocida como electrolito. Este electrolito contiene iones de estaño ( $Sn^{+2}$ ) disueltos en la solución, un ácido (fenolsulfónico) y un aditivo abrillantador. En cada una de las cubas, se deposita el estaño aplicando corriente eléctrica que es transportada dentro de la cuba por un conjunto de ánodos que se enfrentan a la chapa.

En este proceso el aspecto final de la hojalata (brillo) depende fuertemente de las condiciones de deposición del estaño, entre ellas la turbulencia de la solución en la cuba. Esto es debido a que durante la electrodeposición los iones de estaño que están cerca de la chapa se agotan hasta que eventualmente la concentración de iones es tan baja que no permite una deposición adecuada (se genera una deposición de tipo dendrítica). Para no caer en esta situación, la capa de electrolito cercana a la chapa debe ser renovada con iones del seno de la solución y esto depende de la turbulencia del electrolito. Debido al diseño de la línea, cada bobina tiene necesariamente un tramo procesado a baja velocidad (110mpm), durante el cual el brillo de la chapa no suele ser aceptable por lo expresado anteriormente..

El objetivo de este trabajo es hallar una expresión matemática para la densidad de corriente crítica superior (densidad de corriente límite) y determinar cómo afectan las distintas variables. Luego este modelo puede ser implementado en un sistema de control (PLC) y determinar automáticamente la densidad de corriente óptima con los inputs de velocidad de chapa, temperatura de electrolito y concentración de estaño.

## 2 Introducción

La *hojalata* es un recubrimiento metálico de estaño sobre una chapa de acero laminada en frío, recocida y templada. La hojalata está compuesta estructuralmente por las siguientes capas (desde el material interior hacia el exterior): acero base, compuesto intermetálico hierro-estaño, estaño metálico, capa de pasivado y aceitado.

El proceso utilizado para lograr que el estaño se deposite sobre la chapa de manera uniforme y se adhiera a ésta, es la **electrólisis**. En las cubas de estañado se realiza una electrólisis produciendo el revestimiento de la chapa con estaño. La chapa recorre una serie de cubas que contienen un **electrolito**, es decir una solución de cationes estañosos ( $n^{\circ}$  de oxidación **+2**) y otros elementos. La chapa se polariza negativamente, es decir se carga negativamente (**cátodo**)

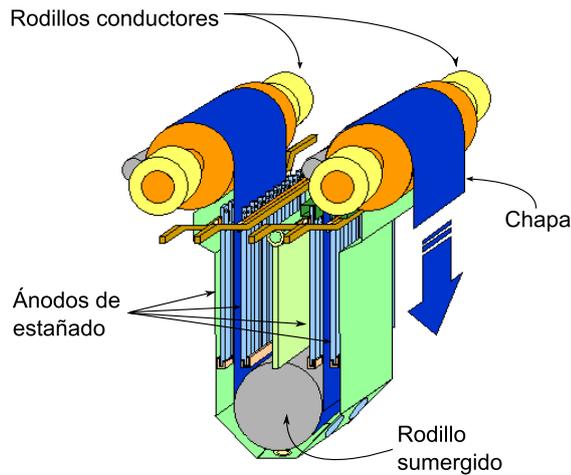


Figura 1: Diagrama de la cuba de estañado.

por medio de los rodillos conductores, que además facilitan su avance a lo largo de la línea. El polo positivo (**ánodo**) está conectado a las barras de estaño sumergidas en la solución electrolítica.

El objetivo de la sección de estañado es depositar una **cantidad** de estaño específica, generalmente medida en gramos por metro cuadrado, y con una **calidad** estética aceptable, que se manifiesta con el brillo de la hojalata.

La apariencia del brillo no es una propiedad física, por lo cual se hace muy difícil medirla. Se puede determinar la brillantez por la medida de la reflexión de la luz en forma difusa, en lugar de en forma especular. Es decir, cuando gran parte de la luz es reflejada direccionalmente y una pequeña parte es reflejada en forma difusa quedando la superficie con una apariencia brillante. La naturaleza de la superficie determina la brillantez. Sabiendo esto, para obtener depósitos electrolíticos brillantes se debe controlar la cristalización (tamaño y distribución de los granos) del depósito y así lograr un tamaño de grano óptimo. De esta manera se logra que gran parte de la luz sea reflejada direccionalmente y una pequeña parte lo sea en forma difusa.

Existen muchos factores que afectan el tamaño de grano, entre ellos la densidad de corriente aplicada, temperatura del electrolito, concentración de iones de estaño, concentración de agentes abrillantadores, velocidad de línea y la mayor o menor existencia de agentes contaminantes (Fe, Cl, etc). De todos estos el factor más importante y más útil para controlar de forma práctica es la densidad de corriente, que se obtiene dividiendo la de corriente total por la superficie a cubrir (ecuación (1)):

$$J_{corriente} = \frac{I}{A_{chapa} \times L_{ánodo} \times N} \quad (1)$$

Donde:

$$\begin{aligned} J &= \text{Densidad de Corriente}[A/dm^2] \\ I &= \text{Corriente}[A] \\ A_{chapa} &= \text{Ancho de la chapa}[dm] \\ L_{ánodo} &= \text{Longitud del ánodo}[dm] \\ N &= \text{cantidad de cubas seleccionadas (6 máximo)} \end{aligned}$$

Para ello se define la ventana de proceso como el rango de densidad de corriente para los cuales

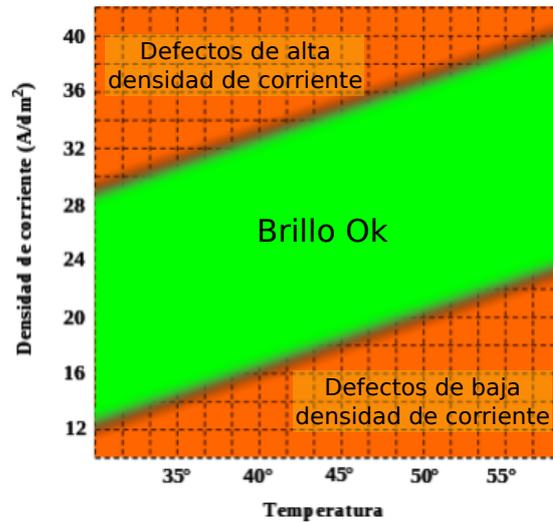


Figura 2: Ventana de proceso de estañado electrolítico: densidad de corriente vs. temperatura de electrolito

no se generan defectos de brillo. La Figura 2 presenta un esquema general de las densidades de corriente aceptables en función de la temperatura. Este esquema es conceptual (no cuantitativo) y además no contempla la influencia de otras variables.

En la Figura 2 puede apreciarse que la región donde el brillo es adecuado está confinado entre dos límites: una densidad de corriente crítica inferior y otra superior. El límite inferior es influenciado por la temperatura, la concentración de agente abrillantador y algunos contaminantes. En el límite superior influyen casi exclusivamente la temperatura, la concentración de iones de estaño y la velocidad de la línea, que aporta turbulencia y mejora el transporte de masa hacia la chapa.

### 3 Modelo fluidodinámico

Para modelar la condición fluidodinámica consideraremos a la pared anódica (la yuxtaposición de ánodos colgados verticalmente) como un plano. En la realidad cada ánodo queda separado del próximo unos 7mm pero para simplificar el análisis se considerará plano. Por otro lado la chapa también pasa verticalmente a una distancia de 25mm de los ánodos. Esta configuración de placas planas con velocidades relativas es conocida como modelo de Couette plano.

El flujo de Couette consiste en el movimiento de un fluido entre dos placas planas cuya longitud y ancho son mucho mayores que la distancia  $D$  que las separa. Estas placas se mueven a diferentes velocidades y el fluido que se encuentra entre ellas puede adquirir variados perfiles de velocidad dependiendo del régimen fluidodinámico (laminar o turbulento). Para establecer el tipo de régimen se utiliza una expresión del número de Reynolds donde la longitud característica es la mitad de la distancia que separa a las placas y la velocidad característica es la mitad de la velocidad relativa  $U$  entre ellas. Esto es

$$Re = \frac{DU\rho}{4\mu} \quad (2)$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fluido y  $\mu$  es la viscosidad. Experimentalmente se encuentra que para números de Reynolds menores que 200 el flujo es laminar y el perfil de velocidades es lineal, como se muestra en la Figura 3:



Figura 3: Perfil de velocidades para  $Re < 200$ .

Cuando el número de Reynolds es mayor a 1000, el flujo puede considerarse turbulento desarrollado. En ese caso el perfil adquiere una apariencia que describe la Figura 4.



Figura 4: Perfil de velocidades para  $Re > 1000$

En esta última figura pueden distinguirse tres zonas: las zonas 1 y 3 cercanas a cada placa y la zona 2, relativamente más alejada de ambas placas. En las zonas cercanas a las placas puede verse que la velocidad cambia mucho a medida que nos alejamos hacia el seno turbulento, mientras que en la zona alejada de las placas el cambio de velocidad es más suave. Este último régimen fluidodinámico es el que se adapta a nuestro problema. Para el cálculo del número de Reynolds deben considerarse los siguientes datos:

$$\begin{aligned}
 D &= 0,02\text{m (distancia chapa - ánodo)} \\
 U_{\min} &= 2\text{m/s (velocidad mínima de la chapa)} \\
 U_{\max} &= 5\text{m/s (velocidad máxima de la chapa)} \\
 \rho &= 1100\text{kg/m}^3 \text{ (densidad aproximada del electrolito)} \\
 \mu &= 0.002\text{kg/ms (viscosidad aproximada del electrolito)}
 \end{aligned}$$

Utilizando estos valores podemos asegurar que el valor de  $Re$  se encontrará entre unos valores mínimo y máximo, los cuales son:

$$\begin{aligned}
 Re_{\minimo} &= 5500 \\
 Re_{\maximo} &= 13750
 \end{aligned}$$

Y estos valores, calculados con las velocidades mínima y máxima respectivamente, nos aseguran un flujo turbulento desarrollado.

### 3.1 Estructura del flujo turbulento

Para el caso de un flujo turbulento de Couette, podemos analizar su estructura en diferentes regiones dependiendo de la distancia,  $s$ , a la pared. Se puede diferenciar este flujo en tres capas distintas:

1. *Capa límite laminar*: es la más cercana a la pared. Al ser de poco espesor, no pueden desarrollarse remolinos por lo cual predominan casi exclusivamente los esfuerzos viscosos. En este caso, para la velocidad, se tiene que  $u = f(\mu, \rho, \tau_0, s)$ , donde  $\tau_0$  es el esfuerzo cortante sobre la pared, es decir, la fuerza por unidad de área que experimenta la pared en dirección tangencial.
2. *Zona turbulenta totalmente desarrollada*: lejos de la pared, los esfuerzos estrictamente laminares son despreciables frente a los turbulentos y para modelar el comportamiento de este fenómeno se utilizan varias aproximaciones, entre ellas la teoría de longitud de mezcla de Prandtl como la más aceptada. Aquí el perfil de velocidades es prácticamente plano comparado con el perfil de la capa laminar
3. *Zona intermedia de transición*: donde los esfuerzos tanto viscosos como turbulentos son igualmente importantes. El modelo más utilizado para esta zona es el de Deissler para determinar la distribución de velocidades en función de la distancia,  $s$ , a la placa.

### 3.2 Aplicación de los diferentes modelos matemáticos

Se aplicarán diferentes modelos matemáticos, tanto empíricos como semiempíricos, para estudiar el movimiento del fluido en las diferentes regiones. Antes, definiremos unos parámetros adimensionales a partir de las siguientes magnitudes con sus dimensiones

$$\begin{aligned} s &: \text{ distancia a la pared, } [L] \\ \rho &: \text{ densidad, } [ML^{-3}] \\ \tau_0 &: \text{ esfuerzo de la pared, } [ML^{-1}T^{-2}] \\ \mu &: \text{ viscosidad, } [ML^{-1}T^{-1}] \\ u(y) &: \text{ velocidad media, } [LT^{-1}] \end{aligned}$$

Se definen la velocidad adimensional y la distancia adimensional como

$$u^+ = \sqrt{\frac{\rho}{\tau_0}} \quad (3)$$

$$s^+ = \frac{s\sqrt{\tau_0\rho}}{\mu} \quad (4)$$

De esta manera, suponiendo que en la capa límite laminar el perfil es aproximadamente lineal, la solución de la ley de Newton:

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial s} \quad (5)$$

resulta ser, sencillamente:

$$u^+ = s^+ \quad (6)$$

Empíricamente, se determinó que la capa límite laminar se extiende desde  $s^+ = 0$  hasta  $s^+ = 5$ . Si consideramos el espesor de esta capa,  $\delta_{CLL}$ , resulta:

$$\delta_{CLL} = \frac{5\mu}{\sqrt{\tau_0\rho}} \quad (7)$$

Para la zona de régimen turbulento, Prandtl<sup>3</sup> obtuvo que el esfuerzo de corte en el flujo turbulento está dado por:

$$\frac{\tau}{\rho} = k^2 s^2 \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)^2 \quad (8)$$

Con esta expresión y sabiendo que, en el flujo de Couette, el esfuerzo es constante e igual al de la pared, luego de adimensionalizar, se llega a:

$$du^+ = \frac{1}{k} \frac{ds^+}{s^+} \quad (9)$$

Deissler encontró que el mejor valor para  $k$  es 0.36 y que, a su vez, para el borde exterior de la zona de transición puede tomarse satisfactoriamente  $s^+ = 26$  con  $u^+ = 12.8$ . Si tenemos en cuenta estos valores recomendados, al integrar se obtiene:

$$u^+ = 2778 \ln(s^+) + 3.8 \quad (10)$$

Esta ley logarítmica describe bastante satisfactoriamente el flujo lejos de la pared para Reynolds de 6000 en adelante.

Para la región próxima a la pared ( $s^+ \leq 26$ ) Deissler<sup>4</sup> propuso la siguiente expresión empírica:

$$u^+ = \sqrt{65 \int_0^{0.015u^+s^+} \frac{dz}{1+z(1-e^{-z})}} \quad (11)$$

Que puede aproximarse bastante bien con:

$$s^+ = u^+ + 0.11(e^{0.4u^+} - 1 - 0.4u^+ - .08(u^+)^2 - 0.0107(u^+)^2) \quad (12)$$

### 3.3 Cálculo aproximado del esfuerzo de la pared

Para poder aplicar convenientemente estos modelos matemáticos es muy importante disponer de una forma de estimar el esfuerzo de corte de la pared, esto es, la fuerza por unidad de área que la pared le ejerce, en dirección tangencial, al fluido en movimiento.

Para calcular aproximadamente este esfuerzo se disponen de expresiones muy confiables para tubos. Estos resultados pueden utilizarse sin mucho inconveniente para la placa plana ya que, al ser el espesor de estas capas muy delgado, pueden despreciarse los efectos de curvatura.

Haciendo un balance de fuerzas para el flujo en un tubo horizontal de diámetro  $D$  y longitud  $L$  y simplificando un poco se llega a:

$$\tau_0 = \frac{\Delta PD}{4L} \quad (13)$$

<sup>3</sup>L. Prandtl: Z. Angew. Math. Mech., 5, 136 (1925)

<sup>4</sup>R. G. Deissler: Analysis of turbulent heat transfer, mass transfer and friction in smooth tubes at high Prandtl and Schmidt numbers. NACA Report 1210 (1955)

$\Delta P$  puede calcularse con la fórmula de Darcy:

$$\Delta P = \frac{\rho f L u^2}{2D} \quad (14)$$

Y combinándolas se llega a:

$$\tau_0 = \frac{\rho f u^2}{8} \quad (15)$$

En estas últimas expresiones  $f$  es el factor de fricción de Darcy y está dado por la fórmula de Coolbrooke:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left( \frac{\varepsilon}{3.7D} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}} \right) \quad (16)$$

Y aquí,  $\varepsilon$  es la rugosidad relativa de la superficie.

### 3.4 Aplicación del modelo de Couette al caso de la cuba de estañado electrolítico

Para la aplicación del modelo de Couette al caso de la cuba, se harán las siguientes consideraciones:

- Se supondrá, por cuestiones de comodidad, que la cuba está en reposo y el fluido se mueve con una velocidad de bulk,  $u_\infty = \frac{U_0}{2}$ . Esta velocidad se utilizará para estimar los diferentes espesores de las capas.
- Se desprecian los efectos de borde.
- El cálculo del factor de fricción de Darcy se hará considerando un tubo de 1 metro de diámetro y una rugosidad de  $7\Delta 10^{-4}$  mm que es un promedio entre las rugosidades reales. No obstante estos valores no influyen mucho ya que una diferencia de un orden de magnitud producen una variación menor al 2% en el cálculo de  $\tau_0$ . Finalmente, este cálculo varía un poco con el diámetro, pero lo que más nos interesa en este estudio es cómo varía el espesor de las capas con la velocidad y no tanto su valor exacto.

## 4 Resultados

A continuación se tabulan los resultados del cálculo del espesor de la CLL en función de la velocidad de la chapa mediante la ecuación (7). El esfuerzo de corte se obtuvo con la ecuación (15). Puede observarse que la dependencia del espesor de la CLL puede aproximarse con la expresión:

$$\delta_{CLL} = \frac{426.25}{U_0^{0.914}} \quad (17)$$

También se calculó la velocidad en función de la distancia con la fórmula (12) para la zona de flujo laminar y transitorio. En el gráfico puede verse que, para valores de  $s^+ \leq 5$ , el perfil es casi lineal, siendo válida la aproximación  $u^+ = s^+$  y, en esa región, puede suponerse que el flujo es laminar.

Velocidad de la chapa (m/s)	Velocidad de bulk (m/s)	esfuerzo de corte (Pa)	espesor (micras)
2	1	1,78	226
2,5	1,25	2,67	185
3	1,5	3,73	156
3,5	1,75	4,94	136
4	2	6,31	120
4,5	2,25	7,83	108
5	2,5	9,5	98
5,5	2,75	11,31	90

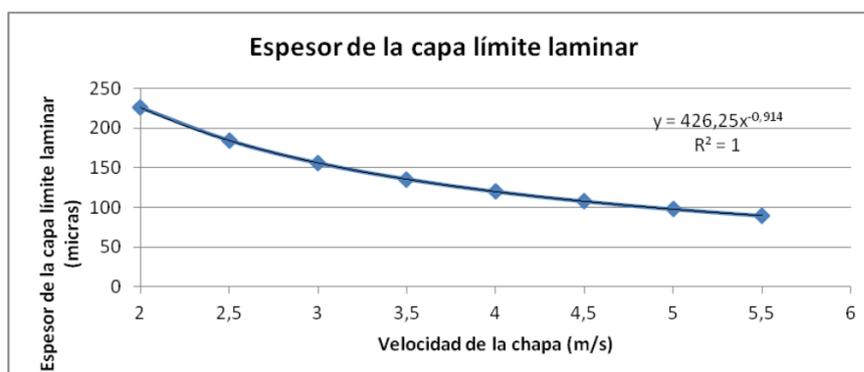


Figura 5: Espesor de capa límite laminar.

## 5 Transferencia de iones de $Sn^{2+}$ del seno de la cuba a la chapa.

Como se ha descrito en la introducción del problema, durante la operación de estañado se pudo determinar que, a bajas velocidades de la chapa, la deposición de estaño resulta defectuosa debido a la abrupta caída del rendimiento electroquímico de la reacción, el cual está definido como la relación entre la corriente transportada por la deposición de iones y la corriente total. La densidad de corriente máxima transportable por los iones  $Sn^{2+}$ , también llamada densidad de corriente límite, disminuye, entonces, como consecuencia de la caída de la velocidad de chapa. En este capítulo se estudiará la transferencia del ión  $Sn^{2+}$  desde el seno turbulento de la cuba a la superficie de la chapa y se intentará establecer una ecuación matemática sencilla que modele el fenómeno.

### 5.1 Modelo de capa límite de concentración.

Análogamente a lo que ocurre con el perfil de velocidad de un fluido cerca de una superficie sólida, el perfil de concentración de una especie que está siendo transferida de la solución a la superficie cambia abruptamente en la región cercana a la misma. En el seno de la solución, la concentración de iones es  $C_{bulk}$  mientras que en la superficie esta concentración es igual a una concentración de interfase,  $C_i$ . Es en esta interfase donde se consumen los iones transportados.

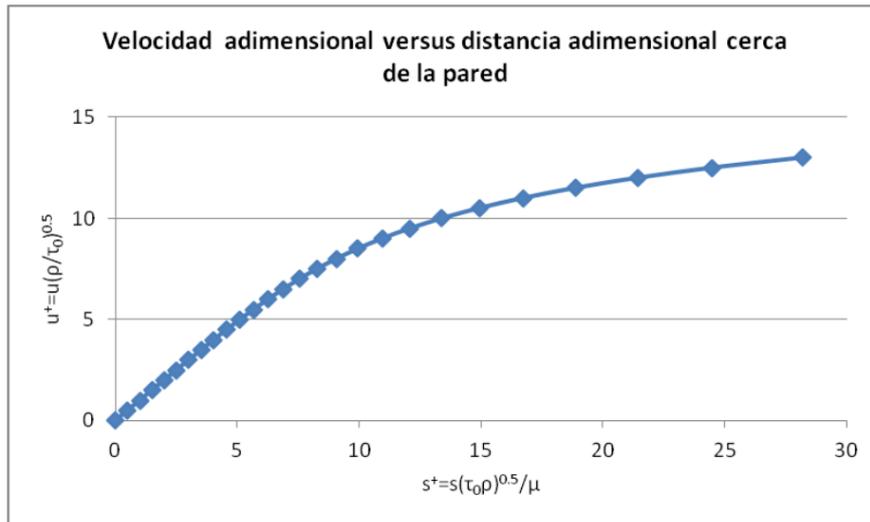


Figura 6: Velocidad vs. Distancia a la pared.

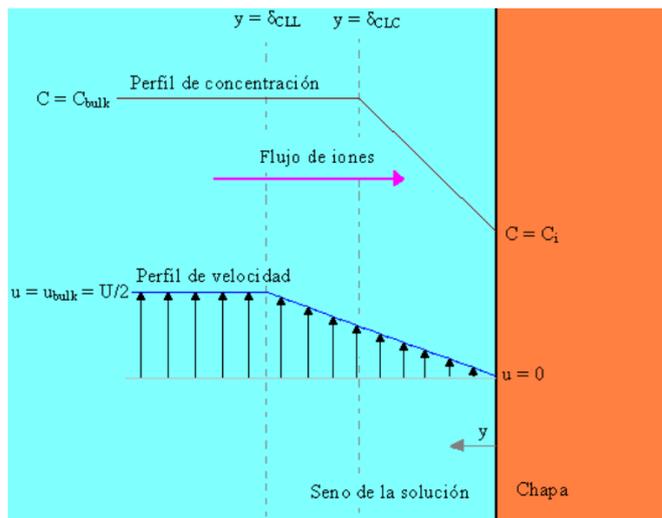


Figura 7: Variación de la concentración de iones según la distancia a la chapa.

Para estudiar este caso, utilizaremos la ley de Fick suponiendo que la única resistencia a la transferencia de masa lo produce una delgada capa, que llamaremos capa límite de concentración (CLC), que se extiende desde  $y = 0$  hasta  $y = \delta_{CLC}$ . Fuera de esa capa, la concentración del ión se considerará uniforme e igual a  $C_{bulk}$ . Despreciando los efectos electrostáticos y convectivos dentro de la CLC en dirección  $y$ , el flujo  $\varphi_y$  en esa dirección está dado por:

$$\varphi_y = -D \frac{\partial C}{\partial y} \tag{18}$$

Y su solución resulta ser, sencillamente,

$$\varphi_y = \frac{D}{\delta_{CLC}}(C_{bulk} - C_i) \quad (19)$$

Multiplicando este flujo por  $nF$  donde  $n$  son los moles de electrones que se transfieren por mol de ión (en nuestro caso  $n = 2$ ) y  $F$  es la constante de Faraday se obtiene la densidad de corriente que se transfiere por la deposición de iones estaño, esto es:

$$J = \frac{nFD}{\delta_{CLC}}(C_{bulk} - C_i) = \frac{2FD}{\delta_{CLC}}(C_{bulk} - C_i) \quad (20)$$

La densidad de corriente **límite** ( $J_L$ ) se define como la densidad de corriente cuando la concentración en el sitio de reacción es cero, es decir  $C_i = 0$ . La corriente límite resulta ser, en ese caso:

$$J_L = \frac{2FD}{\delta_{CLC}}C_{bulk} \quad (21)$$

## 5.2 Dependencia de la corriente límite con la temperatura y la velocidad de la chapa.

Para estudiar esta dependencia, haremos las siguientes consideraciones:

- El espesor de la CLC es igual al de la CLL, es decir  $\delta_{CLC} = \delta_{CLL}$
- El coeficiente difusivo  $D$ , del ión  $Sn^{2+}$  en agua, dependerá exclusivamente de la temperatura y no de la concentración de otras especies.

El coeficiente de difusión  $D$  en función de la temperatura es

$$D(T) = 1.025^{T-T_{ref}} D_0 \quad (22)$$

Donde  $D_0$  es  $1.510 - 9 \text{ m}^2/\text{seg}$  a  $T_{ref} = 20^{\text{deg}}$ . Finalmente reescribiendo la ecuación (21) se llega a:

$$J_L(U, T, C_{bulk}) = \frac{2FD(T)}{\delta_{CLL}(U, T)}C_{bulk} \quad (23)$$

## 6 Resultados

A continuación se muestran los resultados de la densidad de corriente límite para distintas temperaturas, velocidad de chapa y concentración del electrolito:

## 7 Sugerencias para la mejora del control del proceso

Para evitar problemas de calidad, primeramente se debe conocer la influencia de las variables significativas (Concentración, Temperatura, Densidad de Corriente, Velocidad de chapa) sobre los parámetros de calidad (entre ellos el brillo, dependiente de la uniformidad de grano), el presente informe fue un punto de partida para el desglose de los factores influyentes del proceso. Las posibles discrepancias de los resultados obtenidos en este trabajo se deben mayormente a que los

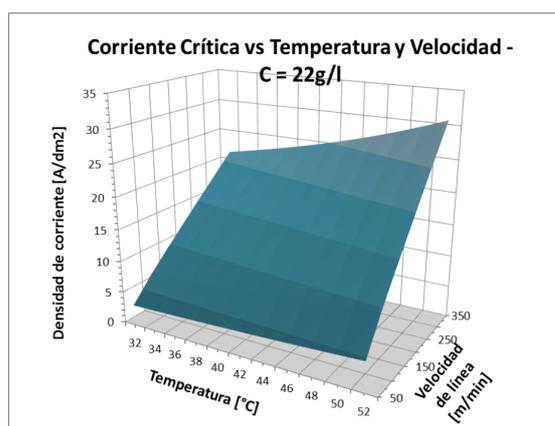


Figura 8: Densidad de corriente límite para  $C_{bulk} = 22$  g/l.

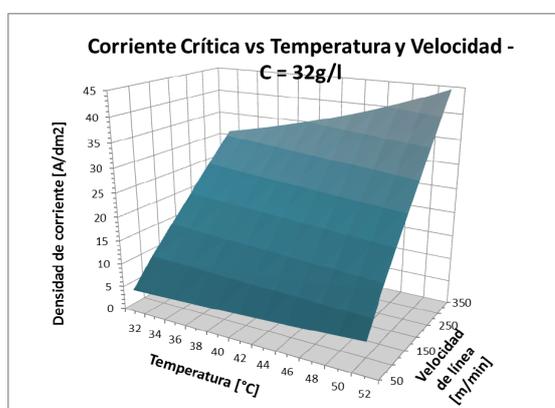


Figura 9: Densidad de corriente límite para  $C_{bulk} = 32$  g/l.

modelos propuestos en la literatura disponible no se adecuan completamente al sistema real en cuestión.

En segundo lugar, es deseable poseer versatilidad para determinar la ventana de proceso específica de cada condición de contorno química (tipo de metal, abrillantador y otras especies disueltas, alimentación de estaño) que influye en muchos casos sobre los mecanismos posibles de electrodeposición y por ende los parámetros de calidad. Un estudio simplificado no tiene en cuenta estos factores, muchas veces de naturaleza específica para cada composición.

Existen maneras de abordar la descripción tanto fluido dinámica como electro química del sistema valiéndose de evidencias empíricas más representativas de las condiciones reales del proceso.

Las técnicas electroanalíticas que se pueden llevar a cabo con electrodos rotatorios<sup>5</sup> y la microscopía electrónica<sup>6</sup> permiten analizar de manera combinada la influencia sobre los parámetros de calidad de factores como la rugosidad, la densidad de corriente y el movimiento relativo cátodo-

<sup>5</sup>Journal of The Electrochemical Society, 147 (3) 1071-1076 (2000)

<sup>6</sup>Journal of The Electrochemical Society, 155 4 D270-D277 2008

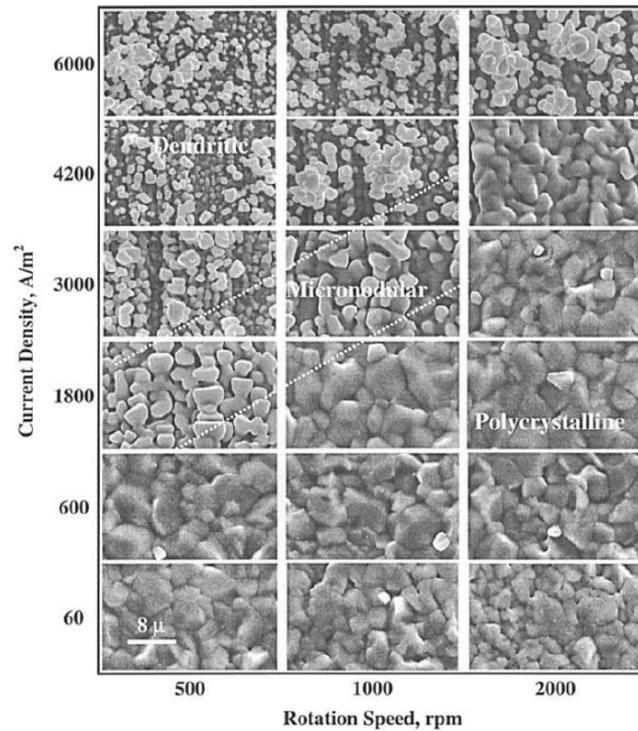


Figura 10: La combinación de técnicas electroanalíticas con microscopía electrónica es una excelente manera de delimitar la calidad del producto, pero se deben efectuar en las condiciones reales de proceso.

fluido.

Dependiendo del grado de precisión con el que se requiera estudiar el proceso a fin de encontrar la robustez de la calidad del producto frente a cambios en las variables significativas se debe poder monitorear con cierta frecuencia. Una planta piloto permite probar a menor escala (por ende de menor riesgo), en condiciones aproximadamente similares, opciones de proceso que pueden aparecer con el avance de la tecnología y otros cambios de coyuntura.

# Metodología para la optimización en la planificación de asignación de tareas a recursos

SIEMENS

**Responsable:** Adrián Allende, SIEMENS

**Participantes:** Gisela Bellisomi<sup>†</sup>, Gastón Bujía<sup>†</sup>, Ximena Fernández<sup>†</sup>, Florencia Fernández Slezak<sup>†</sup>, Analía Ferrari<sup>†</sup>, Eduardo Massacane<sup>‡</sup>, Irina Moldavsky<sup>†</sup>, Ignacio Ojea<sup>†</sup>, Luciana Salvagni<sup>†</sup> y Leandro Yampolsky<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

<sup>‡</sup>Ingeniería - ITBA

## 1 Introducción

Este trabajo se enmarca dentro de los problemas de optimización combinatoria denominados *Job Scheduling*. Los problemas de *Job Scheduling* consisten, típicamente, en planificar la producción de una fábrica, asignando distintas tareas a máquinas de forma tal de minimizar cierta función objetivo vinculada al tiempo necesario para realizar todas las tareas.

Un problema general de *Job Scheduling* tiene los siguientes elementos:

- un conjunto de máquinas  $\mathcal{M} = \{m_k\}_{k=1}^K$ .
- un conjunto de órdenes o pedidos  $\mathcal{O} = \{o_j\}_{j=1}^J$ .
- cada orden está formada por una sucesión de tareas  $o_j = \{t_i^j\}_{i=1}^{I_j}$ .

Cada tarea  $t_i^j$  debe realizarse en un tipo determinado de máquina y su procesamiento tiene una duración conocida  $d_{i,j}$  que depende de la tarea, y por lo tanto de la orden.

El problema consiste en determinar una planificación de la producción, es decir: en construir una función de asignación que nos indique en qué momento debe comenzar cada tarea y en qué máquina, de manera que se cumpla un determinado objetivo.

Existen muchas variantes del problema de *Scheduling*, dependiendo del tipo de objetivo que se persiga y de las restricciones que imponga el tipo de producción.

Entre los distintos objetivos que pueden plantearse tenemos, por ejemplo: minimizar el tiempo total de producción (desde que la primer tarea comienza a procesarse hasta que la última termina); minimizar los tiempos de espera entre una tarea y otra ocasionados por las diferencias en los tiempos de procesamiento; lograr que la última tarea se complete antes de una fecha límite prefijada; etc.

En cuanto a las posibles restricciones, podemos mencionar, por ejemplo, las siguientes: las tareas correspondientes a un mismo pedido pueden tener un orden prefijado (la tarea  $t_1$  debe realizarse antes que la tarea  $t_2$ , etc.), o no; las máquinas pueden estar dispuestas en serie a lo largo de una línea de producción, o puede haber varias máquinas de un mismo tipo distribuidas en paralelo; etc.

Los problemas de *Scheduling*, salvo en algunos casos particularmente simples, pertenecen a la clase de problemas  $\mathcal{NP}$ -Hard. No se conocen algoritmos rápidos (polinomiales) para esta clase de problemas. De hecho: se conjetura que la dificultad de estos problemas es intrínseca y que, por lo tanto, *no es posible* diseñar algoritmos veloces que los resuelvan. Es de esperar, entonces,

que cualquier programa que resuelva un problema de *Scheduling* encontrando el óptimo demande un tiempo demasiado largo como para ser utilizable en la práctica. En particular, el tiempo aumentará como una función exponencial del tamaño del problema, que en nuestro caso sería el número de pedidos más el número de máquinas. Observemos que el número de máquinas está fijo (depende de la planta de producción). Por lo tanto, sólo se podrá encontrar efectivamente la solución óptima cuando se trabaje sobre un ejemplo con pocos pedidos. En caso contrario, cualquier algoritmo que busque la solución óptima tardaría tanto tiempo que no resultaría útil en la práctica. Se hace necesario, entonces, buscar métodos que nos permitan obtener soluciones *buenas* (aunque no sean óptimas), en un tiempo razonable.

## 1.1 El Problema:

El problema planteado por Siemens para el trabajo durante el II TAMI 2012, es un problema de *Scheduling* con las siguientes particularidades:

- Cada pedido está compuesto por una sucesión de tareas a realizar, cuyo orden está prefijado.
- Hay una o más máquinas de una misma clase que pueden realizar una misma tarea. De este modo una tarea  $t$  no está asociada a una única máquina, sino a un conjunto de máquinas. Por lo tanto, una solución del problema deberá indicar no sólo en qué momento comienza a procesarse la tarea, sino también en cuál de todas las máquinas posibles debe realizarse.
- La duración del procesamiento de cada tarea es conocida y depende sólo del tipo de máquina en que se realiza. Es decir: todas las tareas que deban ejecutarse en una máquina de una determinada clase demandarán exactamente el mismo tiempo.
- El tiempo de inicio y el de finalización de la última tarea de cada orden son conocidos.

Las principales restricciones a tener en cuenta son las siguientes:

- (1) **Unicidad:** Cada tarea se realiza en una única máquina, aunque en principio haya varias máquinas capaces de ejecutarla.
- (2) **Precedencia:** Debe respetarse el orden de las tareas de un mismo pedido.
- (3) **Superposición:** Las máquinas sólo pueden realizar una tarea a la vez. Es decir: los tiempos de ejecución de dos tareas distintas no pueden superponerse en una misma máquina.

La función objetivo (aquello que se desea minimizar o maximizar) no estaba determinada, de modo que parte del trabajo del grupo consistió en definirla.

Observemos que el hecho de que el momento de inicio (y, por lo tanto, el de finalización) de la última tarea de cada orden sea conocido nos obliga a buscar una planificación hacia atrás (*backplanning*): partiendo de la última tarea de cada orden, debemos distribuir las tareas anteriores retrocediendo en el tiempo.

Como en el caso general, una solución del problema consiste en una función de asignación que nos indique a qué máquina y en qué instante de tiempo le debemos asignar cada tarea, cumpliendo con las restricciones.

Una forma práctica de exponer una posible solución de un problema de este tipo es un diagrama de Gantt, como el que se muestra en la Figura 1. Un diagrama de Gantt es un cuadro en el que las filas representan las máquinas y las columnas corresponden a las unidades de tiempo. Cada tarea se representa a través de una barra horizontal, dibujada en la fila correspondiente a la máquina en que se realiza y que comienza en la columna de la hora para la cual se programa su realización. La longitud de la barra es la duración de la tarea.

En la Figura 1 se muestra la solución de un ejemplo con cuatro pedidos, cada uno de los cuales consta de 3 tareas. Estas tareas deben ejecutarse en máquinas de tres tipos: *A*, *B* y *C*. Hay una máquina de tipo *A* (*A0*), dos máquinas de tipo *B* (*B0* y *B1*) y una máquina de tipo *C* (*C0*). Las tareas que se realizan en *A* y *C* tienen una duración de 1 hora, mientras que las tareas que deben ejecutarse en *B* duran 1 hora 30 minutos.



Figura 1: Diagrama de Gantt, con 4 máquinas y 4 pedidos.

Una de las principales dificultades de este tipo de problemas es la existencia de *cuellos de botella*. Un *cuello de botella* se produce cuando hay pocas máquinas para realizar un tipo de tarea que demanda un tiempo relativamente largo. En la Figura 2 se muestra un ejemplo como el de la Figura 1, pero con una sola máquina de tipo *B*.

Dado que las tareas que se realizan en *B* son las más largas, al tener una única máquina de esta clase se produce un marcado retraso en la producción. Recordemos que las tareas finales (en *C*) tienen tiempos prefijados. En ambos ejemplos la última tarea finaliza a las 16.00. Explorando los gráficos hacia atrás se observa que en la Figura 1 las órdenes se terminaban de ejecutar en *B* exactamente a la hora en que debían ingresar en *C*; mientras que en la Figura 2 aparecen períodos de espera cada vez más largos; esto obliga a iniciar la producción a las 8.00, cuando en el ejemplo de la Figura 1 podía comenzar a las 10.00.



Figura 2: Diagrama de Gantt, con *cuello de botella*

Naturalmente, el efecto de los cuellos de botella se hacen más marcados cuanto mayor es el número de pedidos.

Por otro lado, en la existencia de cuellos de botella reside la dificultad del problema: si hubiese suficientes máquinas de cada clase, la planificación sería sencilla, puesto que cada tarea podría comenzar inmediatamente luego de concluirse la anterior.

## 2 Objetivos

Para la resolución del problema, los representantes industriales contaban con Quintiq<sup>7</sup>, un software que facilita la toma de decisiones en cuanto a la planificación de la utilización de recursos. Quintiq funciona como una interfaz, que internamente utiliza el programa: IBM ILOG CPLEX CP Optimizer (CPLEX). CPLEX, a su vez, es un software destinado a la resolución de problemas de programación lineal a través del algoritmo *Simplex*, con algunas variantes incorporadas. Por ejemplo: incorpora rutinas de *Branch & Cut* y *Gomory cuts* para poder resolver problemas con variables enteras, y utiliza herramientas de programación convexa para permitir el uso de restricciones cuadráticas, y no sólo lineales como en el *Simplex* clásico.

El primer objetivo planteado al grupo consistió en describir matemáticamente el problema de manera tal que fuera posible resolverlo a través de la combinación entre Quintiq y CPLEX. Concretamente, la primer parte del trabajo consistió en formular el problema utilizando únicamente restricciones lineales.

En una segunda instancia, nos focalizamos en hacer mejoras sobre la función objetivo propuesta, e intentamos reducir al mínimo el número de restricciones a fin de minimizar el tiempo de ejecución del programa.

## 3 Trabajo Realizado

### 3.1 Planteo teórico del problema:

Como señalamos anteriormente, la primer parte del trabajo consistió en plantear el problema de *Scheduling* a través de ecuaciones lineales. Para ello debimos introducir una serie de funciones dato y de variables, teniendo en cuenta las particularidades y las restricciones del problema específico:

Llamamos  $\mathcal{M}$  al conjunto de máquinas. Dado que en  $\mathcal{M}$  hay distintos tipos de máquinas, notamos

$$\mathcal{M} = \{A_1, A_2, \dots, A_{n_a}, B_1, \dots, B_{n_b}, \dots\}$$

donde  $A_i$  es la  $i$ -ésima máquina de tipo  $A$ , etc. De este modo, identificamos la letra  $A$  tanto con la clase de máquinas  $A_i$  como con el conjunto  $\{A_1, \dots, A_{n_a}\}$ . Así:

$$\mathcal{M} = A \cup B \cup C \cup \dots$$

Notamos  $\mathcal{C} = \{A, B, C, \dots\}$  al conjunto de las clases de máquinas.

Llamamos  $\mathcal{T}$  al conjunto de todas las tareas. En general notaremos  $t$  a una tarea cualquiera, independientemente del pedido al que pertenezca. Cuando debamos comparar los tiempos de dos tareas distintas las llamaremos  $t_1, t_2$  aún cuando correspondan a órdenes diferentes. Para cada  $t$ ,  $o_t$  será el pedido al que pertenece  $t$ .

Para cada tarea  $t$ , de una orden cualquiera  $o$ , notamos  $d_t$  a la duración de  $t$  en cualquiera de las máquinas habilitadas para su realización. Observemos que los valores  $d_t$  son datos. Por otra parte llamamos  $S_t$  a la variable que nos indica el momento de inicio de  $t$ . Una planificación

<sup>7</sup>Advanced Planning and Scheduling Software

de la producción consistirá en fijar los valores de  $S_t$  para toda  $t$ . Observemos que el momento de finalización de la tarea  $t$  está dado por:

$$E_t = S_t + d_t.$$

Dado que una misma tarea puede realizarse en diferentes máquinas, definimos la función  $Máquinas : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{C}$ .  $Máquinas(t)$  nos devuelve la clase de máquina en que debe realizarse  $t$ . El valor de  $Máquinas(t)$  es un dato.

Inversamente, definimos la función  $Tareas : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{T}$ , que para cada máquina  $m$  nos devuelve las tareas que  $m$  puede realizar.

Recordemos que las tareas de un mismo pedido deben realizarse consecutivamente, según un orden prefijado. Este dato lo introducimos a través de la función  $Siguiente(t)$  que nos dice cuál es la tarea que sigue a  $t$  en su correspondiente pedido. Dado que la última tarea de cada orden tiene un tiempo de inicio conocido, para cada pedido  $o$  distinguimos esta tarea con la función  $Última(o)$  que nos da la última tarea de la orden. Asimismo,  $Primera(o)$  será la primera tarea del pedido  $o$ .

Dado que la clase  $Máquinas(t)$  puede contener más de una máquina, necesitamos una variable que nos permita distinguir a cuál de ellas le asignamos efectivamente la tarea  $t$ . Así, para cada  $t$  y para cada  $m$  en  $Máquinas(t)$  definimos las variables binarias

$$A_{t,m} = \begin{cases} 1 & \text{si } t \text{ se realiza en la máquina } m \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad \forall m \in Máquinas(t).$$

Finalmente, para atender a la restricción de superposición, nos fue necesario introducir un nuevo conjunto de variables: para cada par de tareas  $t_1, t_2$  tales que  $Máquinas(t_1) = Máquinas(t_2)$ , definimos la variable binaria  $Pre_{t_1,t_2}$  que nos indicará si la tarea  $t_1$  precede a  $t_2$ . Es importante remarcar que esta variable existe aún cuando  $t_1$  y  $t_2$  no sean asignadas a una misma máquina. En la práctica la variable  $Pre_{t_1,t_2}$  sólo tendrá un significado concreto si  $t_1$  y  $t_2$  se procesan en la misma máquina. Cuando esto no suceda,  $Pre_{t_1,t_2}$  carecerá de sentido. Naturalmente, esto implica incorporar al programa una cantidad de variables que resultarán, al cabo de su ejecución, *mudas*, inútiles. Esto es inevitable en la medida en que no está unívocamente determinado en qué máquina se realizará cada tarea.

### 3.2 Restricciones:

#### (1) Asignación:

La primera restricción puede escribirse fácilmente a través de las ecuaciones lineales:

$$\sum_{m \in Máquinas(t)} A_{t,m} = 1 \quad \forall t \in \mathcal{T}.$$

Como las variables  $A_{t,m}$  son definidas como binarias, el único modo de satisfacer esta restricción es que una única  $A_{t,m}$  sea igual a 1, y las restantes 0. Es decir:  $t$  es asignada a una única máquina.

#### (2) Precedencia:

La segunda restricción, por su parte, puede escribirse como:

$$S_{Siguiente(t)} - S_t \geq d_t \quad \forall t \in \mathcal{T} \quad t \neq Última(o_t).$$

Es decir: El momento de inicio de la tarea que sigue a  $t$  debe ser mayor que el momento de inicio de  $t$  más su duración  $d_t$ .

(3) **Superposición:**

El principal objetivo de las variables  $Pre_{t_1,t_2}$  es indicar cuándo una tarea se realiza antes que la otra. Para ello definimos  $Pre_{t_1,t_2}$  como una variable binaria. Nuestro objetivo es que  $Pre_{t_1,t_2}$  sea 1 cuando  $t_1$  precede a  $t_2$  y 0 en caso contrario. Para ello debimos imponer las siguientes restricciones, que rigen para todo par de tareas  $t_1, t_2$  tales que  $Máquinas(t_1) = Máquinas(t_2)$ :

$$\begin{aligned} Pre_{t_1,t_2} + Pre_{t_2,t_1} &= 1, \\ S_{t_2} - S_{t_1} &\leq K \cdot Pre_{t_1,t_2}. \end{aligned}$$

$K$  es un número fijado de antemano, cuyo valor debe ser lo suficientemente grande como para exceder holgadamente cualquier planificación razonable. Por ejemplo: si se desea planificar la producción de unos días, se puede fijar el valor de  $K$  en un año.

De esta manera, la primera restricción garantiza que las variables  $Pre$  opuestas tengan valores complementarios: si  $Pre_{t_1,t_2} = 1$ , entonces  $Pre_{t_2,t_1} = 0$ , y viceversa.

Por otro lado: si la tarea  $t_1$  comenzó antes que la tarea  $t_2$  entonces  $S_{t_2} > S_{t_1}$ , y por lo tanto la segunda restricción dice:

$$0 < S_{t_2} - S_{t_1} \leq K \cdot Pre_{t_1,t_2}.$$

Luego  $Pre_{t_1,t_2}$  no puede ser 0. Se observa que es crucial el rol del parámetro  $K$ , puesto que estamos comparando una variable binaria con la resta de dos variables continuas. Para garantizar que la variable  $Pre_{t_1,t_2}$  tome el valor 1 es necesario multiplicar por un tiempo suficientemente grande. Si  $K$  no estuviera,  $S_{t_2} - S_{t_1}$  podría tomar valores mayores que 1 y la restricción no se cumpliría nunca.

Si, en cambio, la tarea  $t_1$  comenzó después que la tarea  $t_2$ , entonces  $S_{t_1} \geq S_{t_2}$  y por lo tanto la segunda inecuación dice:

$$S_{t_2} - S_{t_1} \leq K \cdot Pre_{t_1,t_2}$$

donde  $S_{t_2} - S_{t_1}$  es cero o negativo. En este caso la restricción está inactiva, puesto que  $K \cdot Pre_{t_1,t_2}$  siempre tomará valores mayores o iguales a 0. Sin embargo, considerando la restricción simétrica:

$$S_{t_1} - S_{t_2} \leq K \cdot Pre_{t_2,t_1}$$

y haciendo un razonamiento análogo al anterior se puede ver fácilmente que:

$$Pre_{t_2,t_1} = 1, \quad Pre_{t_1,t_2} = 0.$$

Finalmente, podemos abordar la condición de superposición. La dificultad del modelado de esta restricción radica en el hecho de que, en principio, es una restricción condicional: dadas dos tareas  $t_1$  y  $t_2$ , debemos garantizar que  $t_2$  se inicie luego de finalizada  $t_1$  (o viceversa) sólo si  $t_1$  y  $t_2$  se ejecutan en la misma máquina. Aquí utilizamos nuevamente el parámetro  $K$  para lograr este comportamiento condicional a través de inecuaciones lineales. Propusimos el siguiente conjunto de restricciones, que se toman para todos los pares de tareas  $t_1$  y  $t_2$  tales que  $Máquinas(t_1) = Máquinas(t_2)$ :

$$S_{t_1} + d_{t_1} - S_{t_2} \leq K \cdot (1 - Pre_{t_1,t_2} + 2 - A_{t_1,m} - A_{t_2,m}).$$

El miembro izquierdo es la diferencia entre el momento de finalización de  $t_1$  y el comienzo de  $t_2$ . Si las tareas  $t_1$  y  $t_2$  son asignadas a la máquina  $m$  (i.e.:  $A_{t_1,m} = A_{t_2,m} = 1$ ) y la tarea  $t_1$  comienza antes que la tarea  $t_2$  (i.e.  $Pre_{t_1,t_2} = 1$ ) el miembro derecho se hace 0 y por lo tanto se tiene que  $S_{t_1} + d_{t_1} - S_{t_2} \leq 0$  lo que implica que la tarea  $t_2$  empieza después de terminada la tarea  $t_1$ .

Lo importante es que esta restricción está activa cuando las tres variables del lado derecho son 1. En cualquier otro caso, el miembro derecho estará dado por  $K$  multiplicado por un entero positivo y será, por lo tanto, muy grande. Así, la restricción pasa a estar inactiva, puesto que se cumple siempre, para todo posible valor de  $S_{t_1}$  y  $S_{t_2}$ .

### 3.3 Función objetivo:

El primer objetivo que planteamos fue una variante del objetivo clásico, ajustada a las circunstancias de nuestro problema. Dado que la última tarea de cada orden tiene un tiempo de inicio prefijado, la forma natural de minimizar el tiempo total de producción consiste en maximizar el tiempo de inicio de la primera tarea en ser ejecutada. Para ello, introducimos una variable  $Y$  sujeta a las restricciones

$$Y \leq S_{Primera(o)} \quad \forall o \in \mathcal{O}$$

y fijamos como objetivo

$$\max Y.$$

Las soluciones obtenidas con esta función objetivo no fueron satisfactorias porque el algoritmo desordenaba los pedidos, respecto del orden establecido para sus tareas finales. De este modo, el pedido que debía terminar último, podía ser el primero en comenzar. Esta clase de soluciones, si bien resultan óptimas respecto del tiempo total de producción, no son útiles en la práctica, puesto que implican que un pedido deba permanecer en espera durante mucho tiempo entre una tarea y otra. Teniendo esto en mente, buscamos alternativas que buscaran minimizar los tiempos de espera.

Esto lo logramos, en principio, a través del objetivo:

$$\min \sum_{o \in \mathcal{O}} \sum_{t \in o: t \neq \text{Última}(o)} [S_{Siguiete(t)} - (S_t + d_t)].$$

Los resultados aún no fueron del todo satisfactorios por lo que optamos por aumentar el peso de las dispersiones grandes elevando los términos de la suma al cuadrado, aprovechando que el CPLEX admite funcionales cuadráticos:

$$\min \sum_{o \in \mathcal{O}} \sum_{t \in o: t \neq \text{Última}(o)} [S_{Siguiete(t)} - (S_t + d_t)]^2.$$

Aún así continuamos observando algunos tiempos de espera innecesariamente largos. Además, observamos algunas lagunas en la actividad de las máquinas. Por otro lado, los tiempos de ejecución del programa para instancias grandes resultaban demasiado largos. Este inconveniente, como señalamos en la introducción, es intrínseco del problema de *Scheduling*. Sin embargo, al no contar con información detallada acerca de los algoritmos utilizados por CPLEX para manipular funcionales cuadráticos, no sabíamos si una función objetivo de este tipo podía contribuir a aumentar el tiempo de procesamiento.

Decidimos, por lo tanto, introducir un objetivo del tipo:

$$\min_{o \in \mathcal{O}} \max_{t \in o: t \neq \text{Última}(o)} S_{Siguiete(t)} - (S_t + d_t).$$

Es decir, buscamos minimizar el máximo tiempo de espera. Este funcional, de tipo *minimax*, no puede ser utilizado en CPLEX de esta forma, de modo que fue necesario linealizado. Para ello definimos una variable  $Z$  que se encarga de estimar el máximo tiempo de espera sobre todas las órdenes. Para garantizarlo, agregamos las restricciones

$$Z \geq S_{Siguiente(t)} - (S_t + d_t) \quad \forall t \in o : t \neq Ultima(o) \quad \forall o \in \mathcal{O}.$$

De este modo el objetivo quedaba sencillamente:

$$\min Z.$$

El defecto de este funcional es que pierde de vista el objetivo central del problema, que es minimizar el tiempo total de producción. Si la estructura de una instancia obliga al pedido  $o$  a tener un cierto tiempo de espera, el algoritmo tiene libertad para generar soluciones en las que los *otros* pedidos tengan tiempos de espera igualmente largos, aumentando el tiempo de procesamiento total, pero sin modificar el funcional. Así, nos encontramos con que en ejemplos relativamente simples, obteníamos soluciones cuyo tiempo total de producción era inaceptablemente largo.

Finalmente, optamos por recuperar el funcional original, pero incorporándolo a esta última idea, de modo que jugara el papel de una función de penalidad sobre el objetivo de minimizar el máximo tiempo de espera. Así, volvimos a introducir la variable  $Y$  con sus correspondientes restricciones y planteamos:

$$\min Z - Y.$$

De esta manera, si pensamos que el valor de  $Z$  está fijo y dado por un pedido cuya distribución no puede mejorarse, de entre todas las soluciones que tienen ese mismo valor de  $Z$  el algoritmo procurará encontrar aquella que tenga un mayor valor en  $Y$ , es decir, aquella que comience más tarde el proceso de producción.

Los mejores resultados que conseguimos fueron obtenidos con este funcional, que consideraremos, a los fines de este informe, *definitivo*. Tanto las rutinas de *postprocesamiento* de las que hablaremos luego como los resultados presentados corresponden a esta función objetivo.

### 3.4 Tiempo de Ejecución y Uso de Memoria

Como señalamos en la introducción, nuestro problema pertenece a la clase  $\mathcal{NP}$ -Hard. El algoritmo *Simplex*, utilizado por CPLEX, busca la solución óptima del problema y, en principio, sólo se detiene cuando la encuentra. Esto hace que, para ejemplos con un gran número de pedidos, el tiempo de ejecución sea realmente largo, haciendo imposible la aplicación del algoritmo en casos reales. Esta situación se agrava en presencia de *cuellos de botella*. Por ejemplo: corriendo CPLEX con nuestras restricciones sobre ejemplos con 30 pedidos *sin* cuellos de botella, el óptimo se encuentra en menos de un segundo; mientras que eliminando una máquina y forzando la aparición de un cuello de botella el tiempo de ejecución puede superar la media hora.

Otro inconveniente que surgió fue que en algunas instancias grandes el algoritmo colapsaba por falta de memoria. Es decir: requería para su funcionamiento mayor memoria que la disponible en la computadora. Esto tiene que ver, fundamentalmente, con las rutinas que CPLEX utiliza para manejar variables enteras. Por ejemplo: las técnicas de *Branch & Cut*, consisten en construir soluciones parciales que se van ramificando como un árbol. Algunas de estas soluciones parciales son descartadas porque el algoritmo estima que no conducirán a una solución óptima. Sin embargo, en algunos casos puede ser necesario almacenar en memoria gran cantidad de soluciones parciales.

Tanto los problemas de memoria, como los tiempos de ejecución excesivamente largos están vinculados a la dificultad intrínseca del problema. Por ello es necesario diseñar algoritmos

*heurísticos* que finalicen en un tiempo aceptable, encontrando una solución suficientemente *buen*a para los requerimientos industriales.

CPLEX permite configurar una serie de parámetros que fuerzan al algoritmo a detenerse antes de encontrar el óptimo, devolviendo la mejor solución hallada hasta el momento. Las opciones con las que trabajamos son: fijar un tiempo límite al cabo del cual el algoritmo se detiene; fijar un número máximo de iteraciones; fijar un número máximo de nodos. Las primeras las utilizamos para garantizar soluciones rápidas, mientras que la última limita el tamaño del árbol de *Branch & Cut* y, por lo tanto, nos permitió eliminar los inconvenientes por exceso de demanda de memoria. Manipulando estos parámetros conseguimos soluciones aceptables en tiempos controlados, aunque siempre en ejemplos relativamente pequeños.

### 3.5 Postprocesamiento

Una de las principales dificultades que encontramos luego de realizar el planteo del problema es que en la práctica se desean controlar muchos aspectos que nuestro planteo matemático preliminar no tenía en cuenta. Por ejemplo: si bien el objetivo principal es maximizar el momento de inicio de la producción, es deseable además respetar el orden de los pedidos, prefijados a través de los momentos de inicio de sus últimas tareas. Por otra parte, cuando hay dos máquinas de una misma clase también es deseable que, en caso de ser posible, el algoritmo concentre todas las tareas de una única máquina, dejando la otra libre. Esto es útil en la práctica porque le indica al operario que puede liberar una máquina para realizar tareas de mantenimiento. Finalmente, un inconveniente particular que observamos con nuestro funcional definitivo es que algunas tareas intermedias podrían programarse para un tiempo *superior* al dado por el *Simplex*. Esto no modificaría el valor del funcional ni alteraría el tiempo de inicio de la producción pero aún así sería bueno, porque permitiría retrasar lo más posible algunas etapas de la producción.

Todos estos detalles que no hacen al objetivo principal no son fáciles de manejar con el algoritmo *Simplex*. La manera natural de incorporarlos es a través de restricciones. Sin embargo, agregar restricciones implica, por lo general, agregar variables auxiliares, lo cual incrementa el tamaño del problema, aumentando los tiempos de ejecución y la demanda de memoria. Por lo tanto, en lugar de sumar restricciones optamos por complementar el *Simplex* con un *postproceso* que corrija los pequeños defectos que se detecten en la solución.

Al momento de la redacción de este informe se implementó una única rutina de postproceso, que simplemente retrasa, cuando es posible, el tiempo de inicio de cada tarea.

## 4 Resultados

A continuación mostramos las soluciones obtenidas con el funcional definitivo y con postproceso para retrasar tareas, para dos ejemplos. En ambos casos hay 20 pedidos, cada uno de los cuales está formado por tres tareas que deben realizarse respectivamente en tres clases de máquinas: *A*, *B* y *C*. Las máquinas *A* tardan 40 minutos en realizar sus tareas; las máquinas *B*, una hora y diez minutos, y las máquinas *C* una hora.

En la Figura 3 se muestra la solución a este ejemplo con una máquina de tipo *A*, dos máquinas de tipo *B* y una de tipo *C*. Dado que las tareas más largas son las correspondientes a las máquinas *B*, esta instancia no presenta cuellos de botella.

En la Figura 4 los datos de los pedidos son los mismos, pero hay una sola máquina de cada clase, produciéndose un cuello de botella en *B*.

Es importante observar que al utilizar un funcional que procura minimizar el *máximo* tiempo de espera, el algoritmo no desordena los pedidos.

En ambos casos la solución obtenida es óptima y el tiempo de ejecución es inferior al segundo.

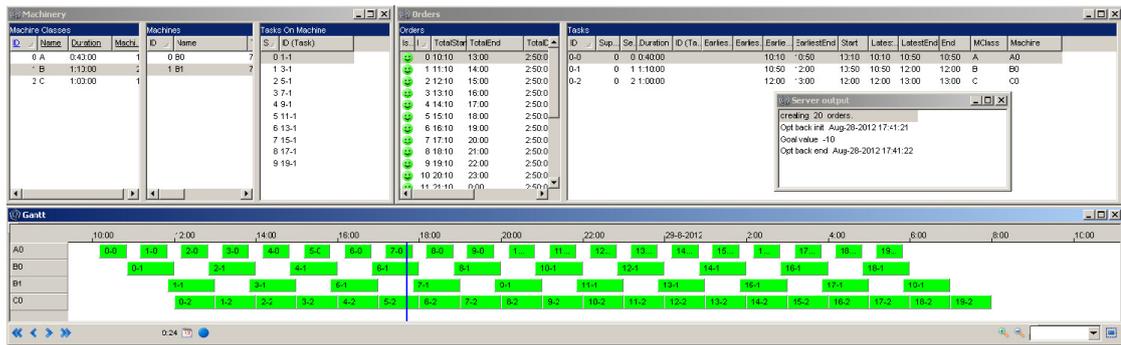


Figura 3: 20 pedidos de tres tareas, sin cuello de botella.

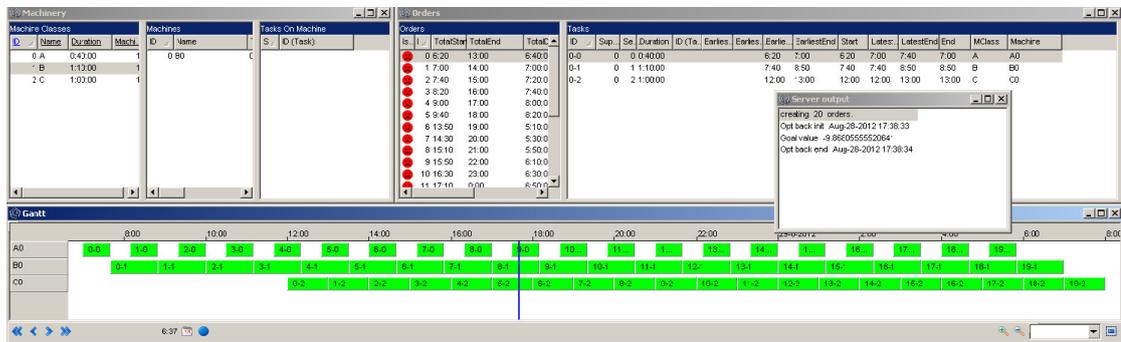


Figura 4: 20 pedidos de tres tareas, con cuello de botella.

## 5 Conclusiones

Durante el TAMI logramos plantear matemáticamente el problema en términos únicamente de restricciones lineales, admisibles en el algoritmo *Simplex*. Además, exploramos y discutimos algunos de los inconvenientes que presenta la utilización de un método general como el *Simplex*, en particular en cuanto a los requerimientos prácticos respecto de la *estructura* de la solución, más allá del valor óptimo del funcional. Estudiamos algunas estrategias para resolverlos y conseguimos algunos resultados parciales promisorios.

En general, los resultados obtenidos fueron muy satisfactorios para pedidos pequeños: la solución óptima (según nuestro funcional) se alcanza rápidamente y, con el agregado del postproceso, la estructura de la solución satisface las necesidades prácticas de la industria.

Para pedidos grandes, en cambio, el algoritmo demanda un tiempo extremadamente largo para alcanzar el óptimo y, en ocasiones, colapsa por falta de memoria. Como comentamos oportunamente, para eludir estos problemas debimos fijar los parámetros de CPLEX para forzar la salida anticipada del programa y para restringir el uso de memoria. Esto hace que las soluciones dadas por el algoritmo no sean óptimas. Si bien obtuvimos algunos resultados preliminares aceptables, no nos fue posible realizar suficientes experimentos con datos provenientes de ejemplos reales como para poder asegurarnos que las soluciones sean suficientemente buenas en los casos de interés.

## 6 Trabajo Futuro

Dado que los resultados obtenidos sobre ejemplos sencillos fueron prometedores, sería necesario realizar experimentos con la mayor cantidad de datos reales que sea posible, de modo de verificar si las soluciones siguen siendo satisfactorias en esos casos. Además, estas pruebas podrían servir para detectar inconvenientes que hasta ahora hayan pasado desapercibidos.

Es importante observar que en CPLEX el uso de variables binarias fuerza la aplicación de métodos del tipo *Branch & Cut*, que incrementan tanto el tiempo de ejecución como la demanda de memoria. Sería interesante, por lo tanto, estudiar la posibilidad de reducir el número de variables binarias involucradas en el planteo del problema.

Por otra parte, sería importante incorporar al programa nuevas rutinas de postprocesamiento. Una de ellas, por ejemplo, podría utilizarse para conseguir que cuando haya más de una máquina de una clase la solución utilice el menor número posible de ellas, de modo de indicar cuándo una máquina puede dejarse ociosa.

Otro aspecto a tener en cuenta es que si bien en la solución cada tarea tiene fijado un tiempo de inicio, muchas veces este podría modificarse ligeramente sin alterar los tiempos del resto de las tareas; esto hace que, en rigor de verdad, exista una *franja* de tiempo (y no un instante preciso) en la que la tarea puede iniciarse. Conocer esta información es de suma utilidad para los operarios de la planta, puesto que les permite hacer pequeñas correcciones sobre la marcha, teniendo en cuenta distintas situaciones imprevisibles (retraso en la llegada de la materia prima, retraso en el tiempo de procesamiento de una máquina, avería de una máquina, etc.). Otra rutina de postproceso podría, por lo tanto, estar destinada a detectar estas *franjas* para mejorar la calidad de la información arrojada por el algoritmo.

## Referencias

- [1] Puddu, Susana; Investigación Operativa, Apuntes de clase.
- [2] Papadimitrou, C.H. y Steiglitz, K.; Combinatorial Optimization - Algorithms and Complexity; Dover; 1998.
- [3] Garey M.R. y Johnson D.S.; Computers and Intractability, a guide to the theory of  $\mathcal{NP}$ -Completeness; Freeman and Company; 1979.



# Mapeo automático y generación de mapas a partir de información de pozos petroleros

WINTERSHALL

**Responsable:** David Curia, WINTERSHALL

**Participantes:** Marcela Álvarez<sup>‡</sup>, Sonia Beratz<sup>‡</sup>, Gisela Charó<sup>†</sup>, René Elencwajg<sup>§</sup>, Manuel Maurette<sup>†</sup>, Claus Rosito<sup>‡</sup>, Ezequiel Sosa<sup>#</sup> y Abigail Stein<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

<sup>‡</sup>UNS

<sup>§</sup>IAM

<sup>‡</sup>FI - UBA

<sup>#</sup>UTN

**Propuesta inicial** Desarrollar un algoritmo-programa para generar mapas usando información de pozos, considerando la posible existencia de discontinuidades (fallas), evaluando la posible posición y extensión de las mismas.

## 1 Introducción

La exploración petrolera es una actividad cuyo objetivo es la localización de posibles yacimientos de hidrocarburos y la estimación de sus reservas potenciales. La exploración petrolera reúne información de distintas fuentes para evaluar el potencial de las rocas presentes en la zona del estudio para producir, almacenar y atrapar hidrocarburos.

Los pozos petroleros proveen información de mayor exactitud que la accesible mediante la información sísmica pura. Esta puede consistir en pases o *markers* indicativos de las profundidades de distintos reflectores, atributos geofísicos (velocidades, impedancia acústica, etc.). Esta información es rara vez continua en toda la región. Generalmente se presentan discontinuidades conocidas como fallas, que interpoladas, definen los llamados polígonos de fallas. Estimar correctamente la posición y extensión de estas fallas es muy importante para delimitar extensiones de yacimientos, posibles trampas de hidrocarburos etc. También permite una interpolación-extrapolación de la información con mayor exactitud. A su vez, por tratarse de información confiable, se usa para calibrar mapas generados mediante la interpretación sísmica. Es decir, ajustar los mapas sísmicos a los valores de los medidos en los pozos. Pero ambos deben ser coherentes en cuanto a la definición y ubicación de las fallas.

### 1.1 Mapeo Automático

Una superficie es el gráfico de una función  $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  y está contenido en  $\mathbb{R}^3$ . Simbólicamente se representa como  $z = f(x, y)$ . El elemento central que se utiliza para representar una superficie en un plano es la Curva de Nivel (o Isolínea), es decir la línea que conecta puntos con igual valor  $z = f(x, y)$ . Un grupo de Curvas de Nivel a una Equidistancia adecuada constituye una representación gráfica de la Superficie o un Mapa de Isolíneas. Cualquier superficie se puede representar gráficamente como un mapa de isolíneas. El mapa topográfico genera una vista en el plano de la superficie, es decir, reduce la dimensionalidad y permite una visualización rápida y sencilla. El término Mapeo Automático se utiliza para referirse al proceso de generar por medio

de procesos computacionales uno de tales mapas. Es relativamente sencillo generar las Curvas de Nivel a partir de un muestreo regular sobre una Grilla. Una Grilla es una cuadrícula regular de la forma:

$$Grilla := \{(n\Delta x + x_0, m\Delta y + y_0)\}_{n,m=0}^{n=N, m=M}.$$

En donde  $(x_0, y_0)$  corresponde al primer nodo (empezando de abajo y de la izquierda),  $\Delta x$  y  $\Delta y$  corresponden a la distancia entre cada nodo en cada coordenada y  $N, M$  son la cantidad de nodos en cada dirección.

Ahora bien, en la práctica, el muestreo se realiza sobre puntos de distribución irregular, de modo que el problema central de Mapeo Automático es:

*Estimar el valor  $z = f(x, y)$  sobre cada nodo de una Grilla regular a partir de un muestreo irregular.*

En términos matemáticos, este problema puede formularse de la siguiente manera: Suponiendo que se tiene una muestra de una variable  $z$  tomada en diferentes posiciones  $(x^k, y^k)$ ,  $z^k$ , dentro de un dominio dado. El problema a resolver es, entonces, la generación de un estimador del valor de  $z = f(x, y)$ , para cualquier  $(x, y)$  nodo de una Grilla regular, utilizando la información de la muestra  $\{z^k\}_{k=1}^N$ . El conjunto de elementos de la muestra se denomina Puntos de Control.

La mayoría de los algoritmos utilizan promedios pesados de los puntos de control para cada nodo de la grilla, es decir:

$$Z^*(x, y) = \sum_{k=1}^N w_k z^k.$$

El algoritmo más sencillo es utilizar la inversa de la distancia como peso, es decir:

$$Z^*(x, y) = \sum_{i=1}^N \frac{z^k}{d((x, y), (x^k, y^k))}.$$

Planteamos aquí los dos primeros Problemas propuestos por David Curia, de Wintershall que sirvieron de motivación para la participación en el taller.

**PROBLEMA 1:** Proponer mejoras a este algoritmo.

Los puntos de control rara vez representan una superficie continua en toda la región. Generalmente se presentan discontinuidades conocidas como fallas, que interpoladas, definen los llamados trazas de fallas. Estimar correctamente la posición y extensión de estas fallas es muy importante para representar correctamente un mapa topográfico.

En general dos muestras 'cercanas geográficamente' tienen mayor correlación que dos muestras lejanas, de modo que una evidencia de la existencia de una falla es que muestras cercanas tengan valores muy diferentes:

$$(x^{k_1}, y^{k_1}), (x^{k_2}, y^{k_2}) \in \{(x^k, y^k)\}_{k=1}^N, \text{ si } d((x^{k_1}, y^{k_1}), (x^{k_2}, y^{k_2})) < \epsilon \text{ y } |z^{k_1} - z^{k_2}| > \kappa.$$

**PROBLEMA 2:** Extender el algoritmo anterior de modo de generar el mapa considerando la posible existencia de discontinuidades (fallas), evaluando la posible posición y extensión de las mismas.

## 1.2 Exploración Petrolera y Geometría Computacional

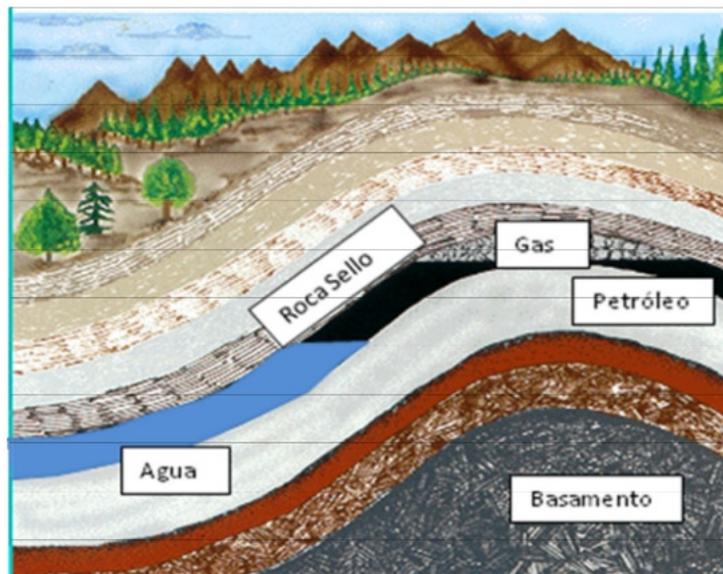


Figura 1: Esquema que muestra Roca Sello, Roca Reservorio y Trampa Petrolera

A continuación describimos el esquema general de un yacimiento: las rocas productoras son las que contienen material orgánico atrapado y que ha producido hidrocarburos por procesos de alta temperatura y presión dentro de la tierra. Las rocas reservorio son las rocas que permiten almacenar hidrocarburos en los espacios porales. Los hidrocarburos se encuentran en trampas, que están compuestas por una estructura y una roca sello (Ver Figura 2).

En exploración petrolera la construcción de mapas de Isolíneas es de práctica diaria. Los Mapas Estructurales Superficie, que representan la profundidad a la que se encuentra el objetivo geológico, se construyen tanto con información indirecta (por ejemplo sísmica de reflexión) como

con datos directos (por ejemplo perforaciones anteriores). Estos y otros mapas son herramientas básicas para estimar las reservas de un yacimiento de hidrocarburos.

La Figura 2 muestra un mapa estructural al tope del objetivo geológico. Las curvas de nivel cerradas muestran una trampa que podría contener hidrocarburos, la zona roja sería de gas y la amarilla de petróleo. Un requisito básico para estimar la cantidad de hidrocarburo contenida en la trampa es conocer el área de ambas zonas. Este es un típico problema de Geometría Computacional.

La geometría computacional se ocupa del diseño y análisis de algoritmos de computación, para resolver problemas de tipo geométrico. La clase de objetos estudiados, serán los puntos del plano, definidos mediante sus coordenadas cartesianas y las figuras que un conjunto de estos puedan formar (rectas, triángulos, polígonos, etc.). A continuación los últimos dos problemas propuestos por el representante de la industria.

**PROBLEMA 3:** Dado un mapa estructural, calcular el área del interior de un polígono incluido en él.

**PROBLEMA 4:** Suponiendo que en el Problema 2, se ha definido una traza de falla con extensión infinita, entonces el mapa topográfico se puede dividir en dos hiperplanos. Dado un punto interior al mapa topográfico, se pide formular un algoritmo para determinar a cual hiperplano pertenece.

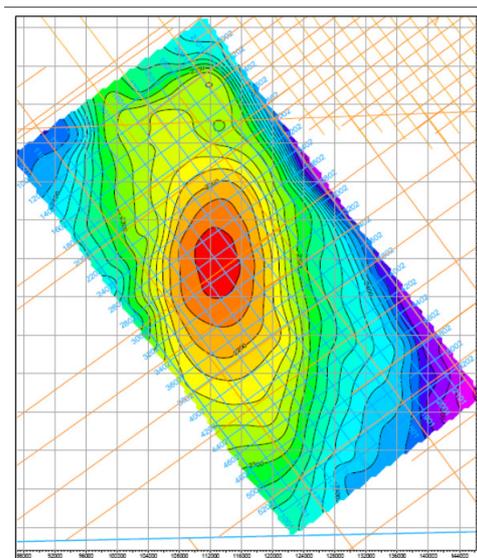


Figura 2: Mapa estructural de un objetivo petrolero en el subsuelo

### 1.3 Marco Geológico

El área geográfica de estudio se encuentra en la cuenca Somuncura-Cañadón Asfalto, definida como una cuenca de origen intracratónico o en posición de retroarco, desarrollada a partir del Triásico Superior-Jurásico. La misma está ubicada en el sector central de la Patagonia septentrional (ver Figura 3). Sus límites están conformados por el macizo Nordpatagónico al norte, la dorsal Concepción ó Chubut al oeste y el alto Río Chico-Sierra Grande al este, elementos que la separan de las cuencas Neuquina, Colorado, Valdés-Rawson, Golfo de San Jorge y Ñirihau, respectivamente. El origen de la cuenca está asociado a la fragmentación de Gondwana durante el Jurásico- Cretácico Temprano, con un relleno de cuenca que representa las distintas etapas de evolución de una cuenca de rift-postrift. En una etapa más reciente, la región fue afectada por esfuerzos compresivos de edad terciaria cuya mayor expresión parece coincidir con los movimientos andinos. De esta manera, sobreponiendo al estilo extensional previo, una compresión que habría generado en algunos casos, reactivación de las fallas con desplazamiento inverso u oblicuo. Fallas de rumbo NO y NE afectan al basamento sedimentario del área, constituido por las volcanitas jurásicas de la Formación Marifil como puede verse en la Figura 4. Para un estudio geológico más profundo, ver [2], [3] y [1].

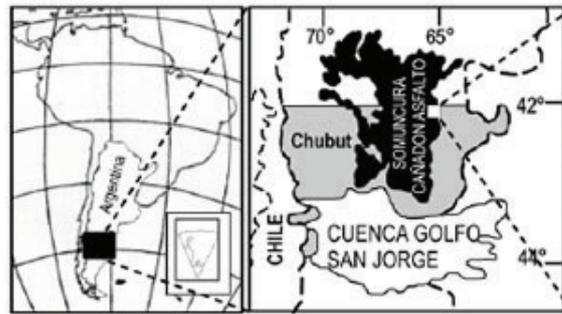


Figura 3: Mapa de ubicación de los afloramientos del Grupo Chubut que contienen el intervalo fracturado del sector estudiado, Cuenca de Somuncura Cañadón Asfalto.

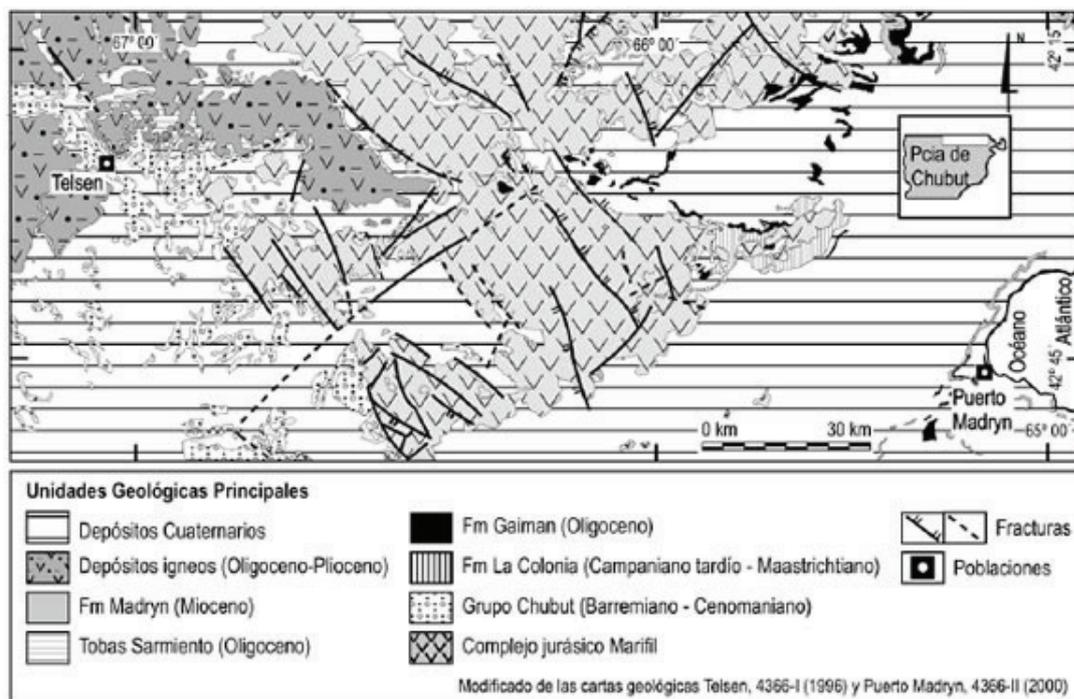


Figura 4: Mapa de fallas

## 2 Objetivos

Luego de estudiar y entender la problemática y de evaluar los cuatro problemas propuestos, teniendo en cuenta el tiempo disponible para el trabajo el grupo decidió enfocarse en los dos primeros: El problema del Mapeo (Problema 1.) y El problema de la detección de una falla geológica (Problema 2.).

Consideramos que el Problema 3., aunque de sencilla formulación y resolución teórica, con la precisión que necesita el real problema de la industria, implicaría un trabajo que se encuentra fuera

de nuestro alcance, dadas las restricciones de tiempo. En cuanto al Problema 4., consideramos que estudiando el Problema 2 se pueden responder algunas de las preguntas que plantea este problema. A continuación se detallan los dos problemas elegidos.

## 2.1 El Problema del Mapeo

Primero se estudiaron diversas formas posibles de interpolar datos, buscando otros posibles pesos además del propuesto (la inversa de las distancias) así como otras posibilidades más generales, como por ejemplo aproximación por cuadrados mínimos, buscando además diferentes bases apropiadas. Por último, a partir de datos reales, se implementaron las distintas propuestas y fueron comparadas.

## 2.2 El Problema de la detección de una falla geológica

Para este problema decidimos tomar dos caminos de naturaleza muy distinta. Por un lado intentamos verlo como un problema de *clustering*. Es decir, dado un conjunto de datos en puntos de una grilla, separar en dos (o más) *clusters* a partir de diferentes nociones de distancias. Esta herramienta es muy apropiada cuando se tienen muchas variables en cada punto de grilla y de alguna manera busca correlaciones entre las distintas variables, lo que nos hizo pensar que una falla geológica separaría la muestra en grupos. Luego del estudio teórico implementaríamos los algoritmos conocidos de clustering con los datos proporcionados por Wintershall.

Por otro lado, a partir de una idea de Javier Etcheverry decidimos estudiar el problema como un análogo al problema de segmentación de imágenes, cuyo objetivo es simplificar y/o cambiar la representación de una imagen en otra más significativa y más fácil de analizar. La segmentación se usa tanto para localizar objetos como para encontrar los límites de estos dentro de una imagen[8]. Tomamos esos bordes como una posible falla.

Nos encargamos de buscar implementaciones de soluciones a este problema, particularmente utilizando el método de Chan-Vese (ampliado en 3.2), adaptarlas a nuestros datos y analizar los resultados. Dado que tomamos dos direcciones distintas, finalmente comparamos los resultados.

# 3 Trabajo realizado

## 3.1 Mapeo a partir de muestras dispersas

### Alternativas evaluadas

Para la resolución del problema, se probaron, implementaron y evaluaron distintas interpolaciones, que se enumeran a continuación:

- Implementamos el método de interpolación con pesos inversamente proporcionales a la distancia propuesto en primer lugar, para tener un criterio de comparación con otros métodos de interpolación. Esta elección tenía la característica de ser muy irregular, ya que se formaban "picos" muy pronunciados que no se corresponden con la naturaleza de los parámetros medidos, que deberían ser de variación suave.
- Mantener la estructura de interpolación buscando mejores pesos usando Kriging, método se usa ampliamente para interpolar datos en Geofísica, Oceanografía y Atmósfera. Estudiamos el método e intentamos aplicarlo, pero tuvimos problemas con la estimación de la matriz de covarianza y los parámetros. Dado que es un método muy usado, fuimos por otro camino.

- Buscamos nuevas bases (Campanas de Gaussianas): Propusimos una base de funciones de la forma

$$c_i \exp\left(-\frac{1}{1 - \frac{\|x-x_i\|}{\delta_i}}\right).$$

Campanas locales entorno a cada punto donde se toman las muestras. Estudiamos diferentes  $\delta$  fijos y los  $c_i$  los buscamos a partir de un sistema lineal buscando que estas campanas interpolen a los datos medidos.

- Propusimos otro tipo de interpolación en la cual se toman puntos vecinos de acuerdo a un umbral prefijado.

$$Z(x) = \frac{1}{|N(x)|} \sum_{w \in N(x)} z(w); \quad N(x) := \{w : \|x - w\| \leq \epsilon\}.$$

- Quedo pendiente determinar algun tipo de error como para tener un análisis cualitativo de los métodos.

## Kriging

En las aplicaciones de análisis espacial de datos geospaciales, la función que describe la elevación del terreno (o alguna otra variable de interés) se toma como una variable aleatoria  $Z$ , que le asigna a cada punto  $x$  de una región de interés el valor de la variable de interés.

Si bien la elevación del terreno (o la variable de interés en general) está determinada por la naturaleza y se cuenta con una sola realización, al aplicar esta técnica a diferentes regiones es que se justifica esta asunción, ya que en diferentes regiones la elevación tomará diferentes formas, cada una pensada como una realización diferente de la variable aleatoria.

Esta variable aleatoria se muestrea en una cantidad discreta de puntos  $x_i$ , y a partir de estas muestras se quiere conocer  $Z(x^*)$ , es decir la elevación en algún otro punto. En particular, como  $Z(x^*)$  puede ser cualquier punto de la región, barriendo  $Z(x^*)$  sobre toda la región se obtendrá una estimación de  $Z(x)$ .

Para estimar los valores de  $Z$  se utiliza un estimador en una técnica conocida como Kriging, en la que el estimador  $\hat{Z}$  se construye de manera lineal, representado los valores de la elevación en  $x^*$  como una combinación lineal de los valores de elevación medidos en los puntos  $x_i$ :

$$\hat{Z}(x^*) = \sum w_i(x^*)Z(x_i).$$

Dada esta fórmula de reconstrucción, el problema se reduce a encontrar los pesos  $w_i(x^*)$  en cada punto de interés. El método más utilizado se llama Kriging simple, y parte de la hipótesis de que se conocen la media y la varianza de  $Z$ . Esto permite evaluar el sesgo y la varianza de  $\hat{Z}$ , y elegir  $\hat{Z}$  de forma de minimizar su sesgo y su error cuadrático medio.

## Conceptos previos

**Estimador** Un estimador de una variable aleatoria  $\theta$  se escribe como  $\hat{\theta}$  y mapea elementos de un espacio de muestras, tomadas de una o más realizaciones de  $\theta$  a estimaciones de  $\theta$ .

Los estimadores son en sí mismos variables aleatorias ya que son funciones de variables aleatorias.

**Sesgo** Se llama sesgo a la diferencia entre la media del estimador y la media de la variable aleatoria estimada

$$sesgo(\hat{\theta}) = E(\hat{\theta}) - E(\theta)$$

En el caso de que  $sesgo(\hat{\theta}) = 0$  el estimador se dice que es insesgado.

**Varianza** Como el estimador es una variable aleatoria en sí misma, tiene asociada una varianza, que se calcula como

$$var(\hat{\theta}) = E\left(\left(\hat{\theta} - E(\theta)\right)^2\right)$$

**Error Cuadrático Medio** El error cuadrático medio está relacionado con estas otras dos propiedades y se define como la esperanza del error de estimación al cuadrado

$$MSE(\hat{\theta}) = E\left(\left(\hat{\theta} - \theta\right)^2\right)$$

y puede calcularse a partir del sesgo y la varianza como

$$MSE(\hat{\theta}) = sesgo(\hat{\theta})^2 + var(\hat{\theta})$$

**Enunciado del Problema de Kriging simple** Dada una realización de la variable aleatoria  $Z$ , de la que se conocen su varianza y su media, y una cantidad de muestras de  $Z$  tomadas en los puntos  $x_i$ ,  $Z(x_i)$ , hallar los pesos  $w_i(x^*)$  tales que minimicen el sesgo y la varianza del estimador  $\hat{Z}$  evaluado en los puntos  $x^*$ :

Minimizar:

$$var\left(\hat{Z}(x^*) - Z(x^*)\right)$$

Sujeto a:

$$sesgo\left(\hat{Z}(x^*) - Z(x^*)\right) = 0$$

**Desarrollo** Agregando la hipótesis de que la covarianza de  $Z$  también es conocida, la ecuación a minimizar queda

$$var\left(\hat{Z}(x^*) - Z(x^*)\right) = \sum_i \sum_j w_i(x^*) w_j(x^*) cov(Z(x_i), Z(x_j)) - 2 \sum_i w_i(x^*) cov(Z(x_i), Z(x^*)) + var(Z(x^*)).$$

Pasando a notación matricial, llamando  $w$  al vector dado por los  $w_i$ ,  $d$  a la fila de la matriz de covarianza  $cov(Z(x_i), Z(x^*))$  correspondiente a  $x^*$  y  $C$  a la matriz de covarianza  $cov((Z(x_i), Z(x_j)))$

$$var\left(\hat{Z}(x^*) - Z(x^*)\right) = w^T C w - 2w^T d + var(Z(x^*)).$$

Derivando con respecto a  $w$ , que son los pesos que se deben calcular

$$\frac{\partial\left(\hat{Z}(x^*) - Z(x^*)\right)}{\partial w} = 2Cw - 2d = 0$$

Con lo que los pesos buscados  $w$  se pueden obtener de resolver el sistema

$$Cw = d.$$

La principal dificultad de resolver este sistema reside en la forma particular de  $C$ , que muy a menudo es muy próxima a ser singular.

## 3.2 Búsqueda de la falla

### Clustering

El método de clustering es un procedimiento estadístico multivariante que tiene como objetivo la clasificación de individuos en grupos, de manera que exista la mayor homogeneidad posible dentro de los grupos, con respecto a ciertas variables que pueden ser cuantitativas o cualitativas, y que el grado de asociación sea bajo entre miembros de grupos distintos.

Estos grupos son llamados clusters. Formalmente hablando, se parte de una muestra  $\Omega$  de  $m$  individuos,  $X^1, \dots, X^m$ , cada uno de los cuales está representado por un vector  $n$ -dimensional,

$$X^j = (x_1^j, x_2^j, \dots, x_n^j), \quad j = 1, \dots, m$$

y se debe hallar una partición de la muestra en regiones  $\omega_1, \dots, \omega_k$  tal que:

$$\bigcup_{j=1}^k \omega_j = \Omega$$

y

$$\omega_i \cap \omega_j = \emptyset \quad (i \neq j).$$

Puesto que la clasificación se realiza a partir de las variables observadas en los individuos, es condición primordial en este tipo de estudio realizar una buena elección de las variables iniciales, así como también elegir una medida de homogeneidad o similaridad adecuada para la situación que se esté analizando.

No existe una única medida de homogeneidad, ni tampoco es único el método de agrupar observaciones en distintos clusters. El analista debe decidir qué medida y qué método son más adecuados según los datos de partida y los objetivos a conseguir con la agrupación.

En nuestro caso, tenemos dos muestras en una región geográfica, en la primera muestra poseemos aproximadamente 60 mil datos, en la segunda 2 millones. Las variables observadas fueron (en ambos casos) latitud, longitud y el tiempo de ida y vuelta (TWT) de una onda elástica al objetivo en el subsuelo.

Distinguimos dos tipos esenciales de clustering, los jerárquicos y los no jerárquicos. Algunas de las diferencias entre estos métodos es que en el primero uno puede elegir la cantidad de clusters al finalizar el proceso mientras que en los no jerárquicos debe estar predefinido, y además en los métodos jerárquicos dos puntos que en algún momento del algoritmo quedan asociados, pertenecerán finalmente al mismo cluster, mientras que en los no jerárquicos esto no ocurre.

Para hallar un clustering jerárquico, tomamos las distancias entre todos los pares de puntos (previamente se los suele estandarizar) de nuestra muestra (debemos elegir una distancia adecuada) y agrupamos los dos más cercanos, reduciendo en uno la cantidad de datos. Repetimos el proceso hasta tener los clusters que deseamos, teniendo en cuenta que hay que elegir la manera de medir la distancia entre un par de conjuntos  $A$  y  $B$  de puntos previamente agrupados (las opciones más clásicas son la distancia mínima (máxima) entre un punto de  $A$  y uno de  $B$ , o el promedio de las distancias).

Dentro de los métodos no jerárquicos, el más popular es el denominado *K-means*, creado por Mac Queen en 1972. La idea se puede resumir en los siguientes pasos [4].

1. Tomamos al azar  $k$  puntos  $c_1, \dots, c_k$  de nuestra muestra.
2. Hacemos una partición de nuestra muestra en los conjuntos

$$A_j = \{x : d(x, c_j) \leq d(x, c_i) \forall i \neq j\} \quad (j = 1 \dots k)$$

(los casos patológicos, por ejemplo un punto equidistante a todos los  $c_j$  se pueden resolver de manera arbitraria de modo que quede una partición).

3. Calculamos los centroides de cada  $A_j$  (es decir el promedio de los puntos de cada  $A_j$ )
4. Hacemos una nueva partición de los puntos, agrupándolos según el centroide más cercano.
5. Repetimos 3 y 4 hasta que los clusters se estabilicen, o iteramos una cantidad fija, o algún otro criterio de fin del algoritmo.

Por supuesto que este método depende de la distancia elegida, y tiene múltiples variaciones posibles.

Un buen clustering debería armar una partición en la que los elementos de un mismo subconjunto sean 'parecidos' entre sí, y 'diferentes' a los de los otros. Para medir esto usamos las denominadas "siluetas".

Veamos cómo se construyen estas siluetas. Definimos la disimilaridad media del punto  $i$  al subconjunto  $C$  como

$$\bar{d}(i, C) = \frac{1}{|C|} \sum_{j \in C} d(i, j).$$

Dado un elemento  $i$  perteneciente al cluster  $A$ , definimos

$$a(i) = \bar{d}(i, A),$$

$$b(i) = \min_{C \neq A} \{\bar{d}(i, C)\},$$

llamaremos cluster vecino del punto  $i$  a aquel en el que se alcanza el mínimo.

Definimos por último

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}.$$

Es inmediato que  $-1 \leq s(i) \leq 1$ , y que un valor cercano a 1 indica que  $i$  está correctamente clasificado (es mucho más parecido a los otros elementos de su cluster que a los de los demás), mientras que a medida que el valor baja, la calidad de la clasificación también lo hace, y valores cercanos a  $-1$  indican una mala clasificación.

La silueta de una clusterización es un histograma donde se grafican los  $s(i)$  agrupados por el cluster de pertenencia y en orden decreciente dentro de cada uno. Una medida clásica que indica la calidad de la clasificación es el promedio de los  $s(i)$  (cuanto más cercano a 1, mejor la clusterización).

### Chan-Vese

Existen diversos métodos y algoritmos para la segmentación o detección de bordes/contornos/objetos dentro de una imagen, sin embargo, Chan-Vese funciona mejor (provee un contorno mas detallado) con imágenes con ruido, borrosas y donde el fondo tiene una topología complicada. Ver [5][7] para más detalles sobre el método.

Este modelo creado por T.Chan y L.Vese está basado en el operador de Mumford-Shah para segmentación de imágenes y en los conjuntos de nivel. La idea básica en los modelos activos de contorno es desarrollar una curva, sujeta a las condiciones que presenta la imagen dada  $u_0$ , con el objetivo de detectar objetos en esa imagen.

Sea  $\Omega$  un conjunto abierto y acotado de  $\mathbb{R}^2$ , con  $\partial\Omega$  su borde. Sea  $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  la imagen dada y definamos la curva de evolución  $C$  en  $\Omega$  como el borde de un subconjunto abierto  $\omega$  de  $\Omega$  (i.e  $\omega \subset \Omega$ , y  $C = \partial\omega$ ). De éste modo *dentro*( $C$ ) denota la región  $\omega$  y *fuera*( $C$ ) denota la región  $\Omega \setminus \bar{\omega}$ .

El método se basa en minimizar un funcional de energía que está basado en la segmentación. Expliquemos la idea básica del modelo en un caso simple. Supongamos que la imagen  $u_0$  está formada por dos regiones de intensidades aproximadamente constantes con valores distintos  $u_1$  y  $u_2$ . Más aún, asumamos que el objeto a ser detectado está representado por la región donde el valor es  $u_1$ . Notemos su borde como  $C_0$ . Ahora consideremos el siguiente término de "ajuste":

$$F_1(C) + F_2(C) = \int_{dentro(C)} |u_0 - c_1|^2 dx dy + \int_{fuera(C)} |u_0 - c_2|^2 dx dy$$

donde  $C$  es cualquier curva,  $c_1$  y  $c_2$  son constantes que dependen de  $C$ , son los promedios de  $u_0$  dentro de  $C$  y fuera de  $C$  respectivamente. En este caso simple es evidente que  $C_0$ , el borde del objeto, es la curva que minimiza el término de "ajuste".

En el modelo de Chan-Vese se minimizará el término de "ajuste" y se añadirán términos de regularización como la longitud de la curva  $C$ , y/o el área de la región dentro de  $C$ . De este modo ellos introducen un funcional de energía  $F(c_1, c_2, C)$  definido del siguiente modo:

$$\begin{aligned} F(c_1, c_2, C) &= \mu Long(C) + \nu Area(dentro(C)) \\ &+ \lambda_1 \int_{dentro(C)} |u_0 - c_1|^2 dx dy + \lambda_2 \int_{fuera(C)} |u_0 - c_2|^2 dx dy, \end{aligned}$$

donde  $\mu \geq 0$ ,  $\nu \geq 0$ ,  $\lambda_1, \lambda_2 > 0$  son parámetros fijos. De esta manera el problema que se debe considerar es el de minimizar el funcional  $F$ :

$$\inf_{c_1, c_2, C} F(c_1, c_2, C).$$

**Relación con el funcional de Mumford-Shah** Observemos cuál es la relación entre éste funcional y el de Mumford-Shah. El funcional de Mumford-Shah para segmentación es:

$$F(u, C) = \mu Long(C) + \lambda \int_{\Omega} |u_0(x, y) - u(x, y)|^2 dx dy + \int_{\Omega \setminus C} |\nabla u(x, y)|^2 dx dy,$$

donde  $u_0 : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$  es una imagen dada,  $\nu$  y  $\lambda$  son parámetros positivos. La imagen  $u$  solución del problema de minimización de este funcional está formada por regiones suaves  $R_i$  y por bordes definidos, notado por  $C$ . Este problema puede ser simplificado si restringimos al funcional  $F$  a funciones  $u$  que son constantes a trozos, i.e  $u = c_i$  donde  $c_i$  es una constante en cada componente conexa  $R_i$  de  $\Omega \setminus C$ . El caso reducido se llama problema de partición mínima.

Si en el funcional de energía definido por Chan-Vese decimos que  $\nu = 0$  y  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$  estamos en un caso particular del problema de partición mínima, en el cual se busca la mejor aproximación  $u$  de  $u_0$ , como una función que toma sólo dos valores, es decir:

$$u = \begin{cases} \text{promedio}(u_0) \text{ dentro de } C \\ \text{promedio}(u_0) \text{ fuera de } C \end{cases} \text{ y con un único borde } C.$$

**Formulación del modelo a partir de conjuntos de nivel** Repasemos primero algunas definiciones:

**Conjunto de nivel:** Sea  $f : H \subseteq R^n \rightarrow R$  una función. Un conjunto de nivel de la función  $f$  es un subconjunto de la forma:  $C_k = \{x \in H | f(x) = k\}$ .

Con el método de conjuntos de nivel tenemos que la curva  $C \subset \Omega$  es representada por un conjunto de nivel cero de una función de Lipschitz  $\phi : \Omega \rightarrow R$ , tal que:

1.  $C = \partial\omega = \{(x, y) \in \Omega : \phi(x, y) = 0\}$ .
2.  $\text{dentro}(C) = \omega = \{(x, y) \in \Omega : \phi(x, y) > 0\}$ .
3.  $\text{fuera}(C) = \Omega - \bar{\omega} = \{(x, y) \in \Omega : \phi(x, y) < 0\}$ .

De éste modo reemplazamos la búsqueda de la curva  $C$  por la búsqueda de la función  $\phi$ .

**Función de Heaviside:** Se llama función de Heaviside a la función:

$$H(z) = \begin{cases} 1, & \text{si } z \geq 0 \\ 0, & \text{si } z < 0 \end{cases}.$$

**Medida de Dirac:** Se llama medida de Dirac unidimensional a:  $\delta_0(z) = \frac{d}{dz}H(z)$

Ahora podemos expresar los términos del funcional de energía  $F$  de la siguiente manera:

$$\text{Long}\{\phi = 0\} = \int_{\Omega} |\nabla H(\phi(x, y))| dx dy = \int_{\Omega} \delta_0(\phi(x, y)) |\nabla \phi(x, y)| dx dy,$$

$$\text{Area}(\phi \geq 0) = \int_{\Omega} H(\phi(x, y)) dx dy,$$

$$\int_{\phi > 0} |u_0(x, y) - c_1|^2 dx dy = \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_1|^2 H(\phi(x, y)) dx dy,$$

$$\int_{\phi < 0} |u_0(x, y) - c_2|^2 dx dy = \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_2|^2 (1 - H(\phi(x, y))) dx dy.$$

De este modo el funcional  $F$  puede ser reescrito del siguiente modo:

$$\begin{aligned} F(c_1, c_2, \phi) &= \mu \int_{\Omega} \delta(\phi(x, y)) |\nabla \phi(x, y)| dx dy + \nu \int_{\Omega} H(\phi(x, y)) dx dy \\ &+ \lambda_1 \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_1|^2 H(\phi(x, y)) dx dy \\ &+ \lambda_2 \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_2|^2 (1 - H(\phi(x, y))) dx dy \end{aligned}$$

Si fijamos a  $\phi$  y minimizamos el funcional de energía  $F(c_1, c_2, \phi)$  respecto de las constantes  $c_1$  y  $c_2$ , se pueden expresar estas constantes en función de  $\phi$  como:

$$c_1(\phi) = \frac{\int_{\Omega} u_0(x, y) H(\phi(x, y)) dx dy}{\int_{\Omega} H(\phi(x, y)) dx dy}$$

si la curva tiene interior no vacío en  $\Omega$ , y

$$c_2(\phi) = \frac{\int_{\Omega} u_0(x, y) (1 - H(\phi(x, y))) dx dy}{\int_{\Omega} (1 - H(\phi(x, y))) dx dy}.$$

si la curva tiene exterior no vacío en  $\Omega$ . Podemos asegurar la existencia del mínimo del funcional de energía  $F(c_1, c_2, C)$  debido a resultados de Mumford-Shah para el problema de partición mínima.

Para poder calcular la ecuación asociada de Euler-Lagrange para  $\phi$  se deben considerar versiones ligeramente regularizadas de  $H$  y  $\delta_0$  que notaremos  $H_\epsilon$  y  $\delta_\epsilon$ . Sea  $F_\epsilon$  el funcional asociado regularizado definido por:

$$\begin{aligned} F_\epsilon(c_1, c_2, \phi) &= \mu \int_{\Omega} \delta_\epsilon(\phi(x, y)) |\nabla \phi(x, y)| dx dy \\ &+ \nu \int_{\Omega} H_\epsilon(\phi(x, y)) dx dy \\ &+ \lambda_1 \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_1|^2 H_\epsilon(\phi(x, y)) dx dy \\ &+ \lambda_2 \int_{\Omega} |u_0(x, y) - c_2|^2 (1 - H_\epsilon(\phi(x, y))) dx dy. \end{aligned}$$

Si mantenemos fijos los valores de  $c_1$  y  $c_2$  y minimizamos  $F_\epsilon$  respecto de  $\phi$  se puede deducir la ecuación asociada de Euler-Lagrange para  $\phi$ . La parametrización de la dirección de descenso mediante un tiempo artificial  $t \geq 0$ , en la ecuación en  $\phi(t, x, y)$  es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \delta_\epsilon(\phi) [\mu \operatorname{div} \left( \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) - \nu - \lambda_1 (u_0 - c_1)^2 \\ + \lambda_2 (u_0 - c_2)^2] = 0 \text{ en } (0, \infty) \times \Omega, \end{aligned}$$

$$\phi(0, x, y) = \phi_0(x, y) \text{ en } \Omega,$$

$$\frac{\delta_\epsilon(\phi)}{|\nabla \phi|} \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0 \text{ en } \partial \Omega$$

donde  $\vec{n}$  denota la norma exterior a la frontera  $\partial \Omega$  y donde  $\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$  denota la derivada normal de  $\phi$  en el borde.

**Aproximación numérica del modelo** T.Chan y L.Vese utilizan la siguiente regularización de  $H$ :

$$H_{2,\epsilon}(z) = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{2}{\pi} \arctan \left( \frac{z}{\epsilon} \right) \right)$$

y  $\delta_\epsilon = H'_\epsilon$ . Ambas aproximaciones convergen a  $H$  y  $\delta_0$  cuando  $\epsilon$  tiende a 0. Para discretizar la ecuación en  $\phi$  se usa un esquema implícito de diferencias finitas. Las diferencias finitas son:

$$\Delta_-^x \phi_{i,j} = \phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}, \quad \Delta_+^x \phi_{i,j} = \phi_{i+1,j} - \phi_{i,j},$$

$$\Delta_-^y \phi_{i,j} = \phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}, \quad \Delta_+^y \phi_{i,j} = \phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}.$$

El algoritmo es el siguiente: conociendo  $\phi^n$ , calculamos  $c_1(\phi^n)$  y  $c_2(\phi^n)$  usando lo anterior. Entonces calculamos  $\phi^{n+1}$  a partir de la discretización y linealización de la ecuación anterior en  $\phi$

$$\begin{aligned} \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} &= \delta_h(\phi_{i,j}^n) \left[ \frac{\mu}{h^2} \Delta x_- \left( \frac{\Delta x_+ \phi_{i,j}^{n+1}}{\sqrt{\Delta x_+ (\phi_{i,j}^n)^2 / (h^2) + (\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j-1}^n)^2 / (2h)^2}} \right) \right. \\ &+ \frac{\mu}{h^2} \Delta y_- \left( \frac{\Delta y_+ (\phi_{i,j}^{n+1})}{\sqrt{(\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i-1,j}^n)^2 / (2h)^2 + (\Delta y_+ (\phi_{i,j}^n)^2 / (h^2))}} \right) \\ &\left. - \nu - \lambda_1 (u_{0,i,j} - c_1 (\phi^n))^2 + \lambda_2 (u_{0,i,j} - c_2 (\phi^n))^2 \right]. \end{aligned}$$

Este sistema lineal se resuelve de manera iterativa.

**Implementación Matlab** Para probar la eficiencia del método sobre los datos brindados por David Curia se utilizó un toolbox de matlab: Chan Vese Active Contours Without Edges [6].

El mismo está implementado para la segmentación de archivos de imagen. Mediante la función *chanvese*, que toma de entrada una imagen, una máscara inicial y un método de aproximación, se levanta una interfaz gráfica, que muestra el avance del algoritmo (nos referimos a la evolución del contorno, iteración a iteración.).

Uno de los parámetros que requiere el toolbox es un contorno inicial, que utiliza para empezar la búsqueda. Si bien el toolbox es bastante robusto en cuanto a este contorno inicial, se implementó un sencillo algoritmo que crea el contorno inicial como una zona formada por la superposición de muchos cuadrados, cada uno centrado alrededor de cada muestra o dato disponible.

De esa forma, el contorno inicial encierra los datos disponibles, con lo que el toolbox comienza a buscar por las zonas donde hay datos, y de ser necesario por la evolución misma de la búsqueda puede derivar hacia zonas donde los datos han sido interpolados, pero no comienza la búsqueda en dicha zona.

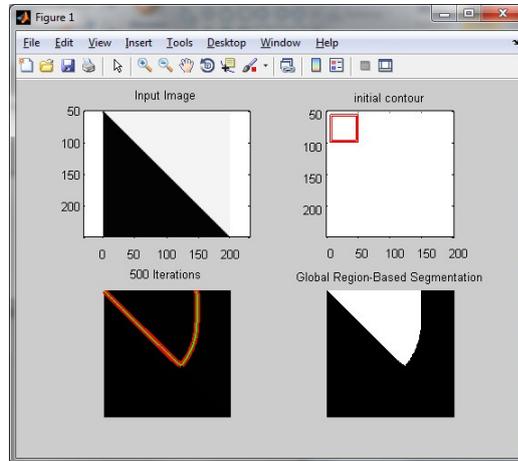


Figura 5: Pantalla del toolbox

Los pasos que realizamos para probar los datos con el toolbox fueron los siguientes:

- Cargar en Matlab las mediciones (en este caso datos de tiempo de ida y vuelta (TWT) de una onda elástica al objetivo en el subsuelo.)

- Realizar una interpolación utilizando la función *griddata* para obtener una grilla. De esta manera adaptamos los puntos de medición a una estructura matricial, que es lo que requiere la función *chanvese*.
- Luego calculamos la máscara (contorno inicial) en base a una aproximación de la distribución geográfica
- Por último llamamos a la función *chanvese* con los datos calculados en los 2 items anteriores para visualizar la evolución y los resultados.

## 4 Resultados

### 4.1 Mapeo

Nuestro primer intento fue hacer una interpolación con bases soportadas en entornos de los puntos de dato, de la forma:

$$\varphi_i(x, y) = e^{-\frac{\|(x, y) - (x_i, y_i)\|^2}{\delta}}$$

con el objetivo de suavizar la interpolación.

Luego intentamos buscar pesos óptimos y nos topamos con el método de *Kriging*, explicado en la sección 3.1. Nos encontramos que era una técnica muy desarrollada en la industria pero que no se adaptaba bien a nuestro problema puntual.

Consideramos que al ser un problema tan estudiado tanto de manera general como también aplicado a los problemas de Geofísica, no encontraríamos mejoras sustanciales en el corto tiempo disponible.

Decidimos entonces trabajar con la interpolación de Matlab *griddata*, la cual tiene un mejor rendimiento y es más parametrizable que las funciones que llegamos a programar (todas las alternativas de interpolación enumeradas en la sección 3.1). En la Figura 1 se aprecia una muestra de los datos con los que trabajamos interpolados utilizando splines cúbicos.

En resumen el estudio referido al Problema 1. quedó reducido a un estudio teórico de los algoritmos más usados en el área.

### 4.2 Detección de fallas geológicas

Este estudio, que nos brindaría resultados para el Problema 2. fue al que le dedicamos la mayor cantidad de tiempo. Primero unos comentarios acerca de la zona de donde provienen los datos:

#### Zona Estudiada:

David Curia nos proveyó de Datos de tiempo de ida y vuelta (TWT) de una onda elástica al objetivo en el subsuelo en la zona de Cañadón Asfalto, en la cuenca de Somuncurá en la provincia de Chubut, Argentina. Trabajamos con 2 archivos de datos de la misma región. Uno del orden de 60 mil puntos, de aquí en adelante *piccolino* correspondiente a mediciones reales y otro del orden de 3 millones de puntos de grilla, de aquí en más *muchos datos*, proveniente de una interpolación areal de los datos *piccolino* que debería servir como *benchmark* a los algoritmos estudiados. Esta interpolación está guiada por datos de magnetotélúrica y gravimetría, pero son siempre valores de TWT. En la Figura 2, presentamos una foto del terreno en el que se trabaja en donde se aprecian la diversidad Geológica.

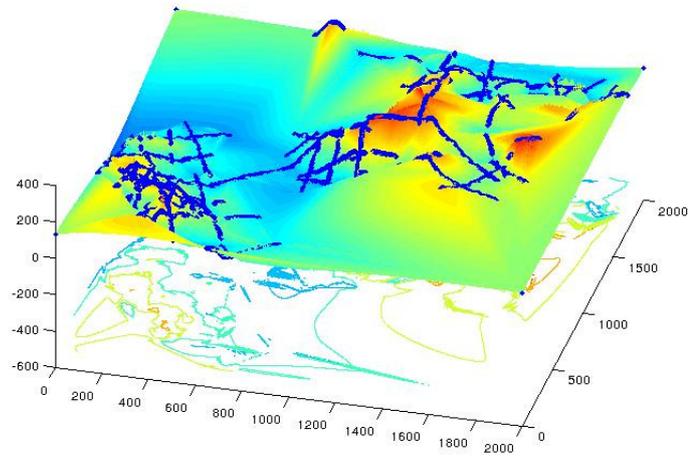


Figura 1: Datos graficados utilizando splines cúbicos con *griddata*



Figura 2: Foto del terreno

### Clustering

Usando todo lo estudiado en 3.2 referido a los Clusters, conjeturamos que si los clusters coinciden con regiones geográficas, entonces tendríamos indicios de una posible falla. Nosotros hemos implementado este método para resolver el problema de separar áreas delimitadas por fallas, ya que éstas originan cambios en las variables observadas. Si las observaciones son muy parecidas,

tendrían que agruparse en el mismo cluster.

El problema es que no tuvimos posibilidad de correr estas técnicas mejor porque manejamos pocas variables. Consideramos que sería una buena herramienta de diagnóstico.

### Simulaciones con Clustering

Supusimos que los datos que nos suministraron tenían una falla, e implementamos el algoritmo con 2 clusteres, usando la función de matlab *K-means*.

Primero, para comenzar a testear nuestros algoritmos aplicamos el método sobre el set de datos *piccolino*. Se ve en la imagen de la izquierda de la Figura 3 que el método separa en dos regiones, pero realmente es difícil de encontrar un patrón con esa cantidad de datos. El siguiente es el resultado de aplicar el mismo método a *muchos datos*. Están representados en la parte derecha de la Figura 3, donde se aprecia una separación clara entre dos regiones, con bordes bastante suaves.

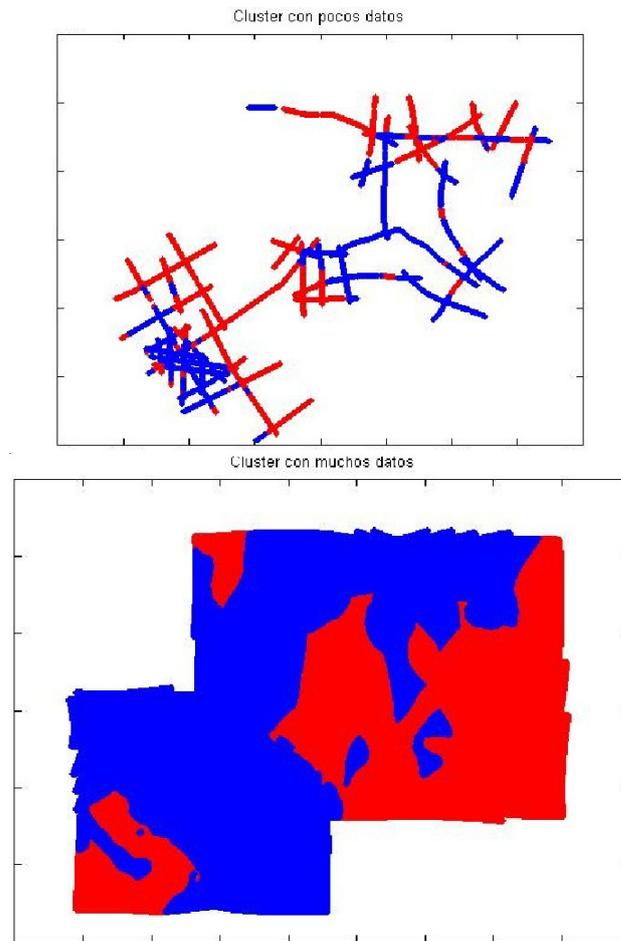


Figura 3: Clusters calculados a partir de los 2 sets de datos

### Superposición de Clusters

Superpusimos ambas imágenes para verificar que aunque con pocos datos el algoritmo agrupaba correctamente los datos. El resultado del análisis fue exitoso y está reflejado en la Figura 4.

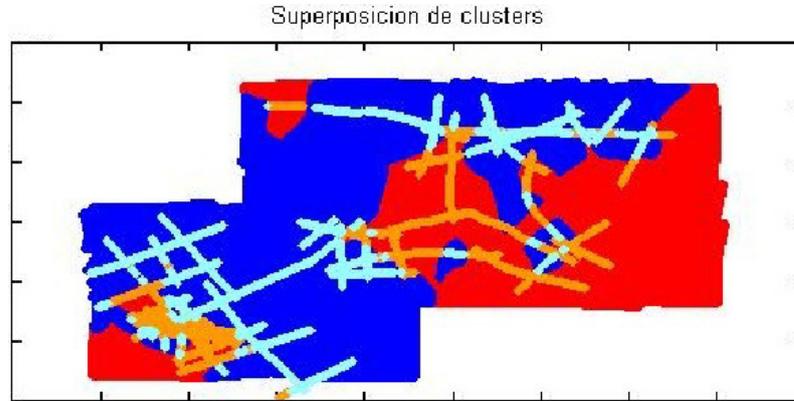


Figura 4: Superposición de los clusters

En nuestro caso al realizar clustering jerárquicos y no jerárquicos con diversas distancias, y sin tener en cuenta como variables la longitud y latitud, notamos que para el caso de dos clusters se obtenían resultados similares entre sí y con buena silueta; además los clusters se correspondían con regiones geográficas claramente definidas y coincidentes con las obtenidas con el método de Chan-Vese. Cuando forzamos más clusters, la calidad de las siluetas bajaba sensiblemente y no siempre determinaban regiones geográficas claras. Cuando agregamos la posición como variable, los resultados bajaron su calidad (para cualquier cantidad de clusters) y fueron incompatibles con los obtenidos con Chan-Vese. Esto nos lleva a intuir (pese a la escasez de variables, que atenta contra la fiabilidad de este método) una única falla que limita dos regiones-clusters.

### Segmentación de Imágenes

El siguiente paso fue realizar un trabajo similar al anterior con los algoritmos comentados en la sección 3.2. Dados nuestros conjuntos de datos, primero buscamos una interpoladora usando *griddata* con interpolaciones cúbicas, como fueron mencionadas en la sección 4.1. Utilizamos luego el algoritmo de Chan-Vese que hace evolucionar el contorno buscado a través del tiempo. Resuelve un problema de minimización de un funcional más general. La idea principal fue pensar a la falla geológica como el borde de un contorno que separa componentes conexas de continuidad de la función principal (en nuestro caso la interpolada de los datos).

En la Figura 5 se aprecia el resultado del algoritmo aplicado a *piccolino*.

Acto seguido, aplicamos el mismo algoritmo a *muchos datos*. El resultado se aprecia en la Figura 6.

### Superposición de los dos métodos

Para terminar, en la Figura 7, una superposición de los mapas dados por los dos métodos estudiados en este trabajo. Notoriamente los algoritmos, que provienen de áreas distantes de la matemática y que modelan el problema desde también dos puntos de vista lejanos, arrojaron resultados muy similares.

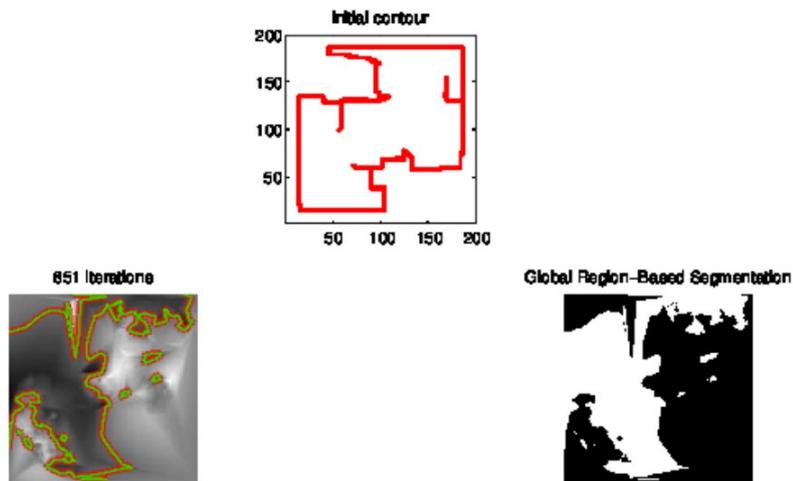


Figura 5: Resultado del algoritmo aplicado a *piccolino*

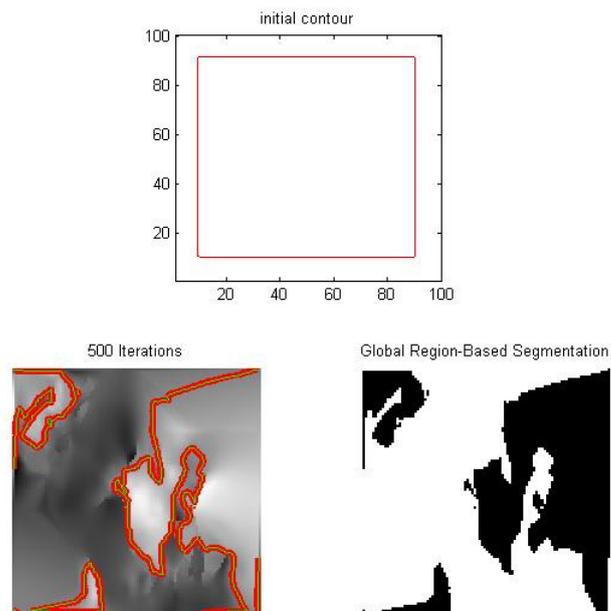


Figura 6: Mismo algoritmo a *muchos datos*

Por último superpusimos todos los gráficos para verificar que los métodos mejoran notablemente cuando aumenta la cantidad de datos disponible. Sin embargo, los resultados con pocos datos se

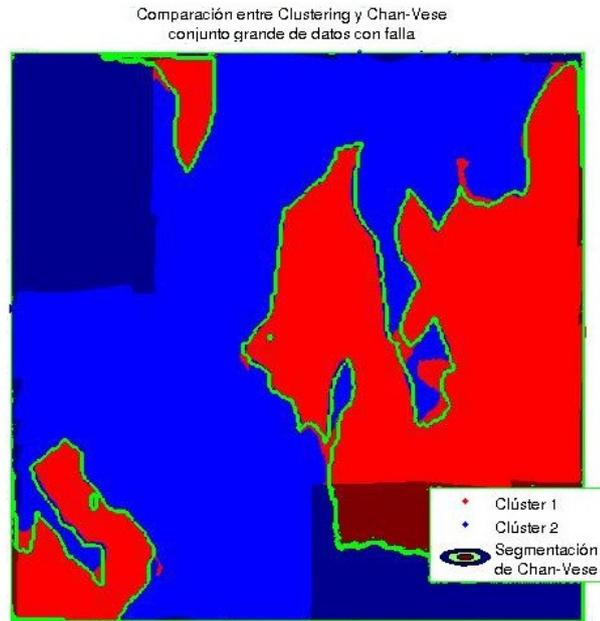


Figura 7: Superposición de los cluster con *muchos datos* y el contorno calculado en Chan-Vese

corresponden con las regiones verificadas por la mayor abundancia de datos, y las fronteras no parecen modificarse significativamente al aumentar la cantidad de datos, aunque sí se vuelven más claras. El resultado se puede ver en la Figura 8.

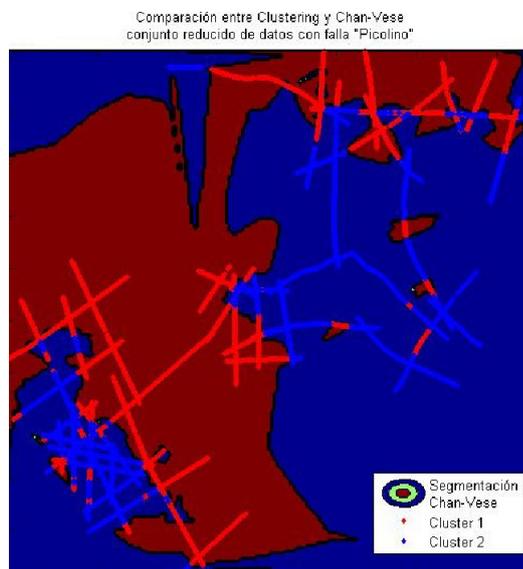


Figura 8: Superposición de los cluster con *piccolino* y el contorno calculado en Chan-Vese

En la Figura 9 vemos una comparación entre nuestros resultados finales y el mapa de curvas de nivel proporcionado también por Wintershall, confeccionado luego de mucho tiempo análisis de la zona, con las fallas agregadas como dato extra y no calculadas en base a mediciones.

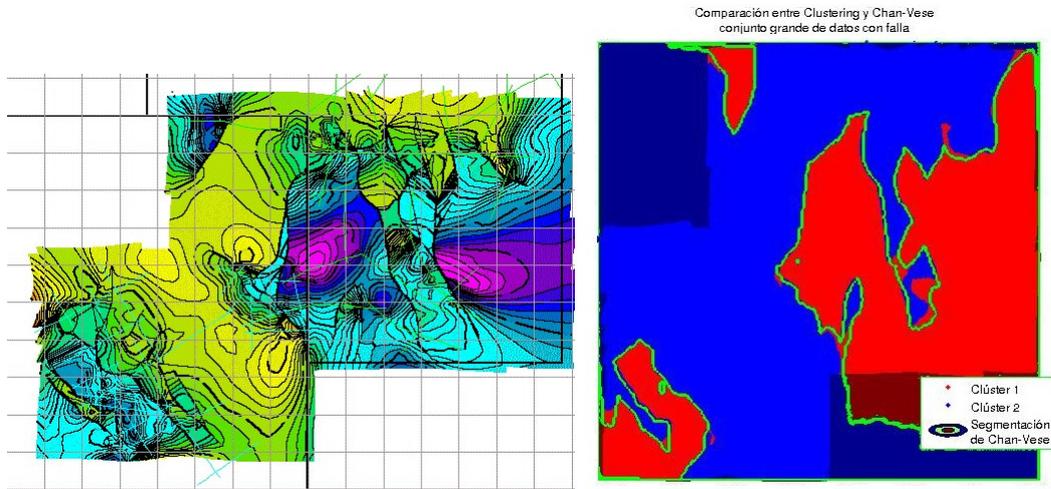


Figura 9: Mapa de fallas vs Superposición de los métodos

## 5 Conclusiones

- Con pocos datos el algoritmo de Chan-Vese devolvió una buena aproximación de una probable falla geológica, que fue verificada luego en la Figura 9.
- El método de clustering separa los datos según su ubicación relativa con respecto a una posible falla geológica.
- Con muchos datos el resultado es casi idéntico.
- Si bien *K-means* es muy aplicado en la industria, la implementación que hemos desarrollado no es la más usual. El resultado con dos clases muestra los depocentros, que a la altura de la exploración en la zona es uno de los objetivos centrales.
- Si ambos métodos *independientes entre sí* arrojan resultados similares para el mismo conjunto de datos, esto puede ser un buen primer diagnóstico de la presencia de una falla. De manera tal que si la zona llegara a ser de interés se podría proponer un estudio más detallado del terreno.
- Creemos que la aplicación de métodos de segmentación es un aporte original al problema. No son tan comunes estos métodos, como la aplicación del algoritmo de Chan-Vese, para estos problemas.
- Aunque tal vez los datos utilizados no sean los más adecuados para la aplicación de un algoritmo de segmentación, en la industria se trabaja con datos mas apropiados, como por ejemplo los denominadas atributos sísmicos, que buscan dividir una región en dos o más clases que reflejen distinto ambiente de sedimentacion o facies.

## 6 Trabajo Futuro

- Con un conjunto más grande de datos y variables, un interesante trabajo sería el de estudiar la complementariedad de los métodos de clustering y segmentación, a fin de definir cuándo se usa cada uno o si se utilizan en conjunto cómo resulta el mapa generado.
- Utilizar los métodos estudiados para retomar la propuesta inicial, la cual consistía en la elaboración de un algoritmo para generar los mapas, abordada en la Introducción.
- Actualmente por las interpolaciones y segmentos calculados se pierden las coordenadas, el resultado del mapa generado no es georreferenciable. Una línea de avance podría ser generar datos para ser tomados por un sistema de información geográfica.
- Creemos que se podría profundizar el estudio de métodos de segmentación para problemas Geofísicos como los mencionados en las conclusiones dado que los resultados presentados fueron alentadores (Ver Figura 9).

## 7 Agradecimientos

El equipo entero agradece a David Curia y a Wintershall por haber participado en el taller, haber traído el problema, trabajado con nosotros y proporcionado los datos que nos permitieron corroborar nuestras implementaciones. También queríamos agradecerles a Javier Etcheverry y a Gabriel Acosta por sus sugerencias, consejos y ayuda.

## Referencias

- [1] Navarro, Edgardo y Astini, Ricardo, "Un ejemplo excepcional de brechamiento en el grupo Chubut, Patagonia", *Revista de la Asociación Geológica Argentina*. Vol. 67, pp. 193-204, ISSN 0004-4822, (2010).
- [2] Figari, E. y Courtade, S. 1993. Evolución Tectosedimentaria de la Cuenca C. Asfalto, Chubut, Argentina. 12. Congr. Geol. Argentino y 2. Congr. de Expl. de Hidrocarburos, Actas 1: 66-77, Mendoza, Argentina.
- [3] Figari, E., Courtade, S. y Homovc, J. 1992. Estructura de la Cuenca de C. Asfalto. YPF, Com. Geol. No 2 (Inedito), 56 p., Buenos Aires, Argentina.
- [4] "Clasificación no supervisada con aplicaciones a Bioinformática", dictado por el profesor Ruben Zamar, Escuela de Invierno Luis Santalo 2012, ([http://www.stat.ubc.ca/~ruben/UBA\\_Website/Luis\\_Santalo.html](http://www.stat.ubc.ca/~ruben/UBA_Website/Luis_Santalo.html)), Buenos Aires, Argentina.
- [5] Robert Crandall, "Image Segmentation Using the Chan-Vese Algorithm", *ECE 532 Project*, Fall 2009.
- [6] Yue Wu, Chan Vese Active Contours Without Edges, <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/23445>
- [7] Tony F. Chan (Member, IEEE), and Luminita A. Vese, "Active Contours Without Edgesm", *IEEE Transactions on Image Processing* 10(2)., 2001.
- [8] T. Chan y J. Shen "Image Processing And Analysis: Variational, Pde, Wavelet, And Stochastic Methods", Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005



# Optimización de métodos de detección y diagnóstico de fallas en la industria petroquímica.

YPF

Responsable: Gabriel Ignacio Horowitz, YPF

Participantes: Manuel Benjamin<sup>†</sup>, Jorge Gotay<sup>‡</sup>, Tatiana Hartinger<sup>†</sup>, Mauricio Maestri<sup>†</sup>, Federico Navarro<sup>‡</sup>, Lucio Pantazis<sup>†</sup>, Lucas Sánchez<sup>‡</sup>, Maximiliano Valle<sup>†</sup>, Adrián Will<sup>‡</sup> y Sergio Andrés Yuhjtman<sup>†</sup>

<sup>†</sup>FCEyN - UBA

<sup>‡</sup>FACET - UNT

## 1 Descripción del problema

Las plantas petroquímicas poseen una cierta cantidad de instrumentos que registran periódicamente los valores de diferentes variables físicas (usualmente Presión, Temperatura, Caudal, etc). Además en esta industria, debido al interés económico y a la peligrosidad de los procesos y materiales involucrados (combustibles y/o explosivos en su gran mayoría), los procesos están sumamente controlados y monitoreados con precisión, además de contar con numerosos procesos automáticos de control y estaciones de monitoreo. En algunos casos, a veces debido a falla de instrumentos, error humano, problemas en algún proceso, roturas de equipo, o accidentes, uno o más procesos salen de su estado normal de trabajo. En esas condiciones, se dispone de un tiempo máximo de respuesta que usualmente ronda alrededor de 2 horas, para retornar el proceso a su estado original antes que el mal funcionamiento derive en una falla catastrófica provocando desde demoras serias en el proceso, pérdidas económicas, hasta accidentes de gravedad, incendios y explosiones. Es un problema severo que, sólo en la industria petroquímica en los Estados Unidos, causa pérdidas superiores a los USD 20.000.000.000 al año.

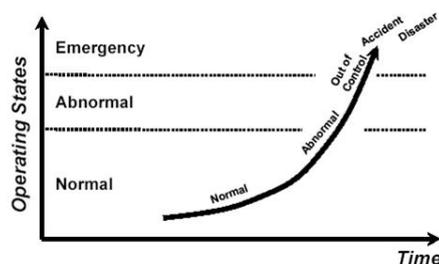


Figura 1: Eventos Anómalos en la Industria Petroquímica

La falla de algún instrumento o sensor de medición es una de las causas de este tipo de problemas. Se distinguen: el caso de la falla aislada, donde un sólo instrumento falla y la medición de los otros parámetros y mediciones del proceso no se ve alterada, y el caso de falla múltiple. Para el caso de falla de una sola variable existen procesos eficientes (Fisher Rosemount, Figura 2), pero que no funcionan correctamente en el caso de falla múltiple. En ocasiones debido a la

presencia de sistemas automáticos de control y a veces por causa de operadores humanos, la falla en un instrumento ocasiona cambios en otras variables de procesos conectados con él. En ese caso, el sistema detecta múltiples variables en diferentes procesos, lo que hace que resulte sumamente difícil para un operador humano distinguir el origen de la falla (puede suceder, incluso, que se trate de una falsa alarma provocada por el mal funcionamiento de un sensor). Mas aún, debido a la presencia de sistemas automáticos que actúan bajo la hipótesis de que el instrumento está funcionando de manera errónea, se pueden ocasionar accidentes reales y de gran peligrosidad (por ejemplo cuando el sistema aumenta la presión o temperatura en un proceso más allá de los límites permitidos).

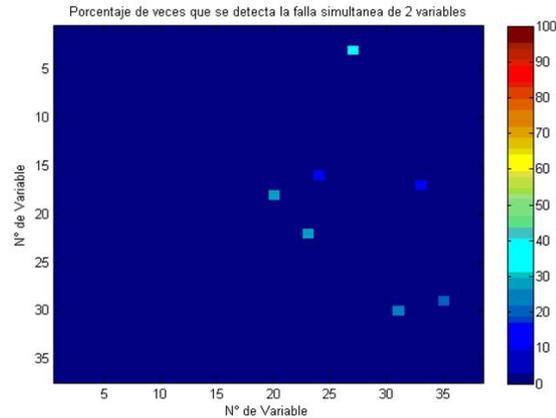


Figura 2: Fisher Rosemount - Detección de menos del 1% de los casos

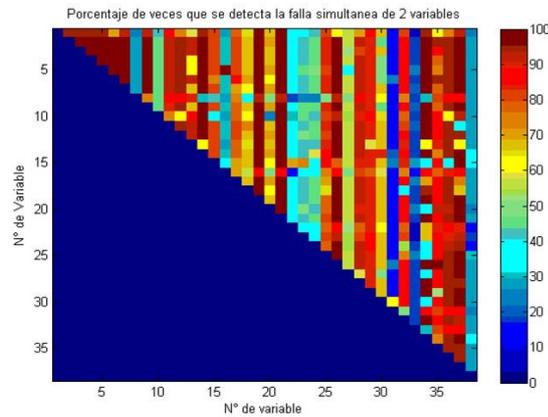


Figura 3: Sistema de YPF caso 2 fallas simultáneas

En este sentido, YPF cuenta con un proceso de monitoreo de este tipo de fallas, del tipo de Asistencia a la Toma de Decisiones. El proceso funciona eficientemente incluso en el caso de fallas múltiples (Figura 3). El sistema está basado en el hecho que, a pesar de que en teoría existen relaciones no lineales en las variables involucradas, en la práctica la mayoría de las variables en las plantas químicas observadas, presentan entre sí relaciones lineales. Esto permite resolver el

problema por lo menos en algunas de sus variantes, detectando cuando las relaciones lineales históricamente presentes entre las variables, cambian.

El proceso descrito consiste entonces en una primera parte en detectar, a partir de datos históricos, relaciones entre las variables utilizando en este caso la matriz de correlación lineal. Es un proceso combinatorio donde se listan todos los posibles subconjuntos de  $k$  variables, con  $k$  desde 2 en adelante, extrayendo la submatriz correspondiente de la matriz de correlación lineal, y buscando los casos en los que se puede despejar, aproximadamente, una variable en función de las otras, y sólo una. O sea, cualquier subconjunto de  $k - 1$  variables no presenta correlaciones lineales notables entre ellas. La segunda parte del proceso, el proceso de diagnóstico, corre aproximadamente cada hora y detecta cuantas variables no respetan su correlación histórica. La o las variables que presenten más alteraciones en sus correlaciones históricas con las demás variables, será la candidata a haber sufrido un mal funcionamiento. Este proceso se denomina “Angel Guardián” (Figura 4)

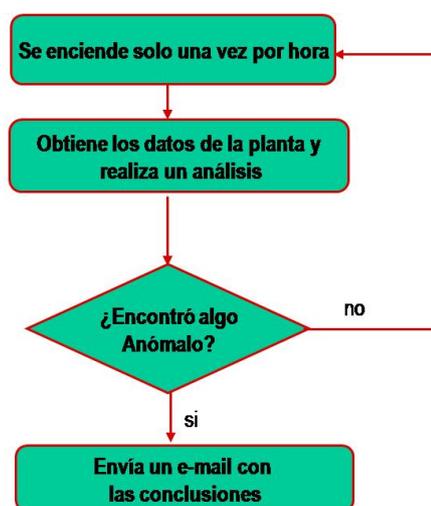


Figura 4: Sistema de YPF “Angel Guardián”

El problema planteado en TAMI 2012 consiste en reducir el tiempo necesario para llevar a cabo la primera parte del proceso, haciendo que éste resulte eficiente y se lo pueda correr en menos tiempo y/o para valores mayores de  $k$ .

El sistema en su diseño original, toma la matriz de datos  $A$ , se normaliza restando la media aritmética (con lo que los datos quedan centrados en cero), y se divide cada coordenada de los datos, por la desviación standard de la variable correspondiente. Este es un procedimiento que evita numerosos problemas numéricos y es usual en Análisis Numérico y Estadística (ver [1]). A continuación se arma la matriz de correlación  $A^t A$ , y buscando submatrices de esta matriz de correlación, recorre la lista de todas las combinaciones posibles de variables, desde 2 en adelante.

Para determinar si una determinada correlación entre  $k < n$  variables resulta útil, se debe cumplir que una de las variables tiene correlación con las demás, y las restantes no presentan correlación entre sí. Para analizar esto, una vez que se extrae la submatriz correspondiente a la combinación de variables analizada, se le realiza un **Análisis de Componentes Principales** (*Principal Components Analysis, PCA*), un análisis estadístico basado en la **Descomposición en Valores Singulares** (*Singular Value Decomposition SVD*). Esta descomposición, si bien es costosa desde el punto de vista operacional, presenta la ventaja de ser numéricamente estable.



inabordable en la práctica, si como en este caso se pretende recorrer la lista completa, incluso eliminando las correlaciones de menor nivel ya encontradas

El problema consiste entonces en detectar, a partir de la matriz de correlación, todos los posibles subconjuntos de  $k$  variables tales que una de ellas esté correlacionada con las demás, pero las otras no estén correlacionadas entre sí (entendiendo que si hay otras variables correlacionadas entre sí, esa relación fue encontrada y extraída al recorrer los subconjuntos de variables de cardinal menor,  $1, \dots, k - 1$ ).

## 2 Soluciones Presentadas

Se presentaron varias aproximaciones distintas a este problema. Algunas fueron exploradas en profundidad y completadas, mientras que otras fueron sólo esbozadas. Presentamos las principales soluciones planteadas.

### 2.1 Branch and Bound

Se plantea un método basado en el árbol de decisiones posibles, podando los casos no útiles. Para ello se considera la matriz de datos de entrada, de aproximadamente 18.000 registros, y variables entre cien y doscientas, dependiendo de la planta. De esta forma, la entrada es una matriz de  $m \times n$ , donde  $m$  es la cantidad de mediciones y  $n$  es la cantidad de variables. Para decidir si un conjunto de variables está correlacionado, utilizamos el “análisis de componentes principales” (PCA). Un conjunto de variables se considera correlacionado si el autovalor más pequeño de la matriz de covarianza correspondiente a esas variables es menor a 0,05 veces la suma de todos los autovalores, ya que esto garantiza que existe un hiperplano tal que las mediciones son puntos cercanos al mismo. En este caso, diremos que el grado de correlación de esas variables es al menos 95%.

Es posible recorrer todos los subconjuntos de dos, tres y acaso cuatro variables, estableciendo uno por uno cuáles están correlacionados y cuáles no. Sin embargo este método no sirve, por el tiempo que insume, para los conjuntos más grandes. Por lo tanto se requiere un algoritmo más eficiente.

Para plantear la solución al problema, comenzamos señalando los siguientes hechos:

1) Si  $C$  es un conjunto de variables y  $S$  es un subconjunto de  $C$ , el grado de correlación de  $S$  es menor o igual al de  $C$ .

2) En particular, si un conjunto  $C$  de variables está correlacionado (en la medida deseada), todo conjunto que contenga a  $C$  también lo estará. Por lo tanto estaremos interesados en hallar los conjuntos correlacionados minimales, es decir aquellos tales que ningún subconjunto posee correlación.

3) En el caso de la planta en estudio, la cantidad total de variables es 116. En base a pruebas preliminares, se determinó que el 82% de los conjuntos de 9 variables están correlacionadas en al menos un 95%.

En base a esto propusimos el siguiente algoritmo para hallar conjuntos de variables correlacionadas minimales. Se parte de una muestra al azar de nueve variables y se calcula su grado de correlación. Si éste da menor al 95%, se descarta la muestra y se elige otra. En caso de dar al menos 95%, quitamos del conjunto una variable y calculamos el grado de correlación del conjunto resultante. De esta forma, se recorre el árbol de subconjuntos del conjunto original, deteniendo la inspección en aquellos subconjuntos con grado de correlación inferior al 95% (ya que por (1) todos sus subconjuntos tampoco tendrán correlación). En otras palabras, sólo se

recorre aquellos nodos del árbol que poseen correlación, encontrándose así todos los conjuntos de variables correlacionadas minimales que son subconjuntos de la muestra de nueve tomada al azar.

Este proceso se repite tantas veces como se quiera. Se observa que cada iteración encuentra en promedio aproximadamente 30 correlaciones minimales demorando en promedio 0,1 segundos, de manera que es posible analizar 1.000.000 de muestras en el lapso de un día, aproximadamente. Para evitar guardar soluciones repetidas, proponemos lo siguiente: la elección al azar de una muestra de nueve variables se hará eligiendo las variables de a una comprobando que ningún subconjunto de las elegidas esté en la lista de correlaciones minimales halladas hasta el momento. Observación importante: es posible hacer esta comprobación sin necesidad de recorrer toda la lista, cuyo tamaño puede llegar al orden de los millones.

Este método permite encontrar una gran cantidad de correlaciones minimales de todos los tamaños menores a 10. Estimaremos a continuación la cantidad de conjuntos de  $k$  variables contemplados por el algoritmo, sobre el total.

Supongamos que la cantidad total de variables es  $N$ . Dado un conjunto de  $k$  variables, con  $1 \leq k \leq 9$ , calculemos la probabilidad  $p$  de que al elegir un conjunto de 9 variables al azar (con distribución uniforme), las  $k$  variables originales pertenezcan a la muestra de 9.

La cantidad de conjuntos de 9 variables que contienen a las  $k$  dadas es igual a  $\binom{N-k}{9-k}$ . Dividiendo por la cantidad total de conjuntos de 9 variables:

$$p = \frac{\binom{N-k}{9-k}}{\binom{N}{9}} = \frac{(N-k)!/(9-k)!(N-9)!}{N!/(N-9)!9!} = \frac{9 \cdot 8 \dots (9-k+1)}{N \cdot (N-1) \dots (N-k+1)}$$

Para  $r$  muestras independientes la probabilidad de que el conjunto original de  $k$  variables no haya sido contemplado en ninguna muestra es  $(1-p)^r$ .

Suponiendo  $N = 116$  y  $r = 1.000.000$  obtenemos:

$$k = 4 \quad p = 1,8 \times 10^{-5} \quad (1-p)^r = 2,2 \times 10^{-8}$$

Es decir que prácticamente la totalidad de los conjuntos de 4 variables ha sido contemplada en alguna muestra.

$$k = 5 \quad p = 7,9 \times 10^{-7} \quad (1-p)^r = 0,46$$

De modo que el 54% de los conjuntos de 5 variables ha sido contemplado.

$$k = 6 \quad p = 2,8 \times 10^{-8} \quad (1-p)^r = 0,97$$

Sólo el 3% de los conjuntos de 6 variables ha sido contemplado. Dado que la cantidad de correlaciones minimales de tamaño 6 que el algoritmo halla es considerablemente grande, cabe preguntarse si esta muestra del 3% es suficientemente representativa o no para los fines del diagnóstico de fallas.

## 2.2 Diagonal Dominancia

Se busca un criterio que permita descartar eficientemente conjuntos de variables que no presentan correlación. Dado que el cálculo de los valores singulares insume una cantidad de tiempo apreciable al realizarlo gran cantidad de veces, se busca un método computacionalmente menos costoso.

Una matriz  $A$  de orden  $k \times k$ , se dice *estrictamente diagonal dominante* cuando

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$$

Es sabido que las matrices estrictamente diagonales dominantes son inversibles. Esto, aplicado a una matriz de correlación, es equivalente a que el menor valor singular sea distinto de 0. De esta forma, es esperable que exista un criterio similar al siguiente: para cierta constante pequeña  $C > 0$ , las desigualdades

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| + C$$

garantizan que las variables no están correlacionadas en la medida requerida.

**Evaluación de la propuesta:**

Para realizar una valoración de la propuesta se consideraron 50 variables con 7034 observaciones, para la cual se obtuvo una matriz de correlación de orden  $50 \times 50$ , y se consideraron relaciones entre tres y cuatro variables, de modo que las sub matrices de correlación fueron de orden  $3 \times 3$  y de orden  $4 \times 4$ . En la tabla 2 se muestran los resultados. La columna que indica el total de sub matrices que son estrictamente diagonales dominantes, el 80,7 % del total matrices de  $3 \times 3$ , y el 47,8% de total de matrices de  $4 \times 4$ , no habría que aplicarles el PCA. La columna encabezada con Fallos, está relacionada con la cantidad de sub matrices que son de diagonal estrictamente dominante, y sin embargo las dos primeras componentes principales explican el 95% o más de la correlación.

Orden de las matrices	Total de combinaciones	Total Diagonal Dominante	Fallos
$3 \times 3$	14190	11447 (80.7 %)	376 (2,65 %)
$4 \times 4$	148995	71154 (47.8 %)	2365 (1,6 %)

Table 2: Resultados Obtenidos para  $n = 3$  y  $4$

**2.3 Cota del Determinante**

Sea  $B$  la matriz de correlación de un conjunto de  $n$  variables con  $m$  observaciones. Al ser  $B$  una matriz de correlación, tiene las siguientes propiedades:

- Es Simétrica, semidefinida positiva (o sea,  $\langle Bx, x \rangle \geq 0 \forall x$ )
- Tiene unos en la diagonal

Por lo tanto, diagonaliza en base ortonormal (teorema espectral para operadores autoadjuntos reales).

Sean entonces

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$$

los autovalores de  $B$  contados con multiplicidad.

Dado que nos interesa discernir si  $\lambda_n < cn$ , con  $c = 0,05$ , observamos que en dicho caso el determinante será menor a una constante, como mostramos a continuación. Utilizamos la desigualdad aritmético-geométrica para los restantes  $n - 1$  autovalores. Notar que si alguno de ellos es 0 la cota vale trivialmente.

$$\det(B) = \left( \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \right) \lambda_n \leq \left( \frac{\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i}{n-1} \right)^{n-1} \lambda_n <$$

$$< \left( \frac{\text{tr}(B)}{n-1} \right)^{n-1} cn = \left( \frac{n}{n-1} \right)^{n-1} cn < e.cn$$

Si  $\det(B)$  supera esa cota, se puede asegurar que el conjunto de variables considerado no presenta correlaciones útiles y puede ser descartado. Notar que, aplicando la desigualdad aritmético-geométrica para todos los autovalores obtenemos  $\det(B) \leq 1$  sin importar si existe o no correlación. De modo que la cota pierde efectividad a medida que  $n$  crece.

### 3 Otros métodos propuestos

Entre los otros métodos propuestos para continuar con el problema, se presentan los más importantes

#### 3.1 Métodos para reducir matrices relacionadas a grafos a forma de bloques

Existen algoritmos destinados a reducir matrices relacionadas a un grafo a una matriz en banda, u otras matrices similares con mejores propiedades algebraicas. Se sugirió que un cambio en el orden de las variables (intercambio de dos filas seguido por el intercambio de las dos columnas correspondientes), podría permitir mejorar el caso en que el problema resulta reducible y se puede llevar a forma de bloques. En este sentido, e inspirados en la idea de la diagonal dominancia, se llegó a probar el reordenamiento de filas y columnas de la matriz, de acuerdo a la norma 1 de la fila o columna correspondiente (de mayor a menor, y respetando el mismo cambio en filas y columnas para que represente sólo una permutación de las variables).

Los resultados muestran que si bien no se consigue una forma de bloques, la matriz presenta un mejor aspecto, con los elementos de mayor magnitud cerca de la diagonal, lo que hace que parezca valer la pena un análisis posterior más profundo.

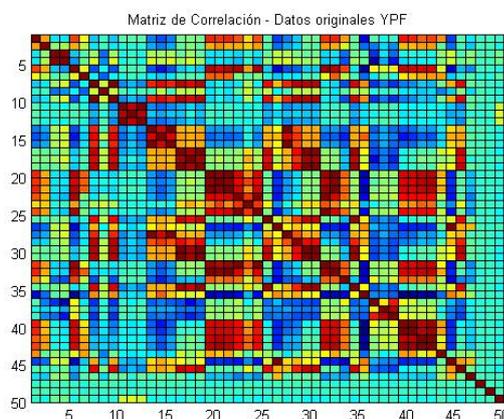


Figura 5: Matriz Original de Correlación

#### 3.2 Eliminación de variables excesivamente correlacionadas

Se observa que existe en la matriz de correlación algunas variables con correlación superior al 99%, lo que hace que el comportamiento de una de estas variables con respecto al resto sea exactamente

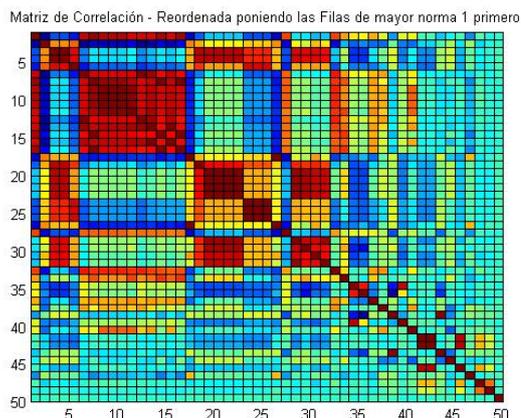


Figura 6: Matriz reordenada según norma 1 de las filas, en orden descendente

el mismo, resultando intercambiables entre sí. Si bien el grupo es pequeño (aproximadamente 10 variables), en una combinatoria tan grande la mejora puede resultar significativa

### 3.3 Otros métodos algebraicos

Se plantea que se pueden encontrar otros métodos algebraicos similares a Diagonal Dominancia, que permitan mediante ecuaciones simples verificar directamente en la matriz de correlación, que el correspondiente subgrupo de variables va a ser útil o no. Esto requiere mayores investigaciones en las características de las matrices involucradas.

### 3.4 Cálculo del autovalor más chico de la matriz de correlación en lugar de PCA

El comando PCA de matlab calcula todos los autovalores de la matriz de correlación. Es esperable que exista una forma más eficiente de obtener (o incluso estimar convenientemente) solamente el autovalor más chico, que es el unico que se requiere. Por ejemplo explotando el hecho de que el autovalor mínimo de una matriz real  $A$  simétrica y semidefinida positiva es igual a  $\|A\| - \|A - \|A\|.Id\|$ .

## Referencias

- [1] Varmuza, K., Filzmoser, P., *Introduction to multivariate statistical analysis in chemometrics*, CRC Press, 2009.
- [2] Elden, L. *Matrix Methods in Data Mining and Pattern Recognition*, SIAM, Philadelphia, USA, 2007.