

Título:	ANÁLISIS NUMÉRICO DE MODELOS MATEMÁTICOS Y PROBLEMAS INVERSOS EN TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS.
Doctorando:	Juan-Antonio Infante del Río.
Director/es:	Angel Manuel Ramos del Olmo José María Rey Cabezas.
Defensa:	24 de noviembre de 2009, Madrid.
Calificación:	Sobresaliente cum laude por unanimidad.

Resumen:

Una de las tecnologías que pueden usarse para el procesado de alimentos desde el punto de vista industrial, sin degradar las propiedades organolépticas y nutricionales de los mismos, es el tratamiento a altas presiones. Su desarrollo a nivel de investigación arrancó a principios de los años noventa (del siglo pasado), materializándose sus primeras aplicaciones comerciales ya desde mediados de la misma década.

El objetivo de esta memoria es la modelización de este tipo de procesos, haciendo especial énfasis en los aspectos numéricos, es decir, en su simulación computacional, con vistas a marcar pautas que permitan diseñar metodologías que contribuyan a la optimización de los tratamientos. La exposición de los resultados se ha estructurado en tres partes. La primera de ellas se centra en la modelización del tratamiento de alimentos mediante altas presiones y su simulación numérica; la segunda y la tercera versan sobre la identificación aproximada de sendos parámetros termofísicos que aparecen en los modelos presentados en la primera parte, para versiones simplificadas de los mismos.

Los modelos que se utilizan en este contexto son complejos (ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos débilmente compresibles acopladas con transferencia de calor) y requieren sofisticadas herramientas numéricas para su resolución aproximada. Pero además, en las ecuaciones aparecen un conjunto de coeficientes ligados a parámetros físicos (densidad, calor específico, conductividad térmica, coeficiente de intercambio de calor, coeficiente de dilatación, etc.) característicos de los materiales en los que están planteadas. Se da la circunstancia de que los valores de estos coeficientes, que son sensibles a los cambios de presión y temperatura, no suelen ser conocidos para presiones distintas de la atmosférica.

Esto hace que para aproximar numéricamente el comportamiento del modelo haya que prescribir dichos valores mediante argumentos heurísticos o basados en metodologías experimentales, como se hace en el estudio llevado a cabo en el Capítulo 1. Allí se presenta un modelo matemático que permite trabajar con

fluidos compresibles. Mediante su simulación numérica se consigue describir el comportamiento térmico y fluidodinámico de la muestra de alimento, cuando es sometida a un tratamiento a altas presiones.

Por otro lado, puesto que parte de la degradación de los alimentos la producen enzimas presentes en ellos, es importante que los tratamientos aplicados consigan reducir al máximo su actividad. Con la vista puesta en este objetivo, el modelo termofluidodinámico citado se acopla con ecuaciones cinéticas que modelizan la actividad de diversas enzimas. Mediante su resolución numérica se consigue estimar la actividad de estas enzimas tras el uso de diversos tratamientos.

Existen en la literatura otros trabajos con estos objetivos, aunque en ninguno se explicitan los modelos en la medida en que aquí se hace; además, nuestra forma de acoplar la actividad enzimática con la transferencia de masa y calor es original, pues se realiza a posteriori, una vez aproximada la distribución de temperatura. Asimismo, nosotros presentamos un estudio comparativo del modelo completo frente a otros modelos más sencillos; este estudio es de gran interés, pues puede justificar el uso de modelos simplificados en los primeros pasos de una eventual optimización del diseño de los tratamientos (los resultados obtenidos para las enzimas estudiadas dan prueba de ello). Finalmente, en esta primera parte llevamos a cabo un novedoso análisis de sensibilidad de los modelos respecto a errores en los datos; la conveniencia de conocer cómo de sensibles se muestran los modelos a estos errores se justifica, no sólo en la probable presencia de errores de medición, sino en la citada metodología con la que se determinan los parámetros termofísicos que aparecen en las ecuaciones que gobiernan los modelos. Este análisis muestra que dicha sensibilidad depende, en gran medida, de la enzima en consideración.

La motivación del trabajo que se recoge en las partes segunda y tercera de esta memoria es la mencionada falta de información relativa a los parámetros físicos de este tipo de problemas. Se plantea la posibilidad de identificar los valores que, para cada material en concreto, toman esos coeficientes en un rango de temperaturas y presiones dados. La idea es realizar una cantidad (lo menor posible) de experimentos en los que se realicen mediciones de la temperatura (magnitud sencilla de medir) y, a partir de ellas, intentar determinar los valores de algunos de los parámetros. Esto nos coloca en el contexto de los problemas inversos en los que, a partir de cierto conocimiento de la solución de un problema, se pretende obtener información sobre el modelo que lo gobierna. En este contexto se diseñan algoritmos numéricos mediante los que se consigue identificar dos de estos parámetros.

En concreto, en la segunda parte se suponen simplificaciones del modelo que llevarán a plantearlo como un problema de valor inicial en dimensión uno, en el que el parámetro que se pretende identificar es un coeficiente de intercambio de calor que puede depender de la presión (que se supone conocida) y de la temperatura (que es la incógnita de la ecuación diferencial ordinaria). En la tercera parte, el modelo simplificado se plantea como una ecuación en derivadas parciales con condiciones de contorno mixtas, siendo el coeficiente de conductividad térmica el objeto de la identificación.

Abordamos la identificación de estos coeficientes en el supuesto de que la única información que se tiene sobre ellos es meramente cualitativa (continuidad, positividad, . . .). Presentamos una variada gama de metodologías (experimentos especialmente diseñados, algoritmos basados en la diferenciación aproximada, estrategias de regularización, métodos de colocación) todas ellas originales en este contexto.

Los métodos utilizados en esta memoria se han mostrado eficaces para resolver los problemas planteados. Han proporcionado resultados adecuados para la aproximación de los coeficientes que se pretendía identificar y proporcionan una muy satisfactoria aproximación de la temperatura para las distintas simulaciones que, utilizando tal identificación aproximada, se han realizado para una variada gama de datos de partida.