UNIVERSIDAD DE CONCEPCI'ON FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

Identificación de la función densidad de flujo mediante medición de curvas de asentamiento de suspensiones y simulación numérica de sedimentación continua

Director de memoria: Raimund Bürger. Departamento de Ingeniería Matemática Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas Universidad de Concepción

Co-Director de memoria: Fernando Betancourt. Departamento de Ingeniería Metalúrgica Facultad de Ingeniería Universidad de Concepción

Memoria para optar al título de

Ingeniero Civil Matemático

CAMILO MEJÍAS NEIRA MARZO 2015 CONCEPCIÓN - CHILE

Comisión examinadora :	Dr. Fernando Betancourt
	Dr. Raimund Bürger
	Dr. Freddy Paiva
	Dr. Hector Torres

Índice general

Índice general					
Ín	ndice de figuras				
Ín	dice d	le tabla	S	V	
1.	Intr	o ducci ó	n: La importancia del agua	5	
	1.1.	La recu	uperación del agua en el proceso minero	. 5	
	1.2.	Tratam	niento de aguas servidas	. 6	
	1.3.	El espe	esador	. 9	
		1.3.1.	Modelos Macroscópicos	. 9	
		1.3.2.	La contribución de Kynch	. 11	
	1.4.	Contri	bución	. 12	
	1.5.	Enfoqu	le	. 12	
2.	Sedi	mentac	ión batch	15	
	2.1.	Model	o matemático de sedimentación batch	. 16	
		2.1.1.	Función de densidad de flujo $f_{\rm b}$. 18	
		2.1.2.	Propiedades de solución	. 20	
		2.1.3.	Test de Kynch	. 21	
		2.1.4.	Test de Diehl	. 24	
	2.2.	Soluci	ón al problema inverso por fórmulas de representación	. 25	
		2.2.1.	Fórmulas de representación para el test de Kynch	. 25	
		2.2.2.	Ajuste a trozos de la discontinuidad convexa de un test de Kynch	. 27	
			2.2.2.1. Método de ajuste cuadrático (quadratic-fit)	. 29	
			2.2.2.2. Método de ajuste por una spline (spline-fit)	. 30	
			2.2.2.3. Método de ajuste por función racional (special-fit)	. 31	
		2.2.3.	Fórmulas de representación para el test de Diehl	. 33	
		2.2.4.	Ajuste a trozos de la discontinuidad cóncava de un test de Diehl	. 34	
			2.2.4.1. Ajuste cuadrático (quadratic-fit)	. 34	
			2.2.4.2. Ajuste por spline (spline-fit)	. 35	
			2.2.4.3. Ajuste por función racional (special-fit)	. 35	

	2.3.	Implen 2.3.1. 2.3.2. 2.3.3. 2.3.4.	nentación computacionalProblema de programación cuadrática para el test de KynchProblema de programación cuadrática para el test de DiehlReconstrucción de f_b con datos experimentalesSuavización de f_b	. 36 . 36 . 41 . 41 . 45
3.	Exp	eriment	os batch	47
	3.1.	Experi	mentos de laboratorio	. 47
		3.1.1.	Descripción de los instrumentos usados	. 48
			3.1.1.1. Sedirack	. 48
		3.1.2.	Viscosímetro Haake Rotovisco RV 20	. 50
			3.1.2.1. Picnómetro	. 51
	3.2.	Experi	mento A	. 52
		3.2.1.	Procedimiento para concentraciones $\phi_0 \in [0.258, 0.338]$. 53
		3.2.2.	Procedimiento para concentraciones $\phi_0 \in [0, 0.25]$. 54
		3.2.3.	Dificultades	. 56
		3.2.4.	Conclusiones	. 57
	3.3.	Experi	mento B	. 64
		3.3.1.	Resultados AD100	. 65
		3.3.2.	Conclusiones	. 71
	3.4.	Experi	mentos de literatura	. 72
		1		• • =
4.	Sedi	mentac	ión continua	75
4.	Sedi 4.1.	mentac i Funcio	ión continua nes constitutivas	75 . 79
4.	Sedi 4.1. 4.2.	mentac i Funcio Discret	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81
4.	Sedi 4.1. 4.2.	mentaci Funcio Discret 4.2.1.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81
4.	Sedi 4.1. 4.2.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82
4.	Sedi 4.1. 4.2.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3.	ión continuanes constitutivastización del modeloAproximación del flujo convectivoCondición CFLEjemplos numéricos	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentac Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experi	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 83 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1.	ión continua nes constitutivas tización del modelo Aproximación del flujo convectivo Condición CFL Ejemplos numéricos mento continuo Descripción del equipo	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 83 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1. 4.3.2.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experit 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experir 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 88
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experi 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 88 . 88
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5. 4.3.6.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 88 . 88
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experi 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5. 4.3.6. 4.3.7.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5. 4.3.6. 4.3.7. 4.3.8.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5. 4.3.6. 4.3.7. 4.3.8. 4.3.9.	ión continuanes constitutivastización del modeloAproximación del flujo convectivoCondición CFLEjemplos numéricosmento continuoDescripción del equipoMicrotrac S3500Columna de acrílicoBomba peristálticaDescripción del experimentoMaterial utilizadoFloculanteParámetros del ensayoAntes del ensayo	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87
4.	Sedi 4.1. 4.2. 4.3.	mentaci Funcio Discret 4.2.1. 4.2.2. 4.2.3. Experin 4.3.1. 4.3.2. 4.3.3. 4.3.4. 4.3.5. 4.3.6. 4.3.7. 4.3.8. 4.3.9. 4.3.10.	ión continua nes constitutivas	75 . 79 . 81 . 81 . 82 . 83 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87 . 87

	5.1. 5.2.	Test de Diehl Interpretación de los resultados obtenidos	105 106
A.	Expe	erimento A - Gráficos y tablas	107
B.	Expo B.1.	erimento B - Gráficos y tablas B.0.1. AD_100.eps AD150.eps B.1.1. AD_200.eps	111 117 126 137

Bibliografía

Índice de figuras

0.1.	Esquema muestra los pasos necesarios para implementación de un simulador continuo.	2
1.1.	Esquema de una planta de tratamiento de aguas servidas	8
1.2.	Espesador de Dorr	10
2.1.	Esquema de una sedimentación batch. Las partículas sólidas caen hacia el fondo por acción de la gravedad (R. Bürger, comunicación privada).	16
2.2.	Función de flujo batch ajustada por Richardson y Zaki con $v_0 = 15$ y $n_{\rm RZ} =$	
	10	19
2.3.	Linea característica de (2.5)	21
2.4.	"Test de Kynch". Izquierda: la función $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi) = -f_{\rm bk}(\phi)$. La secante por el punto $(\phi_{\rm máx}, 0)$ posee la pendiente $f'_{\rm b}(\phi_{\rm máx})$. Derecha: solución de (2.5), (2.6), con la función inicial dada por (2.9), para $\phi_0 \in (\phi^{**}_{\rm máx}, \phi_{\rm máx}]$. Las líneas delgadas son características, y las líneas gruesas son discontinuidades, con la excepción de x_2 , que es una línea de continuidad. La solución asume valores	
	en $\{\phi_0\} \cup [\phi_0^*, \phi_{\max}]$ [14].	22
2.5.	"Test de Diehl". Izquierda: la función $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi)$ con algunos de los valores de ϕ que aparecen en la solución. Derecha: solución de (2.5), (2.6), con la función inicial dada por (2.10), para $\phi_0 \in (\phi_{\rm infl}, \phi_{\rm máx}]$. Las líneas delgadas son características, y la líneas gruesas son discontinuidades, con la excepción de x_4 , que es una línea de continuidad. La trayectoria cóncava $x = h(t)$,	
	medible experimentalmente, es una transformada de $f_{\rm b}$ para $\phi \in [\phi_{\rm a}, \phi_{0*}]$ [14].	23
2.6.	Esquema de una solución f_b mediante la reconstrucción local del 2.2	42
2.7.	Problema de la no continuidad de $f_{\rm b}$ si aseguramos sólo continuidad en la	
•		43
2.8.	Reconstruction de f_b que no es C^1	44
2.9.	$f_{\rm b}$ reconstruida y suavizada en intervalo $(\phi_{\rm infl}, \phi_2)$	46
3.1.	(a) Equipo de SediRack. (b) Captura de pantalla del software propio con in- terfaces suspensión-agua medidas por SediRack.	49
3.2.	Viscosímetro Haake Rotovisco RV 20	50
3.3.	Picnómetro de 100mL de volumen bajo estándar ASTM D-854	52

3.4.	Ensayo experimental con esferas de vidrio de tamaño $(0.6, 0.8)mm$, en un tubo de acrílico de altura $H = 287$ y con un glicerina al 95 % como líquido.	54
3.5.	Reconstrucción de la curva \check{h} , con 4 subintervalos, utilizando el método quad- fit	58
3.6.	Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 4 subintervalos, utilizando el método quad- fit.	58
3.7.	Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.	59
3.8.	Función $f_{\rm c}$ reconstruida completamente con quad-fit.	59
3.9.	Reconstrucción de la curva \check{h} , con 4 subintervalos, utilizando el método spline- fit.	60
3.10.	Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 4 subintervalos, utilizando el método spline- fit.	60
3.11.	Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.	61
3.12.	Función $f_{\rm c}$ reconstruida completamente con spline-fit.	61
3.13.	Reconstrucción de la curva \check{h} , con 6 subintervalos, utilizando el método special- fit	62
3.14.	Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 6 subintervalos, utilizando el método special- fit	62
3.15.	Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.	63
3.16.	Función $f_{\rm b}$ reconstruida completamente con special-fit.	63
3.17.	Datos experimentales	66
3.18.	Reconstrucción \check{h} sobre datos experimentales	68
3.19.	$f_{\rm b}$ superpuesta en un mismo gráfico	68
3.20.	Promedio de las funciones de flujo.	69
3.21.	$f_{\rm b}$ superpuesta en un mismo gráfico.	69
3.22.	Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.148$	70
3.23.	Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.213$.	70
3.24.	Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.289$	71
3.25.	Ajuste de \check{h} para datos provenientes de lodo activado [76] con un subintervalo v usando el método spline-fit	73
3.26.	Ajuste de \check{f}_b para datos provenientes de lodo activado [76] con un subintervalo v usando el método spline-fit	73
3.27.	Ajuste de \tilde{h} para datos provenientes de lodo activado [76] con dos subinterva- los y usando el método spline-fit	74
3.28.	Ajuste de $\check{f}_{\rm b}$ para datos provenientes de lodo activado [76] con dos subinter- valos y usando el método spline-fit.	74

4.1.	Vista esquemática de un espesador-clarificador, sin detalles técnicos [21].	76
4.2.	Concepto uni-dimensional de un clarificador-espesador (izquierda). Experi- mento real de un espesador (derecha).	77
4.3.	Microtrac. Equipo para medir el tamaño de las partículas usando un arreglo de tres lasers para ello.	88
4.4.	Columna de acrílico en proceso de sedimentación batch posterior al experi- mento continuo.	89
4.5. 4.6.	Montaje del experimento continuo en columna de acrílico de 50 cm Ensayos de sedimentación batch con y sin floculante con relave de cobre para una concentración al 12 % cp ($\phi = 0.0479$)	90 92
4.7.	Ensayos de sedimentación batch con relave de cobre floculado para una con- centración al 23 % cp ($\phi = 0.0993$)	92
4.8.	Partes del proceso del experimento continuo	94
4.9.	Flujos de alimentación para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	95
4.10.	Flujos de descarga para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	95
4.11.	Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	96
4.12.	Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	96
4.13.	Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	97
4.14.	Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante	97
4.15.	Flujos de alimentación para relave final de cobre al 12 % cp con floculante	98
4.16.	Flujos de descarga para relave final de cobre al 12 % cp con floculante	98
4.17.	Flujos de floculante para relave final de cobre al 12 % cp con floculante	99
4.18.	Fracción de masa de la alimentación para relave final de cobre al 12 % cp con floculante.	99
4.19.	Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp con floculante	100
4.20.	Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp con floculante	100
4.21.	Fluios de alimentación para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	101
4.22.	Flujos de descarga para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	101
4.23.	Flujos de floculante para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	102
4.24.	Fracción de masa de la alimentación para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	102
4.25.	Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	102
4.26.	Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 23 % cp con floculante	103

B.1. \check{f} simulada con $\phi_0 = 0.148$	112
B.2. Construcción parte cóncava y posterior suavización con $\phi_0 = 0.148$	112
B.3. $f_{\rm bk}$ para $\phi = 0.148$	113
B.4. \check{f} simulada con $\phi_0 = 0.213$	113
B.5. Construcción parte cóncava y posterior suavización $\phi_0 = 0.213$	114
B.6. $f_{\rm bk}$ para $\phi = 0.213$.	114
B.7. Construcción parte cóncava y posterior suavización $\phi_0 = 0.213$	115
B.8. $f_{\rm bk}$ para $\phi = 0.213$.	115
B.9. \check{f} simulada	116
B.10. Construcción parte cóncava y posterior suavización	116
B.11. Datos AD100.eps	117
B.12. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	117
B.13. \check{f} simulada	118
B.14. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	118
B.15. $f_{\rm bk}$ AD100.eps	119
B.16. Problema directo sobre los datos	119
B.17. Datos AD100.eps	120
B.18. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	120
B.19. \check{f} simulada	121
B.20. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	121
B.21. $f_{\rm bk}$ AD100.eps	122
B.22. Problema directo sobre los datos	122
B.23. Datos AD100.eps	123
B.24. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	123
B.25. \check{f} simulada	124
B.26. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	124
B.27. $f_{\rm bk}$ AD100.eps	125
B.28. Problema directo sobre los datos	125
B.29. Reconstrucción de \check{h} para los datos experimentales AD150	126
B.30. Funciones de flujo $f_{\rm b}$ para AD150	127
B.31. Función de flujo $f_{\rm b}$ promediada de AD150	127
B.32. Datos AD150.eps	128
B.33. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	128
B.34. \check{f} simulada	129
B.35. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	129
B.36. $f_{\rm bk}$ AD150.eps	130
B.37. Problema directo sobre los datos	130
B.38. Datos AD150.eps	131
B.39. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	131
B.40. \check{f} simulada	132
B.41. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	132

B.42. f_{bk} AD150.eps	.33
B.43. Problema directo sobre los datos 1	.33
B.44. Datos AD150.eps	.34
B.45. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $.34
B.46. \check{f} simulada	.35
B.47. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots $.35
B.48. <i>f</i> _{bk} AD150.eps	.36
B.49. Problema directo sobre los datos	.36
B.50. Reconstrucción de \check{h} para los datos experimentales AD200	37
B.51. Funciones de flujo $f_{\rm b}$ para AD200	38
B.52. Función de flujo $f_{\rm b}$ promediada de AD200	38
B.53. Datos AD200.eps	39
B.54. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	39
B.55. \check{f} simulada	40
B.56. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots $	40
B.57. $f_{\rm bk}$ AD200.eps \ldots 1	41
B.58. Problema directo sobre los datos	41
B.59. Datos AD200.eps	42
B.60. \check{h} simulada $\phi_{0.eps} = \ldots $	42
B.61 . \check{f} simulada 1 1 1	43
B.62. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots $	43
B.63. $f_{\rm bk}$ AD200.eps $\ldots \ldots \ldots$	44
B.64. Problema directo sobre los datos	44
B.65. Datos AD200.eps	45
B.66. \check{h} simulada $\phi_{0.eps}$ =	45
B.67. \check{f} simulada 1	46
B.68. Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} = \ldots $	46
B.69. $f_{\rm bk}$ AD200.eps	47
B.70. Problema directo sobre los datos	.47

Índice de tablas

1.1.	Niveles del tratamiento de aguas residuales [87].	• •	•	•	•	•	7
3.1.	Resumen de tamaños de las partículas sólidas del Experimento B.				•		64

Resumen

El espesamiento es un proceso muy importante, tanto en la industria minera (del cobre) como en el tratamiento de aguas servidas, pues está dedicado a la recuperación de agua, para volver a ser usadas o bien devolver a cuerpos de agua.

Para modelar la sedimentación al interior de un espesador (ver Figura 0.1) es necesario encontrar una función de flujo f_b a través de ensayos batch de laboratorio. Existen dos métodos, uno global paramétrico, el cual dado algunas curvas a priori de $f_b(\phi)$, ajusta parámetros artificiales a través de un perfil de sedimentación h(t). Este método es el más utilizado en la actualidad, sin embargo está sujeto errores de sensibilidad. Otro método es una estimación local cerrada, esto es, a través de un perfil de sedimentación h(t), se encuentra una fórmula algebraica cerrada de la función de flujo $f_b(\phi)$. Este método es preciso si se conoce una forma analítica del perfil de sedimentación. Como esto no es posible, pues son mediciones experimentales, se hace un ajuste por mínimos cuadrados de esta nube de puntos y luego se aplica la forma algebraica antes mencionada. El error de sensibilidad en este caso es reducido drásticamente debido a que el ajuste de parámetros se realiza en un mismo espacio, más aún si el ajuste se hace por subintervalos. En esta memoria validamos la teoría de una construcción de f_b a través del método local mediante datos experimentales propios y datos obtenidos de la literatura. Además entregamos algunos criterios y reconstrucciones en caso de no poder realizar el test de Diehl, el cual es de difícil implementación.



Figura 0.1: Esquema muestra los pasos necesarios para implementación de un simulador continuo.

Posteriormente se entrega un método numérico para implementar un simulador de sedimentación continua, que admita una función de flujo reconstruida a trozos (por subintervalos) como fue calculada previamente y se muestran ejemplos numéricos. Finalmente se entrega documentación de tres ensayos de espesamiento con material de relave final de cobre, para ser tratados en futuros métodos para validación.

Cabe destacar que los resultados son muy favorables para muestras ideales en diferentes materiales, además, la implementación del simulador puede admitir en algún futuro software en línea para la industria, debido a que los parámetros de entrada son datos que corresponden a la operación del día a día de un espesador (Figura 0.1).

Capítulo 1

Introducción: La importancia del agua

"El agua y el saneamiento son uno de los principales motores de la salud pública. Suelo referirme a ellos como *Salud 101*, lo que significa que en cuanto se pueda garantizar el acceso al agua salubre y a instalaciones sanitarias adecuadas para todos, independientemente de la diferencia de sus condiciones de vida, se habrá ganado una importante batalla contra todo tipo de enfermedades¹.

Actualmente, uno de cada nueve habitantes del planeta no tiene acceso a agua potable, al rededor de 800 millones de personas. Al día, mujeres y niños, gastan 200 millones de horas transportando agua [109]. El problema del agua potable es mundial y día a día se hacen esfuerzos para proteger el recurso hídrico. La presente memoria se preocupa precisamente de la recuperación del agua a través de un tanque de sedimentación denominado espesador. El agua clara obtenida de la separación del sólido finoinicialmente en suspensión inicialmente, puede ser reutilizada, por ejemplo en el caso de la industria minera, o bien ser devuelta a cuerpos de agua, en el caso del tratamiento de aguas servidas.

1.1. La recuperación del agua en el proceso minero

La industria minera del cobre en Chile es la industria más grande que posee el país, aporta un tercio de la producción mundial. Es parte importante del crecimiento alto y sostenido que ha tenido la economía chilena en las últimas décadas y es innegable su importancia

¹Dr. LEE Jong-wook, Director General, Organización Mundial de la Salud [113]

para el desarrollo de nuestro país. Geográficamente hablando, la minería en Chile se desarrolla principalmente en zonas desérticas y muy remotas, específicamente en el Desierto de Atacama, el desierto más árido del mundo, donde el agua es un recurso escaso, pero a la vez vital para la separación de los metales, como el cobre y la roca dinamitada, por esta razón la recuperación del agua y la investigación en nuevas tecnologías que permitan obtener procesos más eficientes son de interés público y deben ser estudiados.

La sedimentación continua de suspensiones de partículas sólidas finas dispersas en un fluido viscoso es un proceso que recupera el agua utilizada en los procesos de conminución (reducción de tamaño) y flotación (separación del mineral deseado de la ganga) en las plantas de beneficio de minerales de cobre sulfurados. La primera y más importante etapa de recuperación de agua es el espesamiento, es decir, la sedimentación continua, donde se utilizan grandes estanques cilíndricos en los cuales se produce la separación de sólidos y líquidos por efecto de la gravedad. Aquí, junto con desear recuperar la mayor cantidad posible de este recurso después del proceso de sedimentación, también se busca generar un relave lo más seco posible para que en su posterior depósito en lugares de acopio este minimice los riesgos de producir contaminación a las napas subterráneas por medio de líquidos percolados. El objetivo es desarrollar un modelo matemático para la simulación, el diseño y el control de la sedimentación continua.

1.2. Tratamiento de aguas servidas

El tratamiento de aguas residuales consiste en una serie de procesos físicos, químicos y biológicos que tienen como fin eliminar los contaminantes presentes en el agua efluente del uso humano.

En Chile, el tratamiento de las aguas servidas se ha incrementado sustancialmente en los últimos años, alcanzando un nivel de cobertura cercano al 99.8 % respecto a las aguas servidas recolectadas de la población urbana nacional, lo cual ha posibilitado la descontaminación paulatina de los cursos de aguas marítimas y continentales.

Las aguas residuales son líquidos que normalmente provenienen de lavamanos, baños, cocinas, industrias, comercios, etc; los cuales son desechados a las alcantarillas o cloacas. Estas alcantarillas desembocan en una planta de aguas servidas que tiene diversos niveles

Nivel de tratamiento	Descripción
Preliminar	Remover los objetos grandes tales como trapos, palos, ele-
	mentos flotantes, arena y grasa que pueden causar proble-
	mas de mantenimiento u operacionales en los procesos si-
	guientes
Primaria	Eliminación de una porción de los sólidos y materia orgáni-
1 milana	ca suspendidos del agua residual.
Primaria avanzada	Eliminación mejorada de sólidos y materia orgánica suspen-
	didos. Típicamente acompañado por una adición de algún
	químico o un proceso de filtración.
Secundario	Eliminación de material orgánico biodegradable (en solu-
	ción o suspensión) y sólidos suspendidos. Desinfección es
	también típicamente incluido en la definición de un trata-
	miento secundario convencional.
Secundario con elimi-	Eliminación de material orgánico y sólido suspendido bio-
nación de nutrientes	degradable y nutrientes (nitrógeno, fósforo, o ambos).
Terciario	Eliminación de sólidos suspendidos residuales (después del
	tratamiento secundario).
Avanzado	Eliminación de material disuelto y suspendido después de
	un tratamiento biológico normal, cuando se requiere reuti-
	lizar el agua para ciertas aplicaciones.

Tabla 1.1: Niveles del tratamiento de aguas residuales [87].

de tratamiento (ver Tabla 1.1), devolviendo a los causes de agua un agua procesada menos contaminada que en un comienzo.

El proceso de espesamiento ocurre en los tanques de sedimentación secundaria (SST, *Secondary settling tank*, por sus siglas en inglés) y corresponde al paso final de la etapa secundaria del tratamiento, en donde se retiran los flóculos biológicos del material previamente filtrado, y se produce un agua tratada con bajos niveles de materia orgánica y materia suspendida. Una vez que la masa biológica es removida, el agua resultante, es descargada (o reintroducida) de vuelta al cuerpo de agua natural (corriente, río o bahía) u otro ambiente (terreno superficial o subsuelo), etc. De ser necesario, antes de descargar se puede aplicar un proceso de desinfección adicional.

El proceso se lleva a cabo en una *Planta de tratamiento de aguas residuales*, en la Figura 1.1 se muestra una vista esquemática del proceso del tratamiento biológico de una planta [101].



Activated sludge plant layout

Figura 1.1: Vista general de un tratamiento biológico de aguas residuales simplificado [87].

Además de estos dos procesos mencionados, existen otras aplicaciones, por ejemplo, en la industria papelera y química, medicina, vulcanología, bioreactores, entre otras áreas donde una suspensión inicial homogénea debe ser separada en un líquido clarificado y un sedimento concentrado dentro de un tanque acondicionado para el proceso. En todos estos casos, se considera que la suspensión inicial homogénea está compuesta por partículas sólidas y finas, las cuales son pequeñas comparadas con las escalas tanque que las contiene.

Los modelos de sedimentación y espesamiento que serán tratados son de carácter macroscópicos y poseen la ventaja que pueden ser capaces de predecir el comportamiento de un espesador dado en un tiempo y espacio relativamente grandes, por el contrario, la información microscópica tal como la posición de una partícula dada en cada instante, no es posible de obtener y y tiene poco interés práctico en un proceso de grandes escalas. Para estos modelos, se utilizan consideraciones que representan las partículas sólidas y líquidas como fases continuas superpuestas dentro del tanque; en específico, se tiene una *fase líquida*, la cual se llama a la zona del agua clarificada y una (o varias) *fase sólida (fases sólidas*), en donde se encuentra el sedimento que decanta.

1.3. El espesador

El espesador es un equipo inventado por John Van Nostrand Dorr (1872–1962) en 1905 para las plantas concentradoras de oro en Dakota del Sur y significa el comienzo de la era moderna de espesamiento [35].

El concepto de espesamiento es muy simple y radica en la decantación; consiste en dejar una mezcla líquida y homogénea dentro de un tanque y que las partículas sólidas finas se acumulen en el fondo sólo por efecto de la gravedad, separando así el material sólido, del líquido clarificado en la parte superior. Existen evidencias de este proceso en la cultura egipcia, aproximadamente 2.500 años A.C. [2].

Antes de la innovación de Dorr, los estanques solo poseían un proceso de decantación, es decir un sistema *batch* de sedimentación, el cual es un proceso semi continuo, según documenta Agrícola ya en le año 1556 [1]. El aporte de Dorr radica en ser el primero en evolucionar este proceso semi continuo de decantación, a un proceso continuo de espesamiento; el cual consiste en un tanque que es alimentado por una tubería inserta en él, llamada *alimentación*, la cual agrega continuamente material y éste sedimenta por efecto de la gravedad, obteniendo así en el fondo una mezcla más espesa, la cual es retirada por una tubería en el fondo del tanque, llamada *descarga*, mientras que el agua clara, que se produce en la parte superior, se retira mediante una canaleta, llamada *efluente* [52].

1.3.1. Modelos Macroscópicos

La modelación matemática para procesos de espesamiento y clarificación nace de la mano de Hazen en 1904, [72], quien hace el primer análisis de los factores que afectan la sedimentación de partículas sólidas en una suspensión diluida en agua. Este trabajo demuestra que la variable del tiempo no es un factor a considerar en el diseño de estanque de sedimentación, como si lo son las variables espaciales, específicamente muestra que las porciones de sólido removidas son proporcionales al área superficial del estanque, a las propiedades físicas



(a) Esquema de un Espesador de Dorr. (1) Alimenta- (b) The Dorr thickener of the Nemacolin preparation ción de la mezcla, (2) efluente de agua clara, (3) des- plant. (June 1946 image courtesy of the National Arcarga de material espesado.

Figura 1.2: Espesador de Dorr en 1905.

de las partículas e inversamente proporcional al flujo volumétrico del estanque. Posteriormente, con el espesador ya inventado, en 1912 Mishler, [85], es el primero en demostrar mediante experimentos, que la velocidad de sedimentación de la pulpa es diferente para suspensiones diluidas que para las concentradas. Mientras la velocidad de asentamiento de suspensiones diluidas es generalmente independiente de la altura de la columna de sedimentación, sedimentos densos son gobernados por diferentes leyes y, en este caso, la velocidad de asentamiento incrementa aumentando la altura de la columna. Con esta hipótesis, Mishler deduce una fórmula para obtener la capacidad de un espesador industrial, basado en experimentos de laboratorio. Por otra parte, Coe y Clevenger (1916), [32], realizan en forma independiente un resultado similar a Mishler, pero recomiendan usar experimentos batch de laboratorio para establecer el área unitaria de un espesador.

Luego, en la década de los '20 y '30, numerosos trabajos en el área fueron publicados, [96, 114], pero no realizan contribuciones importantes, como lo que sucede en la próxima década.

En la década del 40', Comings y colaboradores presentan un importante descubrimiento: Demuestran la existencia de cuatro zonas en un espesador continuo. Una zona superior de agua clara, una zona de sedimentación, una zona de compresión y una zona de acción de las rastras (en el caso de haber). Algunas de sus principales conclusiones son:

- En un estado estacionario de un espesador continuo, la concentración de la zona de sedimentación es constante y depende del flujo y no de la concentración de alimentación.
- Para un mismo flujo de alimentación, la concentración de descarga se puede controlar aumentando o disminuyendo la altura del sedimento, lo que corresponde a un aumento o disminución del tiempo de residencia del material en el equipo.

1.3.2. La contribución de Kynch

La década de los 50' está marcada por *una teoría de sedimentación* de Kynch [77], quien plantea que la sedimentación está basada en una ecuación diferencial parcial hiperbólica, en donde el dato inicial, la concentración inicial, se propaga mediante ondas a través del tiempo, formando el perfil de sedimentación. Él resuelve la ecuación explícita del modelo y muestra que conociendo la concentración inicial de la suspensión y la densidad de flujo del sólido, se puede obtener una solución de la ecuación por el método de las características, resultando en zonas donde la concentración varía continuamente (ondas de rarefacción) y en discontinuidades (ondas de choque).

Trabajos posteriores demuestran la validez de la teoría de Kynch para partículas incompresibles y esféricas, por ejemplo bolitas de vidrio. A éstas partículas se les denominó *suspensiones ideales*, [103]. Pero también se establecieron las limitaciones sólo a estas partículas y se muestra que no es aplicable para suspensiones que sufren compresión en el sólido, como las suspensiones floculadas, [69, 70, 71, 92, 93, 94, 104, 116]. En particular, Behn [?] es el primero en relacionar la compresión en el espesamiento con el proceso de consolidación en la composición de suelos. Richardson y Zaki en 1954, [91] proponen una ecuación empírica para describir la velocidad de sedimentación de una suspensión de cualquier concentración. Finalmente, Petty en 1975, [90] propone extender la teoría de Kynch a la sedimentación continua y en la que se propone por primera vez una condición de contorno adecuada en el fondo del espesador. Por otra parte, en la industria surgen nuevos avances en el diseño de espesadores, como el método de Tamalge y Fitch [100] para el *área mínima* de un espesador.

Los esfuerzos de Kynch fueron seguidos por clasificaciones sistemáticas de soluciones cualitativamente diferentes [67, 108]. Basado en los trabajos de Ballou, [?], K.S Cheng [31] y H. Liu [83] (ver [28]), Bustos y Concha [27] y Diehl [46] fueron incorporando apropiadamente estas construcciones dentro de la teoría de soluciones entrópicas de una ley de conservación

escalar con flujo no convexo. El interés en la teoría de Kynch no se hizo esperar, tanto en el procesamiento de minerales, como en el tratamiento de aguas servidas (donde el tema es conocido como la teoría de flujos de sólidos [49]) y otras áreas de aplicación. Se puede ver una discusión más extensa en el tema en los trabajos [25, 50] y [28].

1.4. Contribución

En el año 2008 Diehl propone fórmulas de representación para dos perfiles de sedimentación que pueden ser obtenidos mediante experimentos. Con éstas fórmulas, se puede deducir una ecuación explícita para la función de flujo f_b [48]. Luego en el 2014 se presenta una un método para reconstruir el perfil de sedimentación y se plantea el problema como un el problema inverso [14]. En la presente memoria, se valida ésta teoría a través de:

- Quince ensayos de sedimentación batch con cuatro materiales diferentes. Se hacen simulaciones y en ellas se identifica una función de flujo única para cada material.
- Revisión bibliográfica de más de 80 publicaciones, en los últimos 50 años [7, 8, 33, 34, 40, 41, 51, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 65, 66, 75, 88, 89, 93, 94, 102, 104].

Además, siguiendo la Figura 0.1, una vez construida una fórmula para f_b , se implementa un simulador de espesamiento continuo [15, 16] adaptado para una función de flujo continua a trozos. Finalmente son incluidos datos de espesamiento con material de relave final de cobre, con y sin floculante, para su uso en trabajos futuros.

Esta memoria dio origen a la siguiente publicación (ref. [10]): F. Betancourt, R. Bürger, S. Diehl and C. Mejías, *Advanced methods of flux identification for clarifier-thickener simulation models, Minerals Engineering*, **63** (2014), 2–15.

1.5. Enfoque

La primera parte de esta memoria expone el modelo de sedimentación batch, la teoría que envuelve una ley de conservación y una construcción de la función de flujo a través la

información proporcionada por las características en dos test iniciales. Las reconstrucciones presentan una forma algebraica cerrada.

Debido a diferentes errores en la medición de los datos, se reconstruye un segmento suave y continuo mediante una programación cuadrática con restricciones, luego se aplican las fórmulas de representación para obtener trozos de la función de flujo; Al finalizar el capítulo dos, se entrega una forma alternativa de reconstruir la función de flujo en el caso de no poder realizar uno de los ensayos. Luego, en el capítulo 3, se valida la teoría expuesta mediante la realización de ensayos experimentales y otros recogidos de la bibliografía disponible, específicamente datos no floculados encontrados en Karamisheva [76], detalles específicos pueden ser vistos en el artículo publicado en Minerals Engineering [10]. El capítulo 4 aborda el modelo de espesamiento continuo y un enfoque numérico para la implementación computacional para modelar los datos publicados en el capítulo 5, que corresponden a experimentos reales con relave de cobre. Además se utilizan algunas funciones reconstruidas a partir de los experimentos de sedimentación batch para modelar un proceso continuo. La relevancia de esta parte radica en la dificultad de obtener en la literatura datos experimentales de un proceso continuo. A partir de estas experiencias, se obtiene información valiosa para proponer mejoras en los experimentos a través de automatizaciones electrónicas de algunas variables observadas, lo que se plasma en el último capítulo junto con las conclusiones relevantes de la implementación con muestras reales.

Capítulo 2

Sedimentación batch

Se denomina *sedimentación*, al asentamiento de una partícula, o una suspensión de partículas, en un fluido por efecto de una fuerza externa, que puede ser la gravedad, una fuerza centrífuga o cualquier otra fuerza de cuerpo. Ha sido de gran interés en la historia encontrar una ecuación simple que relacione la velocidad de sedimentación de suspensiones de partículas en un fluido, con su tamaño, forma y concentración. Un objetivo tan simple ha requerido un enorme esfuerzo y ha sido solucionado solamente en parte. Desde los trabajos de Newton (1687) y Stokes (1844) [97] sobre el flujo alrededor de una partícula hasta las investigaciones mas recientes que sólo han podido establecer una teoría heurística, esto es, basada en principios fundamentales de la mecánica, pero con un cierto grado de intuición y empirismo. Hasta ahora se ha resuelto primero la sedimentación de una partícula en un fluido, para luego introducir correcciones debido a la interacción entre partículas, mediante las cuales la sedimentación de una suspensión se ve dramáticamente disminuida.

La *sedimentación batch* corresponde al proceso de asentamiento de muchas partículas originado al interior de una vasija; dicho proceso considera una mezcla sólido-líquido inicialmente homogénea, y tal que la concentración de las partículas sólidas sea la misma en toda la sección transversal de la vasija, donde el diámetro de ésta es mucho mayor al diámetro de las partículas. Se deja actuar en el tiempo y la fuerza externa, en este caso, es la gravedad. El material se acumula en el fondo de la vasija y crece a medida que transcurre el tiempo (ver Figura 2.1).



Figura 2.1: Esquema de una sedimentación batch. Las partículas sólidas caen hacia el fondo por acción de la gravedad (R. Bürger, comunicación privada).

En este capítulo se tratará el modelo de la sedimentación batch, que en su caso ideal se transforma en una ley de conservación. Abordaremos la teoría general de las leyes de conservación y el método de características para entender dos tests relevantes a lo largo de toda la memoria. El *test de Kynch* y el *test de Diehl*, además de como éstos pueden reconstruir una porción de la función de flujo $f_{\rm b}$. Se dará una implementación computacional por medio de una programación cuadrática con restricciones y finalmente se reconstruirá de manera completa $f_{\rm b}$.

2.1. Modelo matemático de sedimentación batch

Supongamos que la sedimentación batch es llevada a cabo en un tubo de altura H, con una sección transversal de área constante a lo largo del tubo. Sea $\phi(x,t)$ la concentración (o fracción volumétrica) de sólidos en una altura x, medida desde el fondo de la vasija, en un tiempo t. Sea la función de flujo de sedimentación batch, denotada por $f_{\rm b}$, una función constitutiva, es decir, depende sólo de la concentración local, $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi)$. Suponemos que $f_{\rm b}$ es una función no negativa, con soporte en $[0, \phi_{\rm máx}]$, así,

$$f_{\rm b}(0) = f_{\rm b}(\phi_{\rm máx}) = 0.$$

donde $\phi_{\text{máx}}$ es la concentración máxima de empaquetamiento. Además f_{b} se considera continua y diferenciable a trozos. asumimos que el flujo es positivo hacia abajo, la cual es opuesta a la dirección del eje x. Consideremos T un tiempo dado, tal que $T \ge 0$, luego el modelo gobernante de sedimentación batch derivado en [26], puede ser expresado por una ecuación escalar de convección-difusión fuertemente degenerada, dado por

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial f_{\rm b}(\phi)}{\partial x} = \frac{\partial^2 A(\phi)}{\partial x^2}, \quad x \in [0, H], \quad 0 \leqslant t \leqslant T, \tag{2.1}$$

$$\phi(x,0) = \tilde{\phi}_0(x), \quad x \in [0,H],$$
(2.2)

$$f_{\rm b}(\phi) + \frac{\partial A(\phi)}{\partial x}\Big|_{x=x_{\rm b}} = 0, \quad x_{\rm b} \in \{0, H\}.$$

$$(2.3)$$

Este problema de valores iniciales y de frontera, posee un término no lineal difusivo

$$\frac{\partial^2 A(\phi)}{\partial x^2},$$

el cual modela la compresibilidad del sedimento en el caso de que la suspensión bajo estudio sea floculada. Este término involucra la función de difusión $A = A(\phi)$, la cual es también específica del material y está dada por:

$$A(\phi) := \int_0^{\phi} a(s) \, \mathrm{d}s,$$

con el integrando

$$a(\phi) := \frac{f_{\rm b}(\phi)\sigma_{\rm e}'(\phi)}{\Delta \varrho g \phi}.$$

A su vez, $\Delta \varrho$ es la diferencia en densidad de masa de sólidos y fluido, g es la aceleración de gravedad, y σ'_{e} denota la derivada de la función esfuerzo efectivo de sólidos $\sigma_{e} = \sigma_{e}(\phi)$. Típicamente se tiene que $\sigma_{e}(\phi) \ge 0$ para todo ϕ , por lo tanto,

$$\sigma_{\rm e}'(\phi) := \frac{\mathrm{d}\sigma_{\rm e}(\phi)}{\mathrm{d}\phi} \begin{cases} = 0 & \text{para } \phi \leqslant \phi_{\rm c}, \\ > 0 & \text{para } \phi > \phi_{\rm c}, \end{cases}$$
(2.4)

donde $\phi_c > 0$ es la concentración crítica o *punto gel* a partir de la cual las partículas entran en contacto físico. En virtud de (2.4) se tiene que

$$a(\phi) \begin{cases} = 0 \quad \text{para } \phi \leqslant \phi_{c} \text{ y } \phi = \phi_{\text{máx}}, \\ > 0 \quad \text{en caso contrario,} \end{cases}$$

por lo tanto la ecuación (2.1) es una ecuación hiperbólica de primer orden para $\phi \leq \phi_c$ y parabólica de segundo orden para $\phi > \phi_c$. Puesto que (2.1) degenera al tipo hiperbólico sobre un intervalo de valores de ϕ de longitud positiva, la ecuación (2.1) se llama *parabólica fuertemente degenerada*. La ubicación de la interfaz suspensión-sedimento, es decir donde $\phi = \phi_c$ (o llamado también nivel de sedimento) es desconocida *a priori*.

La función de flujo f_b y la función esfuerzo efectivo de sólidos σ_e (o bien el coeficiente de difusión $a = a(\phi)$) reflejan propiedades específicas del material bajo consideración. En el caso de suspensiones no floculadas, el término difusivo no está presente y la ecuación (2.1) se reduce a la ley de conservación

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial f_{\rm b}(\phi)}{\partial x} = 0, \qquad (2.5)$$

con dato inicial (2.2),

$$\phi(x,0) = \phi_0(x), \quad x \in \mathbb{R}$$
(2.6)

cuyo estudio es conocido como la teoría de sedimentación cinemática de Kynch [77] y tiene solución mediante el método de las características.

2.1.1. Función de densidad de flujo $f_{\rm b}$

Notemos que para resolver las ecuaciones (2.1)–(2.3) o el modelo idealizado (2.5), (2.6), es necesario conocer la función de flujo batch $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi)$, la cual en el caso ideal, es suficiente para obtener un comportamiento completo del proceso de sedimentación a través del tiempo y espacio. Por lo que los esfuerzos en este problema radican en encontrar esta función constitutiva, es decir, resolver un *problema inverso*.



Figura 2.2: Función de flujo batch ajustada por Richardson y Zaki con $v_0 = 15$ y $n_{RZ} = 10$.

En el tratamiento de aguas servidas y aplicaciones a relaves en la minería del cobre, se tiene en la mayoría de los casos que f_b es una función con sólo un punto de inflexión, más aún, es cóncava en una primera parte y luego convexa. Para determinar dicha función existen dos maneras, la más conocida y popular es asignar una *función plantilla*, es decir, una función que cumpla a priori con las propiedades de f_b , en nuestro caso las propiedades antes señaladas. Luego se ajusta una número finito de parámetros para obtener la función global reconstruida. Por ejemplo, el modelo de Richardson y Zaki [91] considera a la función f_b de la forma,

$$f_{\rm b}(\phi) := \begin{cases} v_0 \phi (1-\phi)^{n_{\rm RZ}} & \text{si } 0 \le \phi \ \le 1, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases},$$

donde ϕ es la concentración volumétrica, mientras que v_0 es la velocidad de sedimentación y $n_{\rm RZ}$ es el *parámetro de Richardson y Zaki*. Ambos parámetros a determinar (ver Figura 2.2). Este enfoque se conoce como *enfoque global paramétrico* y si bien, tanto para la industria, como para la comunidad científica, es un método ampliamente usado, posee una limitación fundamental. Al tener que ajustar una cantidad limitada de parámetros, se pierden grados de libertad en el ajuste, lo que induce errores de sensibilidad al modelo en general, lo que puede afectar dramáticamente si tenemos ecuaciones *stiff* acopladas que involucren $f_{\rm b}$, como es el caso del tratamiento de aguas servidas [87].

Otra manera de encontrar f_b es usar trayectorias observadas y mediante fórmulas de representación encontrar porciones de f_b exactas, luego utilizar una aproximación C^2 para unir estas partes junto con otros puntos conocidos de la función de flujo. Esta técnica de

resolver un problema inverso, requiere que las trayectorias observadas tengan alguna función analítica C^2 , que se construye a través de una técnica de mínimos cuadrados. De esta manera, la función de flujo tiene mayores grados de libertad para ser resuelta, más aún si se utilizan funciones a trozos para identificar las trayectorias.

El objetivo en este capítulo es plantear un problema inverso que encuentre la función de flujo $f_{\rm b}$, este método fue propuesto inicialmente en [14] y se plantean algunas técnicas de reconstrucción para el caso de tener limitaciones de laboratorio en los ensayos requeridos.

Para establecer una teoría adecuada al problema inverso es necesario conocer el problema directo. Veremos dos ensayos experimentales fundamentales, denominados *test*, los cuales al resolver un problema de valores iniciales nos permiten encontrar la solución a través del método de las características, en un sentido físico, la solución corresponde a una interfaz agua-sedimento. Dichos test son el *Test de Kynch* y el *Test de Diehl* (ver [48]).

2.1.2. Propiedades de solución

Las soluciones de (2.5), (2.6) y, en general, para una ley de conservación escalar se representan a través de *características*, esto es, líneas rectas que son las que transmiten el dato inicial $\phi(x, 0) = \phi_0$ a través del tiempo, (Figura 2.3)

$$x(t) = -f_{\mathrm{b}}'(\tilde{\phi}_0(x))t + x_0,$$

con una pendiente

$$\frac{x}{t} = -f_{\rm b}'(\phi(x,t)).$$
(2.7)

Estas características puede ser paralelas y mapear todo el plano (x, t), pero a menudo se intersectan formando *ondas de choque, discontinuidades de contacto* u *ondas de rarefacción*, generando más de una solución al problema. Para la unicidad, las soluciones del problema (2.5), (2.6) y las del problema (2.1)–(2.3) deben ser definidas como *soluciones de entropía*, es decir, como soluciones débiles junto con un principio de selección, la *condición de entropía*. La condición de entropía expresa ciertos principios de relevancia física, proporcionando un criterio de admisibilidad de discontinuidades que separan valores diferentes de la solución.


Figura 2.3: Linea característica de (2.5)

En determinadas circunstancias, y para funciones f_b con exactamente un punto de inflexión, las soluciones de (2.5), (2.6) exhiben choques con trayectorias curvadas (en un diagrama de altura versus tiempo), debido a la interacción de un choque con velocidad inicialmente constante, con una onda de rarefacción. En tal situación, la trayectoria, descrita por una curva $t \mapsto x(t)$, satisface la siguiente identidad (condición de Rankine-Hugoniot):

$$x'(t) = -\frac{f_{\rm b}(\phi^+) - f_{\rm b}(\phi^-)}{\phi^- - \phi^-} =: S(\phi_+, \phi_-),$$
(2.8)

donde ϕ^+ y ϕ^- denotan los valores límites de ϕ adyacentes a la discontinuidad, dichos valores pueden variar como función del tiempo.

2.1.3. Test de Kynch

Se llama *test de Kynch*, a la solución de la ecuación gobernante (2.1), junto con el dato inicial

$$\tilde{\phi}_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x > H, \\ \phi_0 & \text{para } 0 \leqslant x \leqslant H, \\ \phi_{\text{máx}} & \text{para } x < 0, \end{cases}$$
(2.9)



Figura 2.4: "Test de Kynch". Izquierda: la función $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi) = -f_{\rm bk}(\phi)$. La secante por el punto $(\phi_{\rm máx}, 0)$ posee la pendiente $f'_{\rm b}(\phi_{\rm máx})$. Derecha: solución de (2.5), (2.6), con la función inicial dada por (2.9), para $\phi_0 \in (\phi^{**}_{\rm máx}, \phi_{\rm máx}]$. Las líneas delgadas son características, y las líneas gruesas son discontinuidades, con la excepción de x_2 , que es una línea de continuidad. La solución asume valores en $\{\phi_0\} \cup [\phi^*_0, \phi_{\rm máx}]$ [14].

donde $\phi_0 \in (0, \phi_{\text{máx}})$ es la concentración homogéna de la suspensión inicial.

Suponiendo que la suspensión en estudio es no floculada, esto es, que la ecuación gobernante (2.1) es reducida a la ley de conservación (2.5), entonces se tiene que la solución $\phi = \phi(x, t)$ de (2.5),(2.9) denota una interfaz descendiente que separa la suspensión del líquido clarificado, como se puede seguir en la Figura 2.4. Una ventaja de este *test*, es que visualmente la interfaz agua-sedimento puede ser observada a simple vista mediante un experimento de sedimentación batch en algún tubo transparente (ver Figura 2.1). Además, la trayectoria altura versus tiempo de la interfaz puede ser calculada mediante una forma algebraica cerrada a partir de la curva de f_b versus ϕ . De esta manera, para un material dado, la trayectoria observada puede ser convertida en una porción de f_b apropiada para dicho material. Como f_b tiene un punto de inflexión, necesitamos las siguientes operaciones para construir las soluciones de (2.5),(2.9) (ver Ballow 1970, [?]). Dado $\phi \in [0, \phi_{máx}]$, se define

$$\begin{split} \phi^* &:= \max\{u \in [\phi, \phi_{\max}] : \\ f'_{\rm b}(u) &= S(\phi, u) \le S(\phi, v), \; \forall v \in [\phi, u]\}, \\ \phi_* &:= \min\{u \in [0, \phi] : \\ f'_{\rm b}(u) &= S(\phi, u) \le S(\phi, v), \; \forall v \in [u, \phi]\}, \\ \phi^* &:= \min\{u \in [0, \phi] : u^* = \phi \}. \end{split}$$



Figura 2.5: "Test de Diehl". Izquierda: la función $f_{\rm b} = f_{\rm b}(\phi)$ con algunos de los valores de ϕ que aparecen en la solución. Derecha: solución de (2.5), (2.6), con la función inicial dada por (2.10), para $\phi_0 \in (\phi_{\rm infl}, \phi_{\rm máx}]$. Las líneas delgadas son características, y la líneas gruesas son discontinuidades, con la excepción de x_4 , que es una línea de continuidad. La trayectoria cóncava x = h(t), medible experimentalmente, es una transformada de $f_{\rm b}$ para $\phi \in [\phi_{\rm a}, \phi_{0*}]$ [14].

La interpretación geométrica de estas operaciones se ve en la Figura 2.4.

Si la concentración inicial ϕ_0 es elegida suficientemente grande, por ejemplo, $\phi_0 \in (\phi_{\text{máx}}^{**}, \phi_{\text{máx}}]$, el test de Kynch permite reconstruir la porción de f_{b} para $\phi_0^* \leq \phi \leq \phi_{\text{máx}}$. Esta información relacionada con el rango de altas concentraciones es usualmente complementado por el hecho que $f_{\text{b}}(0) = 0$, y que para $t \leq t_{\text{start}}$, la velocidad del descenso de la interfaz suspensión-supernadante x(t) = h(t) que separada los valores $\phi = 0$ y $\phi = \phi_0$ es, de acuerdo a la velocidad de Stokes, dada por $h'(t) = -f_{\text{b}}(\phi_0)/\phi_0$, de donde se obtiene un punto para el gráfico ϕ versus f_{b} . Así, el test de Kynch entrega una forma funcional de f_{b} convexa para un cierto subintervalo dentro de $[\phi_{\text{infl}}, \phi_{\text{máx}}]$. Además, esta información es complementada por pequeños puntos con valores obtenidos en concentraciones bajas $\phi < \phi_{\text{infl}}$.

Esta propiedad ha sido ampliamente usada a lo largo de la historia para generar algunos métodos de diseño de espesadores muy conocidos hasta la actualidad, por ejemplo Coe y Clevenger [32], Kynch [77], Talmage y Fitch [100], Wilhelm y Naide [110], entre otros.

2.1.4. Test de Diehl

Se denomina *test de Diehl*, a la solución de la ecuación gobernante (2.5), junto con el dato inicial

$$\tilde{\phi}_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 \leqslant x < H_0, \\ \phi_0 & \text{para } H_0 \leqslant x \leqslant H, \end{cases}$$
(2.10)

donde $\phi_0 \in (0, \phi_{max})$ es la concentración homogénea de la suspensión inicial y H_0 es la altura de la columna de agua inicial, medida desde el fondo del tubo. Dicho test fue introducido por Diehl [48].

En particular, si $\phi_0 > \phi_{infl}$, la solución de (2.5) con (2.10) es presentada en la Figura 2.5. En este caso, para obtener una solución de entropía, a grandes rasgos, se debe recorrer la función de flujo desde sus datos iniciales mediante la *envoltura superior cóncava*, lo que se traduce en primer lugar, en una onda de choque entre ϕ_0 y ϕ_0^* (a partir de H_0), para luego generar una expansión de onda desde ϕ_{0^*} decreciente hasta cero. En la Figura 2.5, parte derecha, se puede ver lo anteriormente señalado a través del choque inicial $x = x_1(t)$, para $0 < t < \hat{t}_{start}$, y la línea de continuidad $x = x_2(t)$, entre $0 < t < t_1$. Por otro lado, se produce una onda de rarefacción durante $t_1 < t < t_2$, en donde la concentración varía continuamente entre cero y $\phi_{máx}^{**}$, para luego terminar con un choque para tiempos $t > t_4$.

Un aspecto interesante de este test sucede en parte de la discontinuidad x = h(t) durante $\hat{t}_{\text{start}} \leq t \leq \hat{t}_{\text{end}}$, cuando la concentración de la parte inferior, denotada por $\phi_{\text{h}}(t)$, decrece desde ϕ_{0^*} hasta ϕ_{a} , en el gráfico izquierdo, donde

$$\phi_{\mathbf{a}} = \frac{(H - H_0)\phi_0}{\eta(\hat{t}_{\text{start}}) - H_0}.$$

Esto representa el sector cóncavo superior, recorrido de derecha a izquierda abarcando la *rarefacción transónica*, que sucede cuando $f'_{\rm b}(\phi) = 0$ cuya característica es $x = H_0$. Para asegurar la formación del intervalo $(\phi_{\rm a}, \phi_{0^*})$, se necesita un H_0 suficientemente grande, tal que $\hat{t}_{\rm start} < \hat{t}_{\rm end}$.

2.2. Solución al problema inverso por fórmulas de representación

2.2.1. Fórmulas de representación para el test de Kynch

Para el test de Kynch, la discontinuidad h(t), $t \in [t_{\text{start}}, t_{\text{end}}]$, en la Figura 2.4, el propio Kynch [77] mostró un procedimiento gráfico para reconstruir parte de la función de flujo $f_{\text{b}} = f_{\text{b}}(\phi)$, la denominada *cola de Kynch*, que corresponde al segmento $[\phi_0^*, \phi_{\text{máx}}]$. Posteriormente Diehl [48] mostró que el procedimiento gráfico de Kynch admitía una fórmula de representación, específicamente mostró que la función de flujo puede ser expresada como una función de la discontinuidad curvada h(t) y su derivada h'(t). Lo que representa una solución al problema inverso planteado como:

Encontrar la función de flujo f_b dada la supuesta solución del problema de valores iniciales (2.5),(2.9),

Deduciremos las fórmulas de representación de Diehl.

Sea la concentración justo antes de la discontinuidad curvada, denotada por

$$\phi_h(t) := \phi(h(t)^-, t), \quad \text{para } t_{\text{start}} \le t \le t_{\text{end}}, \tag{2.11}$$

donde ϕ_h es una función creciente de clase C^1 que mapea el intervalo $[t_{\text{start}}, t_{\text{end}}]$ en $[\phi_0^*, \phi_{\text{máx}}]$. A lo largo de la sección, se hará referencia a las funciones h y f_{b} sólo en éstos intervalos.

Evaluando la pendiente de las características, dada en (2.7), en la discontinuidad x = h(t) e insertando (2.11) se obtiene

$$\frac{h(t)}{t} = -f'_{\rm b}(\phi_h(t)), \quad \text{para } t_{\rm start} \le t \le t_{\rm end}.$$
(2.12)

La condición de salto (2.8) para $x = h(t), t_{\text{start}} \leq t \leq t_{\text{end}}$, implica

$$-h'(t) = \frac{f_{\rm b}(\phi_h(t))}{\phi_h(t)}, \quad \text{para } t_{\rm start} \le t \le t_{\rm end}.$$
(2.13)

Debido al hecho que $\phi \in C^1$ y $f_b \in C^2$, (2.13) se sigue que $h \in C^2$ y h' < 0. Diferenciando (2.12), se obtiene

$$\phi'_{h} = -\frac{h'(t) + f'_{\rm b}(\phi_{h}(t))}{t f''_{\rm b}(\phi_{h}(t))} > 0.$$

y derivando (2.13), se tiene,

$$h''(t) = -\frac{f_{\rm b}'(\phi_h(t))\phi'_h(t)\phi_h(t) - f_{\rm b}(\phi_h(t))\phi'_h(t)}{\phi_h(t)^2}$$

= $-\frac{\phi'_h(t)}{\phi_h(t)} \left(f_{\rm b}'(\phi_h(t)) - v_{\rm s}(\phi_{\rm h}(t))\right).$

Como $f'_{\rm b}(\phi_h(t)) < 0$ y el resto de las funciones son positivas, se tiene que h''(t) > 0. Así, $f_{\rm b}$ y h son ambas funciones decrecientes, de clase C^2 y estrictamente convexas en el intervalo de interés. Definamos las siguientes funciones,

$$\eta(t) := h(t) - th'(t), \tag{2.14}$$

$$\Phi(\phi) := f_{\rm b}(\phi) - \phi f_{\rm b}'(\phi). \tag{2.15}$$

De la definición, se tiene que $\eta > 0$, $\Phi > 0$ y además

$$\eta'(t) = -th''(t) < 0$$

 $\Phi'(t) = -\phi f_{\rm b}''(\phi) < 0,$

en el intervalo $[t_{\text{start}}, t_{\text{end}}]$ y $[\phi_{0^*}, \phi_{\text{máx}}]$ respectivamente. De esta manera, η y Φ son invertibles. Añadiendo las ecuaciones (2.12) y (2.13), se obtiene,

$$\frac{h(t)}{t} - h'(t) = -f'_{\rm b}(\phi_h(t)) + \frac{f_{\rm b}(\phi_h(t))}{\phi_h(t)},$$

donde, usando la notación recién insertada en (2.14) y (2.15), se traduce en,

$$\phi_h(t)\eta(t) = -\phi f_{\mathbf{b}}''(\phi).$$

Aquí, las expresiones de ambos lados son contantes y corresponden a la masa total por unidad de área [48], esto es,

$$\phi_h(t)\eta(t) = H\phi_0 = t\Phi\left(\phi_h(t)\right), \quad \text{para } t_{\text{start}} \le t \le t_{\text{end}}.$$
(2.16)

Así, las fórmulas de representación deducidas por Diehl [48], son posible usando (2.13) y (2.16). La cola de Kynch está parametrizada por

$$\phi = \frac{H\phi_0}{\eta(t)}, \quad f_{\rm b}(\phi) = \frac{H\phi_0}{\eta(t)}h'(t), \quad \text{para } t_{\rm start} \leqslant t \leqslant t_{\rm end}.$$
(2.17)

Como η es invertible, se puede despejar t de la primera ecuación de (2.17) e insertarla en h' en la segunda ecuación. Así se deduce una fórmula explícita para la función de flujo,

$$f_{\rm b}(\phi) = \phi h'\left(\eta^{-1}\left(\frac{H\phi_0}{\phi}\right)\right) \quad \text{para } \phi_0^* \leqslant \phi \leqslant \phi_{\rm máx}, \text{ donde } \phi_0^* = \frac{H\phi_0}{\eta(t_{\rm start})}.$$
(2.18)

Este método está basado en la aproximación de mediciones de h(t) por una curva spline (cúbica a trozos), u otra curva suave definida a trozos, por ejemplo cuadrática o alguna que sea racional, denotada $\check{h}(t)$, bajo la restricción de convexidad (resolviendo un problema de cuadrados mínimos con restricciones), y luego se puede lograr la reconstrucción del segmento de $f_{\rm b}$ correspondiente utilizando \check{h}' al lugar de h' en (2.14) y (2.18).

2.2.2. Ajuste a trozos de la discontinuidad convexa de un test de Kynch

Sea una colección de N pares de datos

$$(t_j, x_j), \quad j = 1 = j_1, \dots, j_2, \dots, j_3, \dots, j_n, \dots, N =: j_{n+1},$$
 (2.19)

que representan mediciones de la posición de la interfaz sedimento-agua x = h(t) (ver Figura 2.4) para el intervalo de tiempo $t \in [t_{\text{start}}, t_{\text{end}}]$. Se supone además, que a cada intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}}]$ pertenecen $N = j_{i+1} - j_i$ puntos, de tal manera que $N = 1 + N_1 + \cdots + N_n$. Luego se trata de determinar funciones suaves \check{h}_i , $i = 1, \ldots, n$ que aproximan estos datos de manera que el grafo de

$$\check{h}(t) := \sum_{i=1}^{n} \check{h}_{i}(t)\chi_{i}(t), \quad t_{1} < t \leq t_{N}; \quad \chi_{i}(t) := \begin{cases} 1 & \text{si } t_{j_{i}} < t \leq t_{j_{i+1}}, \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$
(2.20)

aproxima la interfaz curvada h(t). Nuestro análisis se centrará en lograr sustituir (2.20) en (2.18), de manera de obtener una fórmula explícita para una porción del lote de sedimentación de la función de flujo \check{f}_b .

Las funciones \check{h}_i se eligen de forma que sean suficientemente suaves en una vecindad del intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}})$.

En esta sección, presentaremos tres formas funcionales diferentes para crear \check{h}_i , todas poseen dependencia lineal en los parámetros a_i, b_i, c_i, d_i , los cuales pueden ser tres (cuando $d \equiv 0$) o cuatro por cada intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}})$, sujeto a las restricciones de convexidad, continuidad y suavidad en la unión interna de cada intervalo, mientras que en los puntos extremos de los *n* intervalos sólo requerimos continuidad en el valor de la función y sus derivadas hasta el número de parámetros menos dos.

Precisamente, para \check{h} en C^2 , se requiere que \check{h} sea dos veces continuamente diferenciable, lo que conduce a las *restricciones de continuidad*.

$$\dot{h}_{i-1}(t_{j_i}) = \dot{h}_i(t_{j_i}), \quad j = 2, \dots, n$$
(2.21)

$$\dot{h}'_{i-1}(t_{j_i}) = \dot{h}'_i(t_{j_i}), \quad j = 2, \dots, n$$
(2.22)

$$\check{h}_{i-1}''(t_{j_i}) = \check{h}_i''(t_{j_i}), \quad j = 2, \dots, n.$$
(2.23)

Estas constituyen 3n - 1 ecuaciones de los 4n parámetros (en el caso de los 4-parámetros) para obtener una única solución de un problema de minimización por mínimos cuadrados (LSM, por sus siglas en inglés). Resulta que en cada intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}}]$ debiera haber por lo menos la misma cantidad de puntos (datos) que de parámetros, esto es, $j_{i+1} - j_i \ge 4$, lo que implica que el número total de datos debe satisfacer

$$N = j_{n+1} = 1 + \sum_{i=1}^{n} (j_{i+1} - j_i) \ge 1 + 4n.$$

De acuerdo con las propiedades de la solución de (2.1), requerimos

$$h'(t) < 0$$
 para $t_{j_i} \le t < t_{j_{i+1}}, \ i = 1, \dots, n \text{ y } h'_n(t_N) \le 0$ (2.24)

$$h''(t) > 0$$
 para $t < t_{j_{i+1}}, \qquad i = 1, \dots, n \text{ y } h'_n(t_N) \ge 0.$ (2.25)

A partir de las condiciones de continuidad de (2.22) podemos concluir que \check{h} ' es creciente, luego (2.24) puede ser reemplazada por la simple restricción

$$\dot{h}_n'(t_N) \le 0. \tag{2.26}$$

Los parámetros son determinados como la solución de un problema de programación cuadrática, donde las restricciones son tales que ellas implican (2.21), (2.22), (2.23) y (2.25), (2.26). Una vez que el problema de optimización es resuelto, podemos seguir definiendo la transformada de Legendre por intervalos,

$$\check{\eta}_i(t) := \dot{h}_i(t) - t\dot{h}'_i(t), \quad i = 1, \dots, n.$$

Aquí, las restricciones (2.21), (2.22) implican que

$$\check{\eta}(t) = \check{h}(t) - t\check{h}'(t) = \sum_{i=1}^{n} \eta_i(t)\chi_i(t), \quad t_1 < t \le t_N,$$

es decir, el inverso de $\check{\eta}$ puede ser escrito por medio de una suma de todos los inversos $\check{\eta}_i$. Para ello debemos encontrar una expresión alternativa a la función característica χ_i . Notemos que como $\check{\eta}_i$ es decreciente, se asigna el intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}}]$ al intervalo $[\check{\eta}(t_{j_{i+1}}), \check{\eta}(t_{j_i}))$, además, por el argumento de η^{-1} en (2.18), el intervalo correspondiente para ϕ es

$$\check{\eta}(t_{j_{i+1}}) \le \frac{H\phi_0}{\phi} < \check{\eta}(t_{j_i}) \Longleftrightarrow \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_i})} < \phi \le \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_{i+1}})}.$$

De esta forma, para expresar la inversa de $\check{\eta}$ definimos las funciones características

$$\psi_i(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_i})} < \phi \leq \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_{i+1}})}, \quad i = 1, \dots, n. \\ 0 & \text{e.o.c.} \end{cases}$$

Finalmente, de (2.18), se obtiene la siguiente fórmula explícita para la porción $\check{f}_{\rm b}$ de $f_{\rm b}$.

$$\check{f}_{\rm b} = -\phi \sum_{i=1}^{n} \check{h}'_i \left(\check{\eta}_i^{-1} \left(\frac{H\phi_0}{\phi} \right) \right) \psi_i(\phi), \qquad \frac{H\phi_0}{\check{\eta}^{-1}} < \phi \le \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_N)}.$$
(2.27)

Notamos que $\check{f}_{\rm b}$ tiene la *misma regularidad* que \check{h} por teorema en [14].

2.2.2.1. Método de ajuste cuadrático (quadratic-fit)

Los funcionales por defecto con la regualidad y continuidad necesaria son los polinomios, por lo que nuestro primer funcional de tres parámetros se forma con el polinomio cuadrático,

$$\check{h}_i(t) = a_i t^2 + b_i t + c_i,$$

equipado con las restricciones de continuidad (2.21) y (2.22), por lo que se logra asegurar $\check{h} \in C^1$. Por otra parte, las restricciones de convexidad dadas en (2.25) se traducen en la condición $a_i > 0$, para todo i = 1, ..., n - 1 y $a_n \ge 0$, de donde, requerimos ahora que todos los a_i sean positivos. Así, calculando la función η por trozos tenemos,

$$\check{\eta}_i(t) = -a_i t^2 + c_i \quad \mathbf{y} \quad \check{\eta}_i^{-1}(y) = \sqrt{\frac{c_i - y}{a_i}},$$

donde $a_i > 0$ y $c_i > y$.

Una vez determinados los 3n parámetros, la expresión en (2.27) nos entrega:

$$\check{f}_{\rm b}(\phi) = -\sum_{i=1}^{n} \left(b_i \phi + 2\sqrt{a_i \phi \left(c_i \phi - H \phi_0 \right)} \right) \psi_i(\phi), \quad \frac{H \phi_0}{\check{\eta}(t_1)} < \phi \le \frac{H \phi_0}{\check{\eta}(t_N)}.$$
(2.28)

Aquí, notamos que $b_i < 0$ pues $a_i > 0$ y $\check{h}'_i(t) = 2a_it + b_i < 0$ por lo tanto, $\check{f}_b \in C^1$.

2.2.2.2. Método de ajuste por una spline (spline-fit)

Otro polinomio natural a usar es el polinomio cúbico, pues nos permite la regularidad de modo que $\check{h}, \check{f}_{\rm b} \in C^1$, de esta forma definimos,

$$\check{h}_i(t) = a_i t^3 + b_i t^2 + c_i t + d_i.$$

Así, tenemos que

~

$$\check{\eta}_i(t) = -2a_i t^3 - b_i t^2 + d_i, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Note que una representación explícita para la inversa $\check{\eta}_i^{-1}$ requiere algunos pasos previos en el cálculo de las raíces de un polinomio cúbico. En este caso las restricciones de convexidad dadas en (2.25) son

$$\begin{aligned}
 h_i''(t) &= 2(3a_it + b_i) > 0, \quad t_{j_i} \le t < t_{j_{i+1}}, \quad i = 1, \dots, n-1 \\
 y \check{h}_n''(t_N) &= 2(3a_N + b_N) \ge 0,
 \end{aligned}$$
(2.29)

y que $\check{\eta}_i(t) = -t\check{h}''_i(t) = -2t(3a_it + b_i)$, el cual puede ser negativo en el intervalo $(t_{j_i}, t_{j_{i+1}}]$. Además, $\check{\eta}_i$ tiene dos puntos estacionarios t = 0 y $t = -\frac{b_i}{3a_i}$. En estos puntos el valor de la función es

$$\check{\eta}_i(0) = d_i \mathbf{y} \,\check{\eta}_i \left(-\frac{b_i}{3a_i} \right) = d_i - \frac{b_i^3}{27a_i^2} \tag{2.30}$$

Para simplificar los cálculos y la implementación imponemos las siguientes restricciones adicionales

$$a_i < 0$$
 y $b_i > 0$, $i = 1, \dots, n$.

Como $a_i < 0$, si imponemos la condición (2.30), se tiene que todas las funciones \check{h}''_i son decrecientes. Este hecho, junto con la restricción de continuidad (2.23) implica que todas las desigualdades de (2.29) puede ser reemplazadas por la única restricción

$$h_n''(t_N) \ge 0.$$
 (2.31)

La gráfica de $\check{\eta}_i$ tiene su parte decreciente dentro de los dos puntos estacionarios, esto es, en el intervalo $\left(0, -\frac{b_i}{3a_i}\right)$. Luego, cuando resolvemos la ecuación

$$\check{\eta}_i(t) = y \text{ para un } y \text{ fijo, } y \in \left(d_i - \frac{b_i^3}{27a_i^2}, d_i\right), \qquad (2.32)$$

a través de la inversa de un polinomio cúbico. Si las raíces solución son $r_1 < r_2 < r_3$, seleccionamos r_2 y calculamos la la inversa para $\check{\eta}_i$, cuya forma es

$$\check{\eta}_i^{-1}(y) = -\frac{b_i}{6a_i} \left(2\cos\left(\frac{1}{3}\arccos\left(1 - \frac{54(d_i - y)a_i^2}{b_i^3}\right) - \frac{2\pi}{3}\right) + 1 \right).$$

Esta función debe ser usada en (2.27) para la estimación de la función de flujo. Este resultado, si bien es largo de escribir a mano, resulta sencillo con un pequeño código computacional.

2.2.2.3. Método de ajuste por función racional (special-fit)

Este método se basa en la función racional de cuatro paramétros,

$$\breve{h}_i(t) = \frac{a_i}{t^2} + \frac{b_i}{t} + c_i + d_i t,$$

la cual presenta la misma regularidad que el método por spline. Además se tiene,

$$\begin{split} \breve{h}'_i(t) &= \frac{-2a_i}{t^2} - \frac{b_i}{t} + d_i t, \\ \breve{h}''_i(t) &= \frac{6a_i}{t^4} + \frac{2b_i}{t^3}, \\ \breve{\eta}(t) &= \frac{3a_i}{t^2} + \frac{2b_i}{t} + c_i, \\ \breve{\eta}'_i(t) &= -t\breve{h}''(t) - \frac{-6a_i}{t^3} - \frac{2b_i}{t^2} \end{split}$$

Las condiciones de convexidad (2.25) son equivalentes a:

$$\check{h}_{i}''(t) = 3a_{i} + b_{i}t > 0, \quad t_{j_{i}} \le t < t_{j_{i+1}}, i = 1, \dots, n-1,
\mathbf{y}\,\check{h}_{n}''(t_{N}) = 3a_{n}t_{N} + b_{n} \ge 0$$
(2.33)

Lo cual significa que cada $\check{\eta}_i$ es decreciente, y, junto con las restricciones de continuidad (2.21), (2.22), $\check{\eta}_i$ es decreciente. Con la imposición de las restricciones

$$a_i > 0 ext{ y } b_i \ge 0, i = 1, \dots, n$$
 (2.34)

Las condiciones de convexidad (2.33) son satisfechas.

Luego, cada $\breve{\eta}_i$ es invertible y la ecuación de 2do orden $\breve{\eta}_i(t) = y$, esto es,

$$3a_i + 2b_i t + (c_i - y)t^2 = 0 (2.35)$$

tiene única solución positiva

$$t = \breve{\eta}_i^{-1}(y) = \frac{1}{y - c_i} \left(b_i + \sqrt{b_i^2 + 3a_i(y - c_i)} \right).$$

Note que (2.34) y (2.35) implican que $y > c_i$. Obtenemos

$$\breve{\eta}_i^{-1}\left(\frac{H\phi_o}{\phi}\right) = \frac{b_i\phi + \sqrt{\phi^2(b_i^2 - 3a_ic_i) + 3a_iH\phi_o\phi}}{H\phi_o - c_i\phi},$$

la cual podría ser compuesta con \check{h}'_i en la fórmula (2.27) para la función de flujo estimada. Esta expresión es muy larga de escribir aquí, y no merece tal esfuerzo pues usando un computador, se puede crear un pequeño código recursivo que permita encontrar la expresión pedida.

2.2.3. Fórmulas de representación para el test de Diehl

Se hace referencia al apartado 2.1.4 y recordamos que la importancia del test es que aborda la parte cóncava de $f_{\rm b}$. La derivación de las fórmulas de representación es muy similar a lo expuesto en el apartado 2.2.1 para el test de Kynch. Sea $t \in [\hat{t}_{\rm start}, \hat{t}_{\rm end}]$ fijo. Luego, la característica originada en $(0, H_0)$ que pasa por (t, h(t)) tiene una pendiente

$$\frac{h(t) - H_0}{t} = -f'_{\rm b}(\phi_h(t)), \quad \text{para } \hat{t}_{\rm start} \le t \le \hat{t}_{\rm end}.$$
(2.36)

Por otro lado, La condición de salto (2.8) implica que

$$-h'(t) = S(\phi_h(t), 0)$$

= $\frac{f_{\rm b}(\phi_h(t))}{\phi}$
= $v_{\rm s}(\phi_h(t))$, para $\hat{t}_{\rm start} \le t \le \hat{t}_{\rm end}$. (2.37)

Usando (2.36) y (2.37) se tiene,

$$(H - H_0)\phi_0 = \phi_h(t) \left(v_s(\phi_h(t)) - f'_b(\phi_h(t)) \right) t$$

= $\phi_h(t) \left(-h'(t) + \frac{h'(t) - H_0}{t} \right) t$
= $\phi_h(t) \left(\eta(t) - H_0 \right).$

Así, la parametrización de la parte cóncava, que corresponde al intervalo $[\phi_a, \phi_{0^*}]$ está dada por

$$\begin{cases} \phi = \frac{(H - H_0)\phi_0}{\eta(t) - H_0}, \\ f_{\rm b}(\phi) = -\frac{(H - H_0)\phi_0}{\eta(t) - H_0}h'(t), \end{cases} \quad \hat{t}_{\rm start} \le t \le \hat{t}_{\rm end}, \end{cases}$$

donde $\eta(t) = h(t) - th'(t)$ como fue definido en el apartado 2.2.1. La representación explícita de la función de flujo en su parte cóncava está dada por,

$$\hat{f}_{\mathbf{b}}(\phi) = -\phi h' \left(\eta^{-1} \left(H_0 + \frac{(H - H_0)\phi_0}{\phi} \right) \right), \quad \phi_{\mathbf{a}} \le \phi \le \phi_{0^*}$$

Se sigue el mismo análisis aplicado en el apartado 2.2.1 para concluir que $h, \hat{f}_b \in C^2$ son funciones estrictamente cóncavas y que η es decreciente.

2.2.4. Ajuste a trozos de la discontinuidad cóncava de un test de Diehl

Dado un experimento con M puntos (t, h(t)), correspondiente al test de Diehl, se requiere ajustar una curva \hat{h}_i tal que sea contínua y suave. El análisis aquí es similar al descrito en el apartado 2.2.2, pero con algunos detalles. Se denota con^a la parte cóncava reconstruida. En primer lugar, las desigualdades de convexidad en (2.21) y (2.25) deben ser cambiadas a restricciones de concavidad,

$$\hat{h}'_i < 0, \quad t_{j_i} \le t \le t_{j_{i+1}}, \quad i = 1, \dots, m,$$
(2.38)

$$\tilde{h}_i'' < 0, \quad t_{j_i} \le t \le t_{j_{i+1}}, \quad i = 1, \dots, m.$$
 (2.39)

Debido a que \hat{h}' es decreciente, todas las desigualdades de (2.38) pueden ser reemplazadas simplemente por la restricción en el primer subintervalo, esto es, $\hat{h}'_1(t_1) < 0$, lo que reemplaza la ecuación (2.26) del test de Kynch. Las restricciones de continuidad son idénticas a las (2.21) a (2.23). Si bien el intervalo de interés en este método es $[\phi_a, \phi_{0^*}]$, consideramos, por simplicidad, $\phi \in [0, \phi_{máx}]$, así los subintervalos para ϕ están dados por la relación

$$\frac{(H - H_0)\phi_0}{\hat{\eta}(t_{j_{i+1}}) - H_0} < \phi \le \frac{(H - H_0)\phi_0}{\hat{\eta}(t_{j_i}) - H_0}.$$
(2.40)

Se consideran tres métodos de ajuste, como en el apartado 2.2.2, cuya procedimiento para encontrar η^{-1} es idéntico.

Se muestra a continuación las diferencias relevantes para el caso cóncavo.

2.2.4.1. Ajuste cuadrático (quadratic-fit)

Aquí requerimos que $a_i < 0$ para todo i = 1, 2, ..., M, el procedimiento para encontrar η^{-1} es análogo al mostrado en el apartado 2.2.2.1. Así, la fórmula explícita para los subitentervalos de (2.40) está dada por

$$\hat{f}_{\rm b}(\phi) = 2\sqrt{a_i\phi\left((c_i - H_0)\phi - (H - H_0)\phi_0\right)} - b_i\phi.$$

2.2.4.2. Ajuste por spline (spline-fit)

En este caso, se imponen las condiciones con signo opuesto como en el apartado 2.2.2.2, es decir, $a_i < 0$ y $b_i < 0$, para todo i = 1, 2, ..., M. Luego $\hat{\eta}$ posee dos puntos estacionarios, t = 0 y $t = -b_i/(3a_i)$, pero a diferencia del caso con el test de Kynch, $\hat{\eta}_i$ es creciente en este intervalo.

Sea
$$y \in \left(d_i, d_i - \frac{b_i^3}{27a_i^2}\right)$$
, y sea el problema
Encontrar t tal que: $\eta_i(t) = y$. (2.41)

Debido a la restricción del intervalo, las soluciones t son todas reales y corresponden a las raíces del polinomio cúbico $\hat{\eta}_i$. Sean r_1, r_2, r_3 de forma que $r_1 \leq r_2 \leq r_3$, Necesitamos sólo r_2 y de esta manera, podemos construir

$$y := H_0 + \frac{(H - H_0)\phi_0}{\phi},$$

y se calcula entonces

$$\begin{split} \alpha_I &:= \arccos\left(1 - \frac{54\alpha_I^2(d_I - y)}{b_I^3}\right),\\ \tau_I &:= -\frac{-b_I}{6\alpha_I}\left(2\cos\left(\frac{\alpha_I - 2\pi}{3}\right) + 1\right),\\ \check{f}_{\rm b}(\phi) &:= -\phi\check{h}_I'(\tau_I). \end{split}$$

2.2.4.3. Ajuste por función racional (special-fit)

En este caso se debe imponer $a_i < 0$ y $b_i \leq 0$, para todo i = 1, 2, ..., M. Luego la única inversa positiva de $\hat{\eta}$ es,

$$\hat{\eta}_i^{-1}(y) = \frac{1}{c_i - y} \left(-b_i + \sqrt{b_i^2 + 3a_i(y - c_i)} \right),$$

 $\operatorname{con} c_i > y$. Luego,

$$\tau_i(\phi) := \hat{\eta}_i^{-1} \left(H_0 + \frac{(H - H_0)\phi_0}{\phi} \right)$$

$$=\frac{-b_i\phi+\sqrt{\phi^2(b_i^2+3a_i(H_0-cc_i))+\phi^2}+\phi^2(H_0-H_0)}{\phi(H_0-c_i)+\phi_0(H-H_0)}$$

Finalmente, se tiene

$$\hat{f}_{\rm b}(\phi) := -\phi \hat{h}'_i(\tau_i(\phi))$$

2.3. Implementación computacional

La implementación computacional se basa en reconstruir la interfaz h(t) de datos experimentales, los cuales pueden presentar errores de medición atribuidos al equipo utilizado o factores externos que afectan el experimento, como efecto de pared, temperatura, etc. Para ello, se plantea una reconstrucción $\check{h}(t)$, la cual es suave y continua y con ella, poder utilizar las fórmulas de representación para obtener trozos de la función de flujo. En primer lugar se podría pensar en un ajuste por mínimos cuadrados por trozos, pero faltaría asegurar continuidad en los tramos, así también convexidad de la curva. De esta manera la reconstrucción se lleva adelante mediante una *programación cuadrática sujeta a restricciones*, las cuales son justamente condiciones de continuidad y convexidad.

2.3.1. Problema de programación cuadrática para el test de Kynch

Dado un experimento de Kynch con N puntos en (2.19), se buscan encontrar los parámetros a_i , b_i , c_i y d_i , que reconstruyan una curva \check{h}_i de manera única, para ello se introducen los siguientes vectores de parámetros

$$oldsymbol{p}_i := egin{pmatrix} a_i \ b_i \ c_i \ d_i \end{pmatrix}, \quad oldsymbol{p} := egin{pmatrix} oldsymbol{p}_1 \ oldsymbol{p}_2 \ dots \ oldsymbol{p}_n \end{pmatrix},$$

y los vectores correspondiente a los N datos, separados en n subintervalos

$$oldsymbol{x}_i := egin{pmatrix} x_{j_i} \ x_{j_i+1} \ dots \ x_{j_{i+1}-1} \end{pmatrix}, \qquad oldsymbol{x} := egin{pmatrix} oldsymbol{x}_1 \ oldsymbol{x}_2 \ dots \ oldsymbol{x}_2 \ dots \ oldsymbol{x}_n \ x_N \end{pmatrix},$$

entonces se puede escribir $\check{h}_i(t) = \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}(t) = \boldsymbol{q}(t)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_i$, donde $\boldsymbol{q}(t)$ representa el método utilizado, es decir, puede ser

$$\boldsymbol{q}(t) := \begin{pmatrix} t^2 \\ t \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} t^3 \\ t^2 \\ t \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{o bien}, \quad \begin{pmatrix} 1/t^2 \\ 1/t \\ 1 \\ t \end{pmatrix}.$$

Para escribir \check{h} de forma global, se define Q, tal que $\check{h}(t) = Qp$, es decir,

$$m{Q} := \left(egin{array}{cccccc} m{Q}_1 & m{0} & \dots & m{0} \\ m{0} & m{Q}_2 & & dots \\ dots & & \ddots & & \ m{0} & \dots & m{Q}_n \\ m{0} & \dots & m{q}(t_N)^{\mathrm{T}} \end{array}
ight),$$

donde, Q es una matriz de $N \times 4n$ y para todo $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$,

$$oldsymbol{Q}_i := egin{pmatrix} oldsymbol{q}(t_{j_i})^{\mathrm{T}} \ oldsymbol{q}(t_{j_i+1})^{\mathrm{T}} \ dots \ oldsymbol{q}(t_{j_{i+1}-1}^{\mathrm{T}}) \end{pmatrix}.$$

De esta manera, se debe introducir una función objetivo $J(\mathbf{p})$, relacionada con la diferencia de las evaluaciones \check{h}_i , con los datos x_k en cada tiempo t, para cada subintervalo i correspondientes, es decir,

$$J(\boldsymbol{p}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=j_i}^{j_{i+1}-1} \left(\check{h}_i(t_k) - x_k\right)^2 + \left(\check{h}_n(t)_N - x_N\right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=j_i}^{j_{i+1}-1} \left(\boldsymbol{q}(t_k)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_i\right) - x_k\right)^2 + \left(\check{h}_n(t)_N - x_N\right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\boldsymbol{Q}_i \boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}_i\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{Q}_i \boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}_i\right) + \left(\check{h}_n(t)_N - x_N\right)^2$$

$$= \left(\boldsymbol{Q} \boldsymbol{p} - \boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{Q} \boldsymbol{p} - \boldsymbol{x}\right)$$

$$= \boldsymbol{p}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{p} - 2\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{p} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}.$$

Las restricciones de continuidad (2.21) a (2.23) se deben incluir en la programación cuadrática como restricciones de igualdad. En particular, la (2.23) corresponde a la segunda derivada de h, por lo que la restricción se vuelve trivial en el caso del método *quadratic-fit*, por lo que se define

$$oldsymbol{R}_i^{ ext{quad}} := oldsymbol{R}_i := egin{pmatrix} oldsymbol{q}(t_{j_i})^{ ext{T}} \ oldsymbol{q}'(t_{j_i})^{ ext{T}} \end{pmatrix},$$

mientras que, en el resto de los casos se tiene,

$$oldsymbol{R}_i^{ ext{spline}} \coloneqq oldsymbol{R}_i^{ ext{spline}} \coloneqq oldsymbol{R}_i^{ ext{spline}} \coloneqq oldsymbol{R}_i \coloneqq oldsymbol{R}_i \coloneqq oldsymbol{q}_i^{ ext{(}t_{j_i})^{ ext{T}}} \ oldsymbol{q}'(t_{j_i})^{ ext{T}} \ oldsymbol{q}''(t_{j_i})^{ ext{T}} \end{array}
ight),$$

quedando la restricción dada por la igualdad $\mathbf{R}_i^{\text{method}}$ ($\mathbf{p}_{i-1} - \mathbf{p}_{i-2}$), para todo i = 2, 3, ..., n, o bien,

$$oldsymbol{R}^{ ext{method}}=oldsymbol{0},$$

donde method, se refiere al método utilizado y se define como

$$m{R}^{ ext{method}} \coloneqq egin{pmatrix} m{R}_2 & -m{R}_2 & m{0} \dots & m{0} & \ m{0} & m{R}_3 & -m{R}_3 & \dots & m{0} & \ dots & & \ddots & \ddots & dots & \ m{0} & \dots & m{0} & m{R}_n & -m{R}_n \end{pmatrix}$$

Las restricciones de convexidad (2.24) y (2.25) son incluidas como restricciones de inecuación y son diferentes para cada método utilizado, mas aún, algunas de estas restricciones se traducen en desigualdades estrictas. Como el método de programación cuadrática sujeto a restricciones admite igualdad en las inecuaciones, se introduce un parámeto $\varepsilon > 0$ arbitrario y muy pequeño, tal que sea la holgura de estas inecuaciones estrictas. Para efectos de escritura, se denota $\mathbf{1}_{m \times n}$ a la matriz llena de unos, de tamaño $m \times n$. Se definen los vectores canónicos $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \in \mathbf{R}^4$ y la matriz

$$\boldsymbol{I}_{\alpha} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_{\alpha}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{0} & \dots & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{e}_{\alpha}^{\mathrm{T}} & & \vdots \\ \boldsymbol{0} & \dots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{e}_{\alpha}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}_{n \times (4n)} \qquad \alpha = 1, 2.$$

Así, las restricciones de convexidad se traducen en

$$I^{ ext{method}} p \leq b^{ ext{method}},$$

donde las matrices para cada método están dadas por

$$oldsymbol{I}^{ ext{quad}} := egin{pmatrix} -I_1 \ (oldsymbol{0}_{1 imes 4(n-1)} & oldsymbol{q}'(t_N)^{ ext{T}}) \), \qquad oldsymbol{b}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} & oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} & oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0} \ \end{array}
ight), \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(egin{pmatrix} oldsymbol{1}_{(2n) imes 1} \ oldsymbol{0}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(end{pmatrix} \ oldsymbol{1}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(ellon \ oldsymbol{1}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(ellon \ oldsymbol{1}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(ellon \ oldsymbol{1}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(ellon \ oldsymbol{1}_{(n+1) imes 1} \ \end{array}
ight). \ oldsymbol{J}^{ ext{special}} := -arepsilon \left(e$$

De esta manera, para los datos en (2.19), que representan una discontinuidad curvada, los parámetros p son determinados mediante el siguiente problema de programación cuadrática

minimizar
$$J(\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} - \boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} - \boldsymbol{x})$$

sujeto a la condición de regularidad $\boldsymbol{R}^{\mathrm{method}}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$ (2.42)
y a la condición de convexidad $\boldsymbol{I}^{\mathrm{method}}\boldsymbol{p} \leq \boldsymbol{b}^{\mathrm{method}},$

donde el problema está bien planteado, es decir, tiene solución única [14].

Como ya se tienen los parámetros p, es decir, los coeficientes a_i, b_i, c_i y d_i , ya determinados, como la única solución del problema (2.42), se debe utilizar esta información para reconstruir las fórmulas explícitas para la cola de Kynch, las cuales son:

• Quadratic-fit. Este caso admite una solución explicita sencilla, expresada por:

$$\check{f}_{\rm b}(\phi) = -\sum_{i=1}^n \left(b_i \phi + 2\sqrt{a_i \phi(c_i \phi - H\phi_0)} \right) \psi_i(\phi), \quad \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_1)} < \phi \le \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_N)}.$$

• Spline-fit. En este y el caso de spline-fit, si bien se tienen fórmulas explícitas, son muy complicadas de escribir, por lo que se presentarán por pasos. Para cada concentración ϕ en el intervalo

$$\frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_1)} < \phi \le \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_N)},$$

se determina el intervalo al cual corresponde ϕ , es decir, se determina el entero I tal que satisface

$$\frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_I})} < \phi \le \frac{H\phi_0}{\check{\eta}(t_{j_{I+1}})}.$$

Luego, haciendo $y := H\phi_0/\phi$ y entonces,

$$\begin{aligned} \alpha_I &:= \arccos\left(1 - \frac{54\alpha_I^2(d_I - y)}{b_I^3}\right),\\ \tau_I &:= -\frac{-b_I}{6\alpha_I}\left(2\cos\left(\frac{\alpha_I - 2\pi}{3}\right) + 1\right),\\ \check{f}_{\rm b}(\phi) &:= -\phi\check{h}'_I(\tau_I). \end{aligned}$$

• Special-fit En este caso, se usa la definición de y anteriormente expuesta, luego,

$$\tau_I := \frac{1}{y - c_I} \left(b_I + \sqrt{b_I^2 + 3\alpha_I(y - c_I)} \right),$$
$$\check{f}_{\rm b}(\phi) := -\phi \check{h}'_I(\tau_I).$$

2.3.2. Problema de programación cuadrática para el test de Diehl

En el apartado 2.2.4 hacemos mención a las abundantes similitudes entre la construcción de \check{h} y \hat{h} . En particular, la diferencia radica en las condiciones de concavidad. De esta manera, usamos la misma definición de vectores y matrices $p, x, Q^{\text{method}}, R^{\text{method}}$ dada en el apartado 2.3.1 y definimos nuevas matrices I^{method} , junto con sus vectores b^{method} , dados por

$$egin{aligned} & egin{aligned} & egi$$

minimizar
$$J(\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} - \boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} - \boldsymbol{x})$$

sujeto a la condición de regularidad $\boldsymbol{R}^{\mathrm{method}}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$ (2.43)
y a la condición de convexidad $\boldsymbol{I}^{\mathrm{method}}\boldsymbol{p} \leqslant \boldsymbol{b}^{\mathrm{method}}$,

2.3.3. Reconstrucción de $f_{\rm b}$ con datos experimentales

Experimentalmente hablando, el test de Kynch es muy sencillo de llevar a cabo, además existe una vasta literatura del tema. Muy por el contrario, el test de Diehl es de difícil construcción y, al término de esta memoria, aún no existen datos disponibles en literatura. Esto



Figura 2.6: Esquema de una solución $\check{f}_{\rm b}$ mediante la reconstrucción local del 2.2.

nos obliga a reducir el test de Diehl sólo a datos sintéticos, ya simulados en [10, 14, 48], y usar exclusivamente el test de Kynch, mediante la reconstrucción local del apartado 2.2, para obtener la curva f_b . Sin embargo, con la reconstrucción de Kynch, sólo se puede encontrar el tramo convexo \check{f}_b y un punto $(\phi_0, f_b(\phi_0))$ (ver Figura 2.6), el cual es conocido gracias a la velocidad de Rankine-Hugoniot, v_s (s en honor a Stokes [97], quien fue el primero en identificar esta interfaz),

$$\frac{f_{\rm b}(\phi_0)}{\phi_0} = v_{\rm s}$$

Luego, para reconstruir el tramo inicial, que según la literatura ([94]) es cóncavo, debemos utilizar un método paramétrico local que se adapte a nuestra curva de datos $\check{f}_{\rm b}$. Para ello necesitamos algunos supuestos sobre la curva a determinar.

En primer lugar, sabemos que f(0) = 0 y de lo anterior, que $f(\phi_0) = v_s \phi_0$. Además f_b es una curva suave con sólo un punto de inflexión y de clase C^1 . Con estos datos, para asegurar sólo un punto de inflexión, una curva apropiada a utilizar son los polinomios cúbicos,

$$p(x) = a_3\phi^3 + a_2\phi^2 + a_1\phi + a_0.$$



Figura 2.7: Problema de la no continuidad de $f_{\rm b}$ si aseguramos sólo continuidad en la derivada.

De esta manera, las condiciones antes expuestas se traducen en las siguientes restricciones.

- (1) p(0) = 0, de donde $a_0 = 0$
- (2) $p''(\phi_{\text{infl}}) = 0$
- (3) $p(\phi_0) = \phi_0 v_s$
- (4) Dado un punto en $\phi_1 \in \check{f}_b$, $p'(\phi_1) = \check{f}_b(\phi_1) = m_1$, donde m_1 es la tangente de los datos de \check{f}_b en el punto $\phi = \phi_1$.
- (5) $p(\phi_1) = \check{f}_{\rm b}(\phi_1)$. Continuidad de $f_{\rm b}$.

El inconveniente es que el sistema está sobredeterminado. Si elegimos las primeras cuatro condiciones podemos generar una curva, pero no necesariamente obtendremos continuidad si no se pide explícitamente (ver Figura 2.7). Esto motiva la necesidad de usar otras herramientas para f_b . Proponemos usar sólo una función C, es decir, usar sólo las condiciones (1) - (3) y (5) y luego usar otra función que suavice una vecindad del punto anguloso, si es que existe.

Para este caso, de (1), se tiene que $a_0 = 0$, de (2), derivamos p con respecto a ϕ dos veces,

$$p'(\phi) = 3a_3\phi^2 + 2a_2\phi + a_1$$



Figura 2.8: Reconstrucción de $f_{\rm b}$ que no es C^1 .

$$p''(\phi) = 6a_3\phi + 2a_2,$$

y reemplazando $\phi_{\rm infl},$ se tiene

$$6a_3 + 2a_2 = 0. (2.44)$$

De la condición (3),

$$a_3\phi_0^3 + a_2\phi_0^2 + a_1\phi_0 = v_s\phi_0, \tag{2.45}$$

y de (5),

$$a_3\phi_1^3 + a_2\phi_1^2 + a_1\phi_1 = \check{f}_{\rm b}(\phi_1), \qquad (2.46)$$

luego el sistema dado por (2.44) – (2.46) queda como

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 3\phi_{\text{infl}} \\ \phi_0 & \phi_0^2 & \phi_0^3 \\ \phi_1 & \phi_1^2 & \phi_1^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ v_{\text{s}}\phi_0 \\ \check{f}_{\text{b}}(\phi_1), \end{pmatrix}$$

donde las soluciones, de forma explícita son:

$$\begin{split} a_{3} &= \frac{\frac{\check{f}_{\rm b}(\phi_{1})}{\phi_{1}} - v_{\rm s}}{\phi_{1}^{2} - 3\phi_{\rm infl}\phi_{1} - \phi_{0}(\phi_{0} - 3\phi_{\rm infl})}\\ a_{2} &= -3a_{3}\phi_{\rm infl}\\ a_{1} &= v_{\rm s} - a_{3}\phi_{0}^{2} + 3\phi_{\rm infl}\phi_{0}. \end{split}$$

Cabe recordar que el método descrito en el apartado 2.2.2 entrega una fórmula algebraica cerrada para un tramo $f_{\rm b}$, sin embargo, depende de la buena elección de la curva convexa h(t) para generar $\check{h}(t)$, lo que en la práctica genera datos espurios en ambos extremos de $\check{f}_{\rm b}$, los que son removidos, en el tramo inicial, con el planteamiento aquí estudiado.

2.3.4. Suavización de $f_{\rm b}$

Si bien obtuvimos una f_b completa con un punto de inflexión, el problema radica en que no aseguramos C^1 , por lo que necesitamos suavizar en una vecindad de ϕ con una función $q(\phi)$ al menos C^2 . tal que $\text{Dom}(q) \in (\phi_{\text{infl}}, \phi_{\text{máx}})$. Para evitar cualquier punto de inflexión adicional, usaremos un ajuste cuadrático

$$q(\phi) = b_2 \phi^2 + b_1 \phi + b_0,$$

tal que $q(\phi_{infl}) = p(\phi_{infl})$. Además, sea ϕ_2 un punto arbitrario tal que $\phi_2 > \phi_1$, que delimita el fin de la curva de suavización, es decir,

$$q(\phi_2) = \check{f}_{\rm b}(\phi_2)$$
$$q'(\phi_2) = \check{f}_{\rm b}'(\phi_2).$$

De aquí, $q(\phi)$ está determinado completamente por el sistema de ecuaciones,

$$\begin{pmatrix} 1 & \phi_{\text{infl}} & \phi_{\text{infl}}^2 \\ 1 & \phi_2 & \phi_2^2 \\ 0 & 1 & 2\phi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(\phi_{\text{infl}}) \\ \check{f}_{\text{b}}(\phi_2) \\ \check{f}_{\text{b}}'(\phi_2) \end{pmatrix},$$



Figura 2.9: $f_{\rm b}$ reconstruida y suavizada en intervalo ($\phi_{\rm infl}, \phi_2$).

donde las soluciones, de manera explícita son

$$b_{0} = \check{f}_{b}(\phi) + \phi_{2}^{2}b_{2} - \check{f}_{b}'(\phi_{2})\phi_{2}$$

$$b_{1} = \check{f}_{b}'(\phi_{2}) - 2b_{2}\phi_{2}$$

$$b_{2} = \frac{p(\phi_{\text{infl}}) - \check{f}_{b}'(\phi_{2})(\phi_{\text{infl}} - \phi_{2}) - \check{f}_{b}(\phi_{2})}{\phi_{\text{infl}}(2\phi_{\text{infl}}\phi_{2}) + \phi_{2}^{2}}$$

En la Figura 2.9 se ve un esquema de la reconstrucción de f_b , donde finalmente está compuesto por la función por trozos

$$f_{\rm b} = \begin{cases} p(\phi) & \text{ si } 0 \le \phi \le \phi_{\rm infl} \\ q(\phi) & \text{ si } \phi_{\rm infl} < \phi \le \phi_2 \\ \check{f}_{\rm b} & \text{ si } \phi_2 < \phi \le \phi_{\rm máx} \end{cases}$$

Capítulo 3

Experimentos batch

Para validar la teoría expuesta en el capítulo 2, se procede a comprobar de manera experimental sus resultados, es por ello que en este capítulo trataremos experimentos batch. La idea general radica en el principio de que f_b es una función constitutiva, es decir, sólo depende del material, lo que indica que en experimentos batch del test de Kynch a diferentes concentraciones, para un mismo material, debemos obtener la misma función de flujo f_b .

La primera parte se exhiben experimentos realizados en las dependencias del laboratorio del *Centro de Tecnología Mineral*, CETTEM, en sus instalaciones del *Departamento de Ingeniería Metalúrgica de la Universidad de Concepción*. Posteriormente se procede a aplicar el simulador a datos presentados en la literatura, sobre experimentos que han sido realizados con material no floculado.

3.1. Experimentos de laboratorio

El primer experimento batch¹ consiste en realizar el test de Kynch, para ello, se tiene una mezcla inicialmente homogénea en un tubo de altura H y se deja sedimentar en el tiempo. Dado un tiempo t, se toma el dato de la altura h(t) de la interfaz de suspensión-agua, la cual se puede seguir visualmente. Estos datos pueden ser tomados por un laboratorista de forma

¹Se refiere al segundo experimento batch, como el test de Diehl. El cual no pudo realizarse experimentalemente.

manual o bien se pueden utilizan equipos electrónicos más sofisticados, como es el caso del *Sedirack*, que se detallará más adelante.

3.1.1. Descripción de los instrumentos usados

La mayoría de las medidas tomadas en los experimentos batch fueron realizadas con el equipo Sedirack. Por otro lado, para llevar a cabo cualquiera de éstos experimento, se debe tener una caracterización del material utilizado con parámetros como la viscosidad, densidad y tamaño de las partículas sólidas, por lo que es necesario el uso de ciertos materiales específicos como:

- Balanza de precisión
- Tamizador
- Probetas
- Picnómetro
- Viscosímetro

Algunas de las cuales serán detalladas a continuación.

3.1.1.1. Sedirack

El SediRack (Figura 3.1(a)) es un instrumento que realiza sedimentaciones batch automatizadas, dicho instrumento está formado por un marco que contiene cinco tubos transparentes donde se colocan las suspensiones cerradas superiormente con una tapa formada por capas de goma y plástico. El marco puede rotar en torno a un eje central con el objetivo homogeneizar las mezclas antes del experimento. Es posible añadir floculante mediante agujas que atraviesan las tapas. Una vez acondicionada la mezcla, la medición de la interfaz aguasuspensión se hace automáticamente en todas las columnas mediante una cámara de video adaptada en la parte superior de un notebook que se encuentra a una distancia fija del marco. Los datos capturados por la cámara son procesados en línea en el notebook mediante un software especialmente diseñado para ese efecto (ver Figura 3.1(b)). Con la información es



Figura 3.1: (a) Equipo de SediRack. (b) Captura de pantalla del software propio con interfaces suspensión-agua medidas por SediRack.

posible calcular las velocidades iniciales de sedimentación, y además generar una reconstrucción paramétrica de $f_{\rm b}$.

En nuestro caso, se utilizará utilizará el Sedirack sólo para medir la interfaz aguasuspensión y luego se extraerán los datos tomados sin manipulación previa para ser trabajados de manera independiente.

El Sedirack es un equipo muy útil para medir gran cantidad de puntos en pequeños intervalos de tiempo, para una sedimentación batch. Está calibrado para funcionar con relaves de minería cuyas concentraciones oscilan entre 10 y el 20 % de cp, (con un cp ideal de 12). El relave de cobre es de un color grisáceo oscuro y, al ser separado del agua, genera una interfaz agua-suspensión muy fácil de seguir a simple vista, una columna superior de agua clara. El programa interno del Sedirack fue diseñado para seguir el cambio de estos dos colores. Sin embargo, en los presentes experimento se trabaja con bolas (esferas) de vidrio transparente, con un tono amarillo claro, dentro de un medio líquido compuesto principalmente por glicerina y un pequeño porcentaje de agua, los cuales también son transparentes, por lo que la visualización de la interfaz agua-sedimento es difusa. Además, al usar un fluido más viscoso que el agua, pequeñas bolitas de vidrio no siguen la interfaz, quedando suspendidas en diferentes alturas, provocando que el equipo registre, en algunas ocaciones, a estas esferas aisladas como parte de la interfaz, generando así datos espurios. A medida que la concentración inicial es menor, el equipo presenta mayores problemas, produciendo más datos erróneos, hasta un punto crítico en el cual es conveniente usar herramientas manuales para medir la interfaz.



Figura 3.2: Viscosímetro Haake Rotovisco RV 20

Finalmente, otro problema que se registró con el equipo Sedirack, tiene relación con la ubicación fija de la cámara, en donde sigue la interfaz con una perspectiva distinta en cada punto. Primero sigue la interfaz por el menisco delantero (el tubo del experimento es cilíndrico con un diámetro de 10cm), el cual es el único que puede ver en tiempos cercanos al inicial, luego que la interfaz baja, logra *ver* el menisco trasero del tubo y finalmente, en el fondo, vuelve a observar el menisco delantero. Este detalle en su cámara y el seguimiento afecta la fiabilidad de los datos, debido a que la curva (t, h(t)) se presenta en 3 secciones ligeramente quebradas, lo cual realmente no sucede así. Por estas razones, se necesita un post-procesamiento de los datos.

3.1.2. Viscosímetro Haake Rotovisco RV 20

El viscosímetro es un instrumento utilizado para medir la viscosidad y algunos parámetros de flujo de un fluido. En particular, el modelo Haake Rotovisco RV20 (Figura 3.2) cuenta con un sistema de medición M5, cual forma la combinación estándar que utiliza sensores cilíndricos coaxiales para mediciones de aceites, tintas, emulsiones y suspensiones, entre otros materiales, mientras que el sensor cónico y de platillo permiten medir viscosidades para grasas y cremas.

El sistema de medición M5 es la unidad estándar para el 80 % de todas las medidas de viscosidad. El máximo torque es de 4.9Ncm. Este puede ser utilizado en combinación con todos los sensores del sistema y en general, está diseñado para velocidades de rotación desde 0.05 a 500 rpm.

El procedimiento utilizado para medir la viscosidad en el Viscosímetro consiste en introducir la suspensión en un pequeño espacio anular que queda entre el vaso exterior y el cilindro interior giratorio, luego se hace girar el cilindro interior a una cierta velocidad angular ω . Como la zona donde se encuentra el fluido es muy pequeña, se puede suponer que existe un perfil lineal de velocidades, lo cual permite calcular la velocidad de deformación

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial u}{\partial y}(s^{-1})$$

en función de ω . Se mide la torsión que se produce en el eje del cilindro, a partir de lo cual se deduce el esfuerzo cortante τ que ejerce el fluido sobre la pared del cilindro. Finalmente la *viscosidad dimánima*, o *viscosidad cizalle* μ (Pa-s) del material se obtiene a través de la ecuación

$$\mu = \tau / \dot{\gamma}.$$

3.1.2.1. Picnómetro

El *picnómetro* es un instrumento utilizado para calcular la densidad de un material sólido (Figura 3.3). Consiste en un recipiente de vidrio cubierto con una tapa, también de vidrio. El volumen del picnómetro cerrado es preciso y certificado por el fabricante. El procedimiento se basa en cuatro mediciones gravimétricas: dos de ellas determinan la masa de la muestra, mientras que las otras dos son necesarios para calcular su volumen.

Para el caso de las bolitas de vidrio, se debe tomar inicialmente una muestra, las que deben ser insertadas en el picnómetro, donde se registrara su masa, para luego llenar a raz de agua destilada el recipiente. Será necesario volver a registrar la masa, ya que la diferencia de



Figura 3.3: Picnómetro de 100mL de volumen bajo estándar ASTM D-854

masas corresponde a la masa del liquido, de esta manera la densidad del solido esta dada por.

$$\phi_{\rm s} = \frac{m_{\rm s}}{m_{\rm f}} \phi_{\rm f},$$

donde s y f hacen referencia al sólido y fluido respectivamente.

3.2. Experimento A

El experimento consiste en monitorear y medir una sedimentación batch realizada con un material que no presenta el efecto de compresibilidad de sedimento. Específicamente, se utilizan pequeñas bolas de vidrio homogéneas como párticulas sólidas (manufacturadas por Potters Industries, Inc., Carlstadt, New Jersey, U.S.), con número de malla 20 – 30, correspondiente a un tamaño de partículas entre 0.65mm y 0.80mm y una densidad $\rho_s = 4210$ kg/m³. El líquido utilizado es una solución de glicerina industrial diluida en agua a concentración volumétrica 0.95 en glicerina, con densidad $\rho_f = 1245$ kg/m³ y viscosidad 0.3469 Pa s. La viscosidad de la solución fue medida con un viscosímetro Haake Rotovisco RV 20 de medición M5, descrito anteriormente.

Se seleccionan seis concentraciones iniciales, dos de ellas de baja concentración, mientras que otras dos son a concentraciones muy altas, superior al punto de inflexión $\phi_{infl} \approx 0.3$ y cercanas a la concentración de empaquetamiento ($cp \approx 70$).

ϕ_0	cp
0.150	10
0.200	20
0.268	30
0.298	40
0.318	50
0.338	60

Donde cp es el término referido a *concentración en peso*, y se relaciona con ϕ a través de la ecuación

$$\phi = \frac{cp}{cp\phi_{\rm s} + (1 - cp)\phi_{\rm s}}$$

Debido a las limitaciones del equipo Sedirack para experimentos de concentraciones diluidas ($\phi_0 = 0.150$ y $\phi_0 = 0.200$), éstas se realizan de forma manual, mientras que el resto de los experimentos se realizan con el equipo. Se utilizó un criterio del tipo heurístico para separar ambos casos.

3.2.1. Procedimiento para concentraciones $\phi_0 \in [0.258, 0.338]$

- 1. Preparar la solución de glicerina en una concentración volumétrica al 0.95 agua.
- 2. Preparar las partículas sólidas para obtener la concentración requerida en cada tubo
- 3. Introducir la masa de partículas en cada tubo de H = 330mm.
- 4. Llenar cada tubo con la solución hasta una altura H = 287mm.



Figura 3.4: Ensayo experimental con esferas de vidrio de tamaño (0.6, 0.8)mm, en un tubo de acrílico de altura H = 287 y con un glicerina al 95 % como líquido.

- 5. Cerrar la tapa
- 6. Rotar los tubos constantemente hasta lograr una solución homogeneizada.
- 7. Conectar rápidamente la energía y así encender los tubos fluorescentes de cada tubo.
- 8. Iniciar el contador del software del Sedirack para almacenar los datos.

3.2.2. Procedimiento para concentraciones $\phi_0 \in [0, 0.25]$

- 1. Preparar la solución de glicerina en una concentración volumétrica al 0.95 agua.
- 2. Preparar las partículas sólidas para obtener la concentración requerida en cada tubo
- 3. Equipar cada tubo con una regla en milímetros para la altura.
- 4. Introducir la masa de partículas en cada tubo de H = 330 mm.
- 5. Llenar cada tubo con la solución hasta una altura H = 287 mm.

ϕ_0	$t_{\rm start}$	$t_{\rm end}$	ϕ_{infl}	ϕ_1	ϕ_2
0.150	2.0000	148.0000	0.3	—	—
0.200	2.0000	167.0000	0.3	_	_
0.268	46.0000	269.0000	0.3	0.3050	0.3900
0.298	52.0000	376.0000	0.3	0.3090	0.3300
0.318	40.0000	402.0000	0.3	0.3300	0.3350
0.338	50.0000	372.0000	0.3	0.3500	0.3700

- 6. Usar un agitador para obtener una suspensión homogénea.
- 7. Retirar rápidamente el agitador e iniciar un cronómetro.
- 8. Marcar puntos en el tiempo de la interfaz glicerina-sedimento y registrar en una planilla.

Del equipo Sedirack, se extraen los datos en formato .sdr, los cuales se pueden convertir a un formato .txt o .csv. Ambos compatibles con el software MATLAB. Dentro de MATLAB se limpian los datos, en el sentido de los principios básicos que posee la curva, por ejemplo que es continua y suave, de donde se consideran datos *atípicos* los que se encuentren en una banda superior al 10% del promedio local. Estos datos son removidos. Se atribuyen estos errores de lectura a la pérdida por parte de la cámara, de la interfaz glicerina-sedimento (ver detalles en la sección 3.1.1.1).

Los datos del experimento se encuentran en la Figura 3.4. Asumiendo los supuestos necesarios del 2.2.2. Para simular los datos, se identifica el segmento convexo en el intervalo $(t_{\text{start}}, t_{\text{end}})$ y se simula el proceso con n = 4 subintervalos. Luego, para el ajuste de f_{b} descrito en el apartado 2.3.3, se utiliza para el primer polinomio de aproximación un punto ϕ_1 y luego nos restringimos al intervalo $(0, \phi_{\text{infl}})$, con $\phi_{\text{infl}} < \phi_1$, mientras que para el polinomio cuadrático se utiliza el intervalo $(\phi_{\text{infl}}, \phi_2)$. Los valores están resumidos en la ??. Utilizamos los tres métodos de ajustes. Así, se generan curvas que reconstruyen el diagrama (t, h(t)) visualizadas en la $\check{h}_i(t)$ (Figura 3.5). La representación algebraica está dada y también $\check{f}_{\text{b}i}$, el trozo convexo de f_{b} (Figura 3.6). Finalmente se calcula una función de flujo para cada concentración inicial y obtenemos una representación general de la función original en la figura 3.7.

3.2.3. Dificultades

Realizar experimentos es una tarea que requiere de ensayos y errores, los cuales se se agravan cuando existen problemas de instrumentación, o bien es complejo reconstruir los casos idealizados. Mencionamos a continuación algunas dificultades que ocurrieron a lo largo del experimento.

- La glicerina es poco estable en sus propiedades físicas como viscosidad y densidad frente a parámetros de solución diluida y temperatura, por lo que dificulta el trabajo de replicar experimentos bajo las mismas condiciones.
- Alto costo en tiempo para la preparación de cada ensayo.
- Debido al alto costo de las bolitas de vidrio, se cuenta con material limitado, lo que impide hacer varias pruebas simultáneas, además de utilizar todo el potencial del Sedirack.
- También debido a la falta de material, se trabaja con una altura menor a la recomendada, generando columnas de aire al interior de los tubos del Sedirack, lo que provoca cuando se une con la mezcla afectando la lectura de la interfaz.
- El efecto de pared se hacía evidente en parte de la columna de aire, provocando ruido a los experimentos.
- El Sedirack está calibrado para trabajar con relaves, que presentan una mezcla oscura y donde se ve fácilmente la interfaz agua-sedimento. Esto no sucede con glicerina-bolitas pues ambas tienen un color translúcido, lo que provoca que el Sedirack funcione con determinadas concentraciones y con condiciones de ambiente muy específicas, difíciles de replicar en cada ensayo.
- Para concentraciones bajas, se debe usar un agitador manual, el cual interfiere en el experimento en los primeros segundos y además daña el material al moler las bolitas de vidrio, perdiendo así su forma esférica.
3.2.4. Conclusiones

Como $f_{\rm b}$ es una función constitutiva, es decir, depende del material dado y no de concentraciones iniciales, entonces dado diferentes concentraciones iniciales, debemos encontrar la misma función de flujo. Efectivamente, tal como lo muestran las Figuras 3.6, 3.10 y 3.14, existe evidencia clara que dado cualquier método seleccionado, es posible reconstruir una parte de $f_{\rm b}$. Más aún, si esta información es complementada con otros puntos de la curva, se pueden ajustar curvas que reconstruyan completamente $f_{\rm b}$, como en las Figuras 3.7, 3.11 y 3.15. Finalmente, en las Figuras 3.8, 3.12 y 3.16 se tiene $f_{\rm b}$, de donde bajo un simple promedio se puede calcular una única función de flujo reconstruida a trozos. Destaca aquí, que pese a los errores de laboratorio generados por las dificultades señaladas en el apartado 3.2.3, la función de flujo es reconstruida satisfactoriamente.

En el caso del método special-fit, es el único que reconstruye para $\phi < 0.3$, al comienzo de $\check{f}_{\rm b}$, en la Figura 3.14. Sin embargo, estos puntos son espurios y representan un error acumulado debido a la elección de $t_{\rm start}$ cercana a cero. Dicho error aumenta si se escoge $t_{\rm start}$ más pequeño. Este efecto tiene que ver con que el método usa el ajuste de la forma

$$\check{h}_i(t) = \frac{a_i}{t^2} + \frac{b_i}{t} + c_i + d_i t,$$

en donde para el primer subintervalo, es muy difícil controlar los términos a_1 y b_1 y dependen de la sensibilidad del simulador. Este hecho también se ve en la Figura 3.13, en donde para el primer subintervalo, existe una leve diferencia entre la recostrucción de \check{h} y los datos reales. Algo que no sucede en los otros casos, ver Figuras 3.5 y 3.9.

Los datos experimentales, parámetros utilizados para la reconstrucción y los ajustes de $f_{\rm b}$ puede ser obtenidos del apéndice A



Figura 3.5: Reconstrucción de la curva \check{h} , con 4 subintervalos, utilizando el método quad-fit.



Figura 3.6: Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 4 subintervalos, utilizando el método quad-fit.



Figura 3.7: Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.



Figura 3.8: Función $f_{\rm b}$ reconstruida completamente con quad-fit.



Figura 3.9: Reconstrucción de la curva \check{h} , con 4 subintervalos, utilizando el método spline-fit.



Figura 3.10: Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 4 subintervalos, utilizando el método splinefit.



Figura 3.11: Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.



Figura 3.12: Función $f_{\rm b}$ reconstruida completamente con spline-fit.



Figura 3.13: Reconstrucción de la curva \check{h} , con 6 subintervalos, utilizando el método specialfit.



Figura 3.14: Reconstrucción de la curva $\check{f}_{\rm b}$, con 6 subintervalos, utilizando el método specialfit.



Figura 3.15: Reconstrucción de $f_{\rm b}$ usando tres ajustes. Los primeros dos corresponden a la parte cóncava inicial, mientras que el tercero es el tramo final, hasta $\phi_{\rm máx} = 0.6554$.



Figura 3.16: Función $f_{\rm b}$ reconstruida completamente con special-fit.

3.3. Experimento B

Mediante una estadía de Julian Wyszynski, estudiante de Rheinisch-Westfaelische Technische Hochschule Aachen, fue posible realizar nuevos ensayos de laboratorio, esta vez agregando la componente de trabajar con bolitas de vidrio de distinto tamaño. Las esferas de vidrio son medidas usando un análisis de distribución en el tamaño que se resumen en la Tabla 3.1.

Código	Tamaño $[\mu \mathrm{m}]$
AD100	150
AD150	100
AD200	50

Tabla 3.1: Resumen de tamaños de las partículas sólidas del Experimento B.

A lo largo de este trabajo, nos referimos a cada set de bolitas simplemente por el nombre AD100, AD150 y AD200, según sea su tamaño.

Usando el picnómetro (ver apartado 3.1.2.1), se calcula la densidad de las bolas de vidrio y se obtiene

$$\rho_{\rm s} = 2451 \frac{\rm kg}{\rm m^3},$$

para los tres casos.

Los experimentos fueron realizados para concentraciones iniciales 20, 30 y 40 cp, es decir, $\phi_0 = 0.148, 0.213$, y 0.289.

Los datos de salida entregados por el Sedirack requieren modificaciones pequeñas antes de aplicar el método de la sección anterior. Estos son:

- 1. Filtrar las medidas erróneas, estas son borradas.
- 2. Seleccionar la altura H = 290 mm y usar datos desde esta altura hacia 0.

3. Complementar la información siguiendo una línea recta, de acuerdo al choque que se produce en un comienzo. Esto se hace hasta una altura de H = 330 mm.

En general este tratamiento se requiere, pues la altura inicial de la columna es H = 330 mmmm, sin embargo, el Sedirack, solo empieza a medir desde H = 290 mm, provocando un corrimiento de los datos. Note que este procedimiento se avala en el shock inicial que ocurre, por lo que la reconstrucción de datos hacia atrás significa solo prolongar una línea recta.

3.3.1. Resultados AD100

La Figura 3.17 muestra los datos obtenidos por el experimento luego de ser filtrados. De las cuatro experimentaciones sólo usaremos tres, debido a que la menor presentó mucho ruido producto de las limitaciones del Sedirack explicadas en el apartado 3.1.1.1, por ejemplo efectos de pared y una sedimentación muy veloz para el equipo. Simulamos éstos casos con el método spline-fit con cuatro subintervalos. En la Figura 3.18 podemos ver como la reconstrucción \check{h} es representativa de los datos, graficando correctamente la función sobre los datos experimentales. En particular, para el caso del tercer ensayo, con $\phi_0 = 0.289$ podemos representar \check{h} por la función a trozos:

$$\check{h}^{3}(t) = \begin{cases} 0.022t^{2} - 4.95t + 451.93 & \text{si } 0 \leq t < t_{j_{2}}, \\ 0.0004t^{3} + 0.14t^{2} - 16.37t + 833.4 & \text{si } t_{j_{2}} \leq t < t_{j_{3}}, \\ 0.0038t^{2} - 1.01t + 238.4 & \text{si } t_{j_{3}} \leq t \leq t_{\text{end}}. \end{cases}$$

En este caso, el primer y segundo subintervalo coinciden en sus parámetros, por lo que es posible fusionarlos. Las marcas con forma de estrella roja en la Figura 3.18 indican el t_{start} y t_{end} , que corresponden a los límites de la sección convexa con la cual se alimenta al simulador. Usando la misma concentración inicial que antes, podemos reconstruir la función de flujo $\check{f}_{\rm b}$



Figura 3.17: Datos experimentales

/

a trozos dada por,

$$f_{\rm b} = \begin{cases} 58.16\phi^3 - 52.34\phi^2 + 11.71\phi & \text{if } 0.0 \le \phi < 0.27, \\ 13.33\phi^2 - 11.69\phi + 2.68 & \text{if } 0.27 \le \phi < 0.31, \\ -\phi h_1'(\tau_1) & \text{if } 0.31 \le \phi < 0.33, \\ -\phi h_2'(\tau_2) & \text{if } 0.33 \le \phi < 0.41, \\ -\phi h_3'(\tau_3) & \text{if } 0.41 \le \phi < 0.51, \\ -\phi h_4'(\tau_4) & \text{if } 0.51 \le \phi < 0.55, \end{cases}$$

donde,

$$\alpha_i := \arccos\left(1 - \frac{54a_i^2(d_i - y)}{b_i^3}\right)$$
$$\tau_i := -\frac{b_i}{6a_i} \left(2\cos\left(\frac{\alpha_i - 2\pi}{3}\right) + 1\right), \quad \forall i = 1, \dots, 4,$$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} -1.0000e - 08\\ -3.5941e - 04\\ -3.7046e - 04\\ -1.0000e - 08 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 5.1510e - 02\\ 9.8304e - 02\\ 1.0047e - 01\\ 2.7842e - 03 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} -7.0285e + 00\\ -9.0594e + 00\\ -9.2010e + 00\\ -6.1439e - 01 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d} = \begin{pmatrix} 3.4561e + 02\\ 3.7499e + 02\\ 3.7808e + 02\\ 1.2649e + 02 \end{pmatrix}$$

Haciendo un procedimiento similar, podemos reconstruir $f_{\rm b}$ para las otras dos concentraciones iniciales y luego obtener una única función $f_{\rm b}$ dada por el promedio en la Figura 3.20.

Un correcto simulador debe a través de los datos experimentales, identificar parámetros para reconstruir \check{h} y así identificar $\check{f}_{\rm b}$, luego se entrega información adicional para ajustar una función $f_{\rm b}$ completa y así resolver el problema directo y obtener como solución los datos experimentales. La idea gráfica de este procedimiento corresponde a la validación vista en la Figura 0.1.

Así, se construye un simulador que resuelva el problema directo usando un método numérico estable y convergente, en nuestro caso el método numérico de Godunov [68, 82]. Los resultados de la solución numérica y los datos experimetales son superpuestos en las Figuras 3.22 a 3.24.

Resultados similares para las concentraciones AD150 y AD200 se pueden ver en el Apéndice B



Figura 3.18: Reconstrucción \check{h} sobre datos experimentales



Figura 3.19: $f_{\rm b}$ superpuesta en un mismo gráfico



Figura 3.20: Promedio de las funciones de flujo.



Figura 3.21: $f_{\rm b}$ superpuesta en un mismo gráfico.



Figura 3.22: Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.148$



Figura 3.23: Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.213$.



Figura 3.24: Problema directo, resuelto por el método de Godunov para $\phi_0 = 0.289$.

3.3.2. Conclusiones

Las resultados muestran un correcto desempeño del simulador que identifica los parámetros para el caso spline-fit, donde se puede reconstruir una función f_b única a partir de tres funciones de flujo provenientes de diferentes concentraciones iniciales. A su vez, esta función sirve para simular y comparar con los datos iniciales, lo que muestra un correcto ajuste en concentraciones altas, identificando buena parte del segmento convexo correspondiente a la onda de rarefacción. Para las concentraciones bajas se identifican correctamente las ondas de choque iniciales y finales, mientras que la rarefacción es parcialmente simulada.

En general, los resultados son muy satisfactorios debido a que la reconstrucción entrega sólo un tercio de la función f_b completa, mientras que el resto se realiza con ajustes bajo datos empíricos y aún así se consiguen resultados correctos en la validación con datos experimentales o en la variación de las concentraciones iniciales.

3.4. Experimentos de literatura

En la literatura existen muchos experimentos del test de Kynch, algunos de ellos se mencionaron en el apartado 1.4. Aquí elegimos trabajar con los datos publicados por Karamisheva e Islam en 2005 [76], los cuales se muestran en las Figuras 3.25 y 3.27. Ellos trabajaron cuatro tests de Kynch para lodo activado de una planta municipal de tratamiento de aguas servidas con concentraciones iniciales $\phi_0 = 1.6$, 2.4, 3.7 y 7.2 g/L.

Como sucede en la mayoría de los experimentos de Kynch que uno puede encontrar en la literatura, éstos poseen un número muy limitado de puntos, por lo que para nuestro simulador, sólo podemos a lo más dos subintervalos.

Se elige $t_{\text{start}} \approx 15$ min para el inicio del segmento convexo, mientras que el intervalo $[0, t_{\text{start}}]$ se utiliza para calcular la pendiente del segmento recto y alimentar la solución con $f_{\text{b}}(\phi_0) = v_{\text{s}}\phi_0$. Estos puntos se muestran con forma de círculo. Presentamos en las Figuras 3.26 y 3.28 soluciones con el método spline-fit para uno y dos subintervalos respectivamente.



Figura 3.25: Ajuste de \check{h} para datos provenientes de lodo activado [76] con un subintervalo y usando el método spline-fit.



Figura 3.26: Ajuste de $\check{f}_{\rm b}$ para datos provenientes de lodo activado [76] con un subintervalo

y usando el método spline-fit.



Figura 3.27: Ajuste de \check{h} para datos provenientes de lodo activado [76] con dos subintervalos y usando el método spline-fit.



Figura 3.28: Ajuste de $\check{f}_{\rm b}$ para datos provenientes de lodo activado [76] con dos subintervalos y usando el método spline-fit.

Capítulo 4

Sedimentación continua

La sedimentación continua es objeto de muchas aplicaciones, como se vieron en la parte introductoria y debido a él se deben los esfuerzos de la sedimentación batch, que es el caso particular cuando el flujo de alimentación y descarga son nulos.

El principio de la operación de una unidad de clarificador-espesador puede ser inferido de la Figura 4.1. Por la alimentación entra la suspensión, la cual será separada, por la fuerza de gravedad, en un sedimento concentrado y un líquido clarificado. Esto es alimentado dentro de un tambor cilíndrico a un nivel de profundidad de z = 0, con un flujo volumétrico (caudal) $Q_{\rm f} \ge 0$ y con una fracción de volumen de sólidos de alimentación $u_{\rm f} \ge 0$. El flujo de alimentación inmediatamente se propaga sobre toda la sección transversal y es separada dentro, por corrientes de flujo en dirección hacia arriba o hacia abajo, formando las llamadas *zonas de clarificación y espesamiento* -H < z < 0 y 0 < z < B, respectivamente. En la figura 4.2 se tiene una representación gráfica (para el modelo) y real (para los experimentos) de dicha unidad.

Las partículas sólidas se van hacia abajo, formando un sedimento concentrado en el fondo, el cual es continuamente removido con una descarga controlable a una altura z = B de flujo $Q_u \ge 0$ denominada *flujo de descarga*, mientras que el líquido sobrenadante que rebalsa, es recolectado en una canaleta circunferencial que se denomina *overflow* a una altura z = -H, en donde se evacúa el flujo de efluente, denotado por $Q_e \le 0$. Se supone que la separación sólido-líquido tiene lugar dentro de la unidad solamente, y no en el flujo de rebalse



Figura 4.1: Vista esquemática de un espesador-clarificador, sin detalles técnicos [21].

ni descarga, en donde ambas fases se mueven con la misma velocidad. De esta forma, se define una función γ que indica cuando se está en el interior o exterior del tanque.

$$\gamma(z) = \begin{cases} 1 & \text{para } -H \le z \le B \\ 0 & \text{para } z < -H \text{ o } z > B \end{cases}$$

En aplicaciones a tanques de relave reales, las unidades tienen frecuentemente en el fondo una pendiente suave, en forma de cono. Sin embargo, para este trabajo asumimos que el área de sección transversal *A* es constante.

La ley de conservación de masa señala que la tasa de incremento de masa en un intervalo arbitrario (z_1, z_2) del eje de profundidad es igual al flujo en $(\Phi|_{z=z_2})$ menos el flujo fuera de $(\Phi|_{z=z_2})$ más la producción al interior del intervalo

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{z_1}^{z_2} A\phi(z,t) dz = A(\Phi|_{z=z_1} - (\Phi|_{z=z_2}) + \int_{z_1}^{z_2} Q_{\mathrm{f}}(t)\phi_{\mathrm{f}}(t)\delta(z) dz,$$
(4.1)



Figura 4.2: Concepto uni-dimensional de un clarificador-espesador (izquierda). Experimento real de un espesador (derecha).

de donde $Q_{\rm f}:=Q_{\rm u}-Q_{\rm e}$ es el flujo volumétrico de alimentación $\phi_{\rm f}$ es la concentración inicial y

$$\Phi\left(\phi, \frac{\partial C}{\partial z}, z, t\right) = F(\phi, z, t) - (\gamma(z)d_{\text{comp}}(C))\frac{\partial\phi}{\partial z}$$
(4.2)

es el flujo total. Mientras que,

$$F(\phi, z, t) := \begin{cases} -Q_{\rm e}(t)\phi/A & \text{para } z < -H, \\ -Q_{\rm e}(t)\phi/A + \underline{(}\phi) & \text{para } -H \le z < 0, \\ Q_{\rm u}(t)\phi/A + f_{\rm b}(\phi) & \text{para } 0 < z \le B, \\ Q_{\rm u}(t)\phi/A & \text{para } z > H \end{cases}$$

$$(4.3)$$

es la función flujo convectivo. Note que, como era de esperarse, (4.3) tiene influencia de f_b durante todo el proceso dentro del tanque.

La ecuación (4.1) es el modelo en forma integral. Note que las ecuaciones (4.1)-(4.3) no contienen las áreas de sección transversal de las tuberías con las cuales interactua nuestro sistema. Estamos interesados sólo en la concentración en la salida de las tuberías y no el la velocidad de los flóculos. Bajo la suposición que las partículas siguen las corrientes de agua en la salida de las tuberías, las concentraciones de salida son independientes del área de dichas tuberías [47].

La función de compresión d_{comp} está dada en [21],

$$d_{\rm comp}(\phi) := \frac{\rho_{\rm s}}{(\rho_{\rm s} - \rho_{\rm f})g} v_{\rm hs}(\phi) \sigma_{\rm e}'(\phi), \tag{4.4}$$

donde ρ_s y $\rho_f < \rho_s$ son las densidades de masa del sólido y del fluido respectivamente, estas son constantes; g es la aceleración de gravedad, y $\sigma_e = \sigma_e(\phi)$ es la función de tensión efectiva de sólidos, cuya derivada satisface que

$$\sigma'_{\rm e} = \begin{cases} = 0 & \text{para } 0 \le \phi < \phi_{\rm c}, \\ > 0 & \text{para } \phi > \phi_{\rm c}, \end{cases}$$
(4.5)

donde ϕ_c es la concentración crítica, la cual depende del material (sólido) utilizado e indica cuando las partículas de sólido comienzan a tocarse unas con otra y empieza la fase de compresión.

La variable d_{comp} es independiente del proceso de sedimentación, es decir, puede ser que $d_{\text{comp}} \equiv 0$ para materiales ideales que no presentan compresión pero igualmente el modelo sedimentará. Esto provee una gran flexibilidad para usar el modelo en diferentes condiciones. Para nuestro modelo numérico, serán funciones independientes y puede ser ingresadas manualmente, consideradas como parámetro para calibración.

Dado un dato inicial en t = 0, llamamos solución exacta a la solución que satisface la condición de entropía del modelo en su forma diferencial

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}F(\phi, z, t) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\gamma(z)(z)d_{\rm comp}(\phi)\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + \frac{Q_{\rm f}(t)C_{\rm f}(t)}{A}\delta(z)) \tag{4.6}$$

Una solución numérica es siempre una aproximación de la solución exacta, la ecuación (4.6) puede ser resuelta sin imponer condiciones de borde en ϕ . Sólo se necesita dar un dato inicial $\phi(z, 0)$. Todas las concentraciones de borde son salidas del modelo y podrían no estar definidas.

4.1. Funciones constitutivas

Los parámetros del modelo son introducidos sólo en las fusiones constituvas, las cuales en nuestro modelo son $f_{\rm b}$, $\sigma_{\rm e}$ y $d_{\rm comp}$. Estos parámetros no son ingresados de manera arbitraria, sino que deben ser la salida de experimentos dedicados para encontrar estos parámetros, por ejemplo, para $f_{\rm b}$ los descrito en el capítulo 2. Es importante intentar usar experimentos para cada muestra y no simplificar el trabajo a través de datos de tabla en la bibliografía pues así se obtendrá una simulación de mejor calidad y más real.

Para la tensión efectiva de sólido $\sigma_{e}(\phi)$, De Clerq [40], propone la siguiente semiempírica basada en un modelamiento inverso usando datos experimentales

$$\sigma_{\rm e}(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{para } \phi < \phi_{\rm c}, \\ \alpha \lambda \left(1 + \frac{\phi - \phi_{\rm c}}{\beta} \right) & \text{para } \phi \ge \phi_{\rm c}, \end{cases}$$
(4.7)

con parámetros empíricos $\alpha, \beta > 0$. Funciones empíricas constitutivas son sugeridas para $d_{\rm comp}$. Aquí preferimos usar la ecuación (4.4) que está basada en principios físicos, las cuales involucran relaciones constitutivas ya señaladas $v_{\rm s}$ y $\sigma_{\rm e}$.

Si suponemos que todos los flujos variables son horizontalmente constantes, que los efectos de pared son despreciables, y que no existe influencia de las rastras, entonces el modelo conceptual se reduce a la configuración mostrada en la Figura 4.1. Para deducir el modelo matemático final, reemplazamos las velocidades de fase de sólidos y fluidos v_s y v_f respectivamente, por la velocidad promedio de volumen de la mezcla, $q := uv_s + (1 - u)v_f$ y la velocidad relativa $v_r = v_s - v_f$. Entonces, siempre se tiene que $q_z = 0$, esto es, q = q(t), pues no hay fuentes ni sumideros; y $v_s = q + (1 - u)v_r$. En particular, q = 0 para el asentamiento en una columna cerrada. Para el modelo de CT de la Figura 4.2 (izquieda), las velocidades Q_u , Q_e y q_f están relacionadas con respecto al flujo de masa de volumen por $Q_u = \frac{Q_u}{A}$, $Q_e = \frac{Q_e}{A}$ y $q_f = \frac{q_f}{A}$ respectivamente, Más aún, partiendo de una suposición constituva como

$$v_r(\phi) = -\frac{f_{\rm b}(\phi)}{\phi(1-\phi)}$$

obtenemos que la ecuación gobernante es

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} f(\gamma(z), \phi) = 0 \quad z \in \mathbb{R}, \quad t > 0,$$
(4.8)

$$\phi(z,0) = \tilde{\phi}_0(z), \quad z \in \mathbb{R}, \tag{4.9}$$

donde

$$f(\boldsymbol{\gamma}(z),\phi) := g(z,\phi) = \gamma_1(z)f_{\rm b}(\phi) + \gamma_2(z)(\phi - \phi_{\rm F}).$$

Donde las componentes del vector de parámetros discontinuos $\gamma := (\gamma_1, \gamma_2)$ son definidas a continuación, y discriminan entre el interior y exterior de la unidad de CT y la dirección de la corriente de flujo respectivamente.

$$\gamma_1(z) := \begin{cases} 1 & \text{para } z \in (x_{\mathrm{L}}, x_{\mathrm{R}}), \\ 0 & \text{para } z \leqslant x_{\mathrm{L}} \text{ o } z \geqslant x_{\mathrm{R}}, \end{cases}, \qquad \gamma_2(z) := \begin{cases} q_{\mathrm{L}} & \text{para } z < 0, \\ q_{\mathrm{R}} & \text{para } z > 0, \end{cases}$$
(4.10)

donde $q_{\rm L} < 0$ y $q_{\rm R} > 0$ son velocidades controladas, $\phi_{\rm F}$ es la concentración de alimentación, y $x_{\rm L}$, 0 y $x_{\rm R}$ son los niveles de rebalse, alimentación y descarga del equipo, respectivamente. De esta forma, $g = g(z, \phi)$ es la función discontinua a trozos (con respecto a z) dada por

$$g(z,\phi) := \begin{cases} q_{\rm L}(\phi - \phi_{\rm F}) & \text{para } z < x_{\rm L}, \\ q_{\rm L}(\phi - \phi_{\rm F}) + f_{\rm b}(\phi) & \text{para } x_{\rm L} < z < 0, \\ q_{\rm R}(\phi - \phi_{\rm F}) + f_{\rm b}(\phi) & \text{para } 0 < z < x_{\rm R}, \\ q_{\rm R}(\phi - \phi_{\rm F}) & \text{para } z > x_{\rm R}, \end{cases}$$
(4.11)

Este modelo fue introducido en [21] como una versión simple para suspensiones no floculadas. Si ahora, agregamos compresión de las partículas (esto es, posibilidad a material floculado), el modelo cambia en su lado derecho al siguiente problema de valores de iniciales para una EDP de convección-difusión fuertemente degenerada:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}g(z,\phi) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\gamma_1(z)\frac{\partial A(\phi)}{\partial z}\right), \quad z \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \tag{4.12}$$

$$\phi(z,0) = \tilde{\phi}_0(z), \quad z \in \mathbb{R}.$$
(4.13)

Donde recuperamos el modelo anterior.

4.2. Discretización del modelo

m

Subdividimos el tanque en N capas internas, tal que cada capa tenga la forma

$$\Delta z = (B+H)/N,$$

y definimos $\phi_j := \phi_j(t)$ como el promedio de la solución exacta ϕ sobre la capa j en el tiempo t, esto es,

$$\phi_j := \frac{1}{\Delta z} \int_{z_j-1}^{z_j} \phi(z, t) \mathrm{d}z.$$

Así, si calculamos la ley de conservación en cada capa, se tiene,

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\phi_j}{\mathrm{d}t} &= -\frac{F(\phi(z_j,t),z_j,t) - F(\phi(z_{j-1},t),z_{j-1},t)}{\Delta z} \\ &+ \frac{J_{\mathrm{disp}}(z_j,t) - J_{\mathrm{disp}}(z_{j-1},t)}{\Delta z} \\ &+ \frac{J_{\mathrm{comp}}(z_j,t) - J_{\mathrm{comp}}(z_{j-1},t)}{\Delta z} \\ &+ \frac{1}{\Delta z} \int_{z_j-1}^{z_j} \frac{Q_{\mathrm{f}}(t)\phi_{\mathrm{f}}(t)}{A} \delta(z) \mathrm{d}z. \end{aligned}$$

4.2.1. Aproximación del flujo convectivo

El flujo convectivo $F(\phi(z_j, t), z_j, t)$ en el borde entre las capas $j \neq j + 1$ debe ser reemplazado por un flujo numérico convectivo F_j^{num} asociado con la posición z_j , luego,

$$F_j^{\text{num}}(\phi_j, \phi_{j+1}(t), t) \approx F(\phi(z_j, t), z_j, t)$$

En un simulador de sedimentación para la industria se requiere velocidad en el cómputo, por lo que elegimos un método de primer orden para el flujo numérico, en este caso, el flujo numérico de Godunov en $f_{\rm b}$ como una aproximación de $f_{\rm b}(\phi(z_j,t)),$ el cual tiene la forma

$$G_{j} = G_{j}(\phi_{j}, \phi_{j+1}) = \begin{cases} \min_{\phi_{j} \le \phi \le \phi_{j+1}} f_{\rm b}(\phi) & \text{si } \phi_{j} \le \phi_{j+1}, \\ \max_{\phi_{j} \ge \phi \ge \phi_{j+1}} f_{\rm b}(\phi) & \text{si } \phi_{j} > \phi_{j+1}. \end{cases}$$
(4.14)

El cálculo de G_j puede ser en gran medida simplificado cuando f_b tiene solo un máximo local (ver [16]). y así, podemos reescribir el flujo numérico por

$$F_{j}^{\text{num}} = F_{j}^{\text{num}}(\phi_{j}, \phi_{j+1}, t)$$

$$= \begin{cases} -(Q_{\text{e}}(t)/A)\phi_{j+1} & \text{para } j = -2, -1, \\ -(Q_{\text{e}}(t)/A)\phi_{j+1} + G_{j} & \text{para } j = 0, j_{\text{f}} - 1, \\ (Q_{\text{u}}(t)/A)\phi_{j} + G_{j} & \text{para } j = j_{\text{f}}, \dots, N, \\ (Q_{\text{u}}(t)/A)\phi_{j} & \text{para } j = N + 1, N + 2, \end{cases}$$

donde G_j está dado por (4.14).

$$\phi_{j}^{n+1} = \phi_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(F_{j}^{\text{num},n} - F_{j-1}^{\text{num},n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(J_{\text{disp},j}^{\text{num},n} - J_{\text{disp},j-1}^{\text{num},n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(J_{\text{comp},j}^{\text{num},n} - J_{\text{comp},j-1}^{\text{num},n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{Q_{f}(t_{n})\phi_{f}(t_{n})}{A} \delta_{j,j_{f}}, \qquad (4.15)$$

para todo $j = -1, \ldots, N+2$.

4.2.2. Condición CFL

Para asegurar la convergencia del método (4.15) en un intervalo de tiempo [0, T] debemos imponer una condición CFL adecuada (4.16).

Dado una capa espacial Δz , debemos elegir un paso de tiempo Δt tal que sea válida la condición

$$\Delta t \le \left[\frac{1}{\Delta z} \left(\max_{0 \le t \le T} \frac{Q_{\rm f}(T)}{A} + \max_{0 \le \phi \le \phi_{\rm max}} |f_{\rm b}'(\phi)|\right)\right]$$

$$+\frac{2}{(\Delta z)^2} \left(\max_{0 \le \phi \le \phi_{\max}} d_{\text{comp}}(\phi) + \max_{-H \le z \le B, 0 \le t \le T} d_{\text{disp}}(z, Q_{\text{f}}(t)) \right) \right]^{-1}$$
(4.16)

4.2.3. Ejemplos numéricos

Usamos una la función reconstruida en el apartado 3.3 para el experimento B con el material AD100.



$$Q_{\text{feed}}(t) := 250$$
$$Q_{\text{under}}(t) := \begin{cases} 0 & \text{if } 0 \le t < 3.0\\ 80 & \text{if } 3.0 \le t. \end{cases}$$



$$Q_{\text{feed}}(t) := 250$$

$$Q_{\text{under}}(t) := \begin{cases} 180 & \text{if } 0 \le t < 3.0\\ 80 & \text{if } 3.0 \le t. \end{cases}$$



$$Q_{\text{feed}}(t) := 250$$

$$Q_{\text{under}}(t) := \begin{cases} 180 & \text{if } 0 \le t < 3.0\\ 80 & \text{if } 3.0 \le t < 9.0\\ 180 & \text{if } t \ge 9.0 \end{cases}$$

4.3. Experimento continuo

Mediante dos pasantías realizadas durante el año 2013 en el CENTRO DE INVESTIGA-CIÓN DE LA CONSULTORA DE INGENIERÍA JRI S.A., en Santiago, se realizaron experimentos de espesamiento continuo con material real, en este caso, relave final de cobre. Un espesador en la industria funciona en la mayoría de los casos con una concentración de alimentación de relave al 12 %. Se realizó este experimento en dos versiones, con floculante y sin floculante. Además otro experimento con una concentración mucho mayor a lo normal, al 23 %. Debido a las características del experimento y de los instrumentos usados, en este caso se tuvo que sobreflocular la muestra para que sedimentara.

4.3.1. Descripción del equipo

4.3.2. Microtrac S3500

El Micotrac S3500 es un sofisticado instrumento para medir la granulometría de un material. Consiste en un arreglo de tres lasers rojos y dos detectores fotoeléctricos que por difracción identifican el tamaño de cada partícula sólida en un rango entre 0.02 y 2800 micrones y entregan un set de datos acerca de la distribución de partículas por deciles (ver Figura 4.3). Al ser un equipo delicado, sólo puede ser manipulado por personas certificadas, quienes entregan los datos requeridos.

4.3.3. Columna de acrílico

La pieza fundamental del experimento es una columna de acrílico de sección transversal constante de diámetro 6 cm y una altura efectiva de 50 cm, ver Apartado 4.3.3. Posee cuatro llaves laterales a alturas de 4, 8, 12 y 30 cm y un rebalse a los 45 cm, medidas desde la base de la columna hacia arriba. Para este estudio se usarán sólo as tres primeras llaves laterales.



Figura 4.3: Microtrac. Equipo para medir el tamaño de las partículas usando un arreglo de tres lasers para ello.

4.3.4. Bomba peristáltica

Es una bomba hidráulica utilizada para bombear fluidos a través de un sistema de tres rodillos quienes empujan el fluido de una manguera flexible. Esta bomba no interactúa con el fluido, solo con su manguera que lo contiene. Tiene un número de revoluciones por minuto ajustable, con lo que es posible controlar el flujo del líquido.

4.3.5. Descripción del experimento

El experimento de espesamiento consiste en una columna de acrílico conectada a dos bombas peristálticas, que controlan los flujos de alimentación y descarga, además de una manguera abierta para el rebalse. A su vez, la bomba de alimentación está conectada a un estanque equipado con un agitador el cual mantiene la pulpa homogeneizada antes de entrar a la columna. De ser necesario agregar floculante, se conecta una bomba peristáltica con dicho material a la manguera de alimentación justo antes de entrar a la columna. Tanto la bomba de descarga, como la manguera de rebalse están conectados a tambores donde deposita el material saliente del proceso.. Cada ciertos intervalos de tiempo es necesario tomar muestras de la concentración en los puntos de observación, es decir, alimentación, descarga, rebalse y llaves laterales. Con estas muestras se mide la concentración volumétrica ϕ (a través de su concentración en peso cp), granulometría y, de ser posible, turbidez del líquido saliente de rebalse



Figura 4.4: Columna de acrílico en proceso de sedimentación batch posterior al experimento continuo.

Una representación del montaje se puede ver en la Figura 4.5, la cual muestra dos ensayos en proceso para diferentes concentraciones en peso, lo que se traduce en un cálculo diferente cantidad de material requerido, de donde, el agitador y el tanque de alimentación debe ser mucho mayor a medida que la concentración volumétrica (o el cp) aumenta (ver figura 4.5(b))

4.3.6. Material utilizado

Para el experimento hemos usado un relave final de cobre, caracterizado por un PH = 7.7 y $\rho_{\rm s} = 2.71 \frac{\rm g}{\rm cc}$. Se asume que $\rho_{\rm f} = 1 \frac{g}{cc}$. Se trabajaron dos concentraciones



(a) Experimento continuo con relave al 12 % cp



(b) Experimento continuo con relave al 23 % cp

Figura 4.5: Montaje del experimento continuo en columna de acrílico de 50 cm.

- 12 % cp nominal ($\phi_0 = 0.0479$) con y sin floculante. En el caso del material sin floculante, presentó un rebalse a lo largo de todo el ensayo y no se pudo observar la interfaz agua-sedimento.
- 23 % cp nominal ($\phi_0 = 0.0993$) con floculante.

Las curvas de sedimentación batch para un relave al 12 % cp está dado por la figura 4.6, mientras que para el relave al 23 % cp se puede ver en la figura 4.7. Es importante notar en la Figura 4.6 que la altura final entre la sedimentación con floculante y sin floculante difieren

principalmente porque el ensayo fue detenido antes lograr un sedimento constante (y final) en el fondo, prueba de ello es la pendiente negativa que se observa en los últimos puntos. Este error hace inviable el aplicar el método del apartado 2.3, pues el segmento convexo no está completamente determinado, por lo que los resultados entregados en este capítulo son sólo para trabajos futuros y para respaldo bibliográfico, pero no se hará ninguna simulación al respecto.



Figura 4.6: Ensayos de sedimentación batch con y sin floculante con relave de cobre para una concentración al 12 % cp ($\phi = 0.0479$)



Figura 4.7: Ensayos de sedimentación batch con relave de cobre floculado para una concentración al 23 % cp ($\phi = 0.0993$)
4.3.7. Floculante

Para las suspensiones floculadas usamos una dosis nominal de 15 gpt, lo que significa una dilución de floculante de $0.13\frac{g}{L}$

4.3.8. Parámetros del ensayo

Para en ensayo continuo consideramos un área unitaria nominal de $0.1 \frac{m^2}{tpd}$, lo que significa tener un flujo de pulpa nominal de $0.15 \frac{L}{min}$ para la pulpa al 12 % cp y de $0.0730 \frac{L}{min}$ para la pulpa de 23 % cp. Esto debido a una limitación en la bomba de floculante, la cual se debía mantener constante a $2.36 \frac{cm^3}{min}$. La densidad de la pulpa para 12 % cp es de $1.08 \frac{g}{cc}$, mientras que para la pulpa de 23 % cp de $1.17 \frac{g}{cc}$,

4.3.9. Antes del ensayo

Primero se dispone la cantidad de pulpa disponible y se separa en tambores más pequeños de acuerdo al cp nominal pedido. Luego se proceden a calcular los flujos, la cantidad de material y el tiempo de duración del ensayo. Se establecen los objetivos del ensayo y se pide al laboratorio y se dispone del material de toma de muestras y datos en función a ello (vidrio reloj, vasos precipitados y bandejas). Luego se procede a montar el equipo como se detalló en el apartado 4.3.5. Se rellena inicialmente la columna de acrílico con agua clara, se revisa el correcto funcionamiento de las llaves laterales y se completa el checklist estándar previo al ensayo. Se inicia el cronómetro y se encienden las bombas. Una imagen de este proceso se ve en la Figura 4.8(a), mientras que la Figura 4.8(b) muestra el trabajo efectuado por el agitador en la pulpa de alimentación.

4.3.10. Durante el ensayo

Se controlan y miden constantemente los flujos de alimentación y descarga. Inicialmente se parte con alimentación al 50 % de lo calculado y se va aumentando gradualmente hasta llegar a 100 %. Típicamente 50, 75, 100. Se anota en cada intervalo de tiempo la altura de las



(a) Inicio de un experimento continuo. Columna ini- (b) Trabajo de un agitador en la homogeneización de cialmente llena de agua clara.

Figura 4.8: Partes del proceso del experimento continuo

interfaces agua clarificada-suspensión y suspensión-sedimento hasta lograr algún punto estacionario. Una vez estabilizado los niveles de agua clarificada y sedimento, se toman muestras por las llaves laterales. Sólo en algunas ocasiones a lo largo del experimento, se interrumpe el flujo de alimentación para obtener una muestra de éste.

Una vez concluido el tiempo detallado para la prueba, se procede a apagar las bombas de alimentación y descarga y así realizar una prueba de sedimentación batch con el material dentro de la columna, incluyendo el tiempo $t = t_{\infty}$, muestreado al día siguiente.

4.3.11. Después del ensayo

Una vez concluido el experimento, se generan las tablas de datos y las observaciones correspondientes al ensayo. Mientras que en el laboratorio se continua con la caracterización de las muestras entregadas, mediante un pesaje de las muestras cada hora, hasta lograr una pulpa seca y así obtener el cp, además de los ensayos de granulometría respectivos.

Los resultados de los ensayos para un cp al 12 % se encuentran en las Figuras 4.9, 4.10, 4.13 y 4.14 para la versión sin floculante y en las Figuras 4.15 a 4.20, para el material floculado



Figura 4.9: Flujos de alimentación para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.10: Flujos de descarga para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.11: Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.12: Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.13: Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.14: Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp sin floculante



Figura 4.15: Flujos de alimentación para relave final de cobre al 12 % cp con floculante



Figura 4.16: Flujos de descarga para relave final de cobre al 12 % cp con floculante



Figura 4.17: Flujos de floculante para relave final de cobre al 12 % cp con floculante



Figura 4.18: Fracción de masa de la alimentación para relave final de cobre al 12 % cp con floculante.



Figura 4.19: Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 12 % cp con floculante



Figura 4.20: Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 12 % cp con floculante



Figura 4.21: Flujos de alimentación para relave final de cobre al 23 % cp con floculante



Figura 4.22: Flujos de descarga para relave final de cobre al 23 % cp con floculante



Figura 4.23: Flujos de floculante para relave final de cobre al 23 % cp con floculante



Figura 4.24: Fracción de masa de la alimentación para relave final de cobre al 23 % cp con floculante.



Figura 4.25: Altura de las interfaces agua-suspensión y suspensión-lodo para relave final de cobre al 23 % cp con floculante



Figura 4.26: Concentración de las llaves laterales para relave final de cobre al 23 % cp con floculante

Capítulo 5

Conclusiones sobre resultados y extensiones futuras

5.1. Test de Diehl

El test de Diehl es un experimento en este momento teórico que no ha podido ser llevado a la práctica debido a falta de equipo necesario. Aquí damos una breve idea, que quedará como trabajo futuro para poder desarrollarla.

Del estudio del test de Diehl, se infiere que la principal limitación es construir la membrana inicial entre la concentración alta y el agua clara. Esta debe desaparecer en un instante t = 0 de manera muy rápida y sin interferir en la mezcla de las dos concentraciones distintas. Proponemos para ello usar un cervo motor, el cual esté programado para contraer la membrana como un obturador de cámara. Se estudian formas de abrir separando la membrana en partes simétricas. Se cree que la ayuda de un sistema arduino servirá para automatizar el experimento y controlar mejor las variables.

Un sistema se puede dotar de las siguientes propiedades

- Sensor de luz en distintos puntos para medir la intensidad de luz de un láser que atraviesa el tubo y según la luminosidad calcular la concentración del sólido.
- Sensor de presión a lo largo del tubo para medir la presión por exceso de poros en cada instante de una manera no invasiva.

• Camara de alta velocidad para medir la interfaz de manera complementaria al laser.

5.2. Interpretación de los resultados obtenidos

Para suspensiones ideales los resultados son muy buenos y predicen exactamente lo que necesitamos para los diferentes materiales tratados. Sin embargo, para concentraciones floculadas y reales se requiere más experimentos para estimar un método de generalización.

Los experimentos continuos realizados fueron en una columna de 60 cm, lo que provocó problemas en conseguir estados estacionarios. Esto impide tener un enfoque más claro sobre si considerar el modelo real antes de una concentración ϕ_c y hacer estimaciones para las concentraciones $\phi > \phi_c$.

Queda como trabajo futuro hacer más ensayos de laboratorio batch con un abanico más grande de concentraciones iniciales y así hacer una validación un dato de prueba, es decir, de n ensayos realizados, simular una función f_b con los primeros n - 1 tests y luego comparar la solución del problema directo con los datos del n-ésimo test.

Anexo A

Experimento A - Gráficos y tablas

Sea
$$p_i = (a_i, b_i, c_i, d_i)$$
 y $p = (p_1^T, p_2^T, ..., p_n^T)^T$, así,

($1.0\cdot 10^{-8}$	$1.0\cdot 10^{-8}$	$1.0\cdot 10^{-8}$	$1.0 \cdot 10^{-8}$
	1621.0	1621.0	1621.0	1621.0
	212.9	212.9	212.9	212.9
	-0.4019	-0.4019	-0.4019	-0.4019

i =

5

phi0 =

3.1800e-01

param =

5.9681e-04	1.4258e-04	5.0650e-04	1.6406e-03
-6.3372e-01	-3.6027e-01	-5.1239e-01	-7.8685e-01
2.9837e+02	2.5721e+02	2.7311e+02	2.8971e+02
0	0	0	0

cotaH =

40 121 209 301 402

cotaF =

3.1790e-01 3.4350e-01 3.6363e-01 3.7359e-01 4.5199e-01

p =

@(phi)valA(1)*phi+valA(2)*phi.^2+valA(3)*phi.^3

ans =

9.3085e+00 -4.1355e+01 4.5950e+01

q =

@(phi)valB(1)+valB(2)*phi+valB(3)*phi.^2

ans =

3.3302e+00 -1.6150e+01 2.0289e+01

0

r =

@(phi)valC(1)*phi.^2+valC(2)*phi+valC(3) ans = 1.7892e-01 -5.9218e-01 3.1127e-01 i = 6 phi0 = 3.3800e-01 param = 1.2928e-03 7.5907e-04 2.8045e-04 1.0173e-03 -7.5392e-01 -6.2370e-01 -4.3321e-01 -8.5615e-01 2.8551e+02 2.6655e+02 3.2725e+02 2.9345e+02 0 0 0 cotaH =

50 122 199 287 372

```
cotaF =
   3.3425e-01 3.5377e-01 3.7975e-01 3.9846e-01 5.2022e-01
p =
   @(phi)valA(1)*phi+valA(2)*phi.^2+valA(3)*phi.^3
ans =
   9.3085e+00 -4.1355e+01 4.5950e+01
q =
    @(phi)valB(1)+valB(2)*phi+valB(3)*phi.^2
ans =
   3.3302e+00 -1.6150e+01 2.0289e+01
r =
   @(phi)valC(1)*phi.^2+valC(2)*phi+valC(3)
```

ans =

1.7892e-01 -5.9218e-01 3.1127e-01

Anexo B

Experimento B - Gráficos y tablas

Se presentan los experimentos para materiales 150 y 200

Los datos será mostrados, en primer lugar, con una gráfica resumen de los datos experimentales, la función reconstruida f_b , y la función f_b promedio. Luego se procede a un resumen del procedimiento por cada ϕ_0 . En esta etapa, los gráficos (a), muestran los datos experimentales en bruto, seguido de \check{h} simulado sobre los datos (b). En (c) obtenemos \check{f}_b como salida del simulador presentado en el apartado 2.3, para luego en (d) y (e) reconstruir el tramo cóncavo con dos funciones polinomiales auxiliares, las cuales mantienen la clase C^2 de \check{f}_b . Finalmente en (f) resolvemos el problema directo usando el promedio de las tres funciones \check{f}_b construidas mediante el método de Godunov y lo graficamos sobre los datos experimentales para graficar las similitudes del método empleado.

En las siguientes gráficas, la figura (a) muestra los datos experimentales en bruto, seguido de \check{h} simulado sobre los datos (b). En (c) obtenemos $\check{f}_{\rm b}$ como salida del simulador presentado en el capítulo anterior, para luego en (d) y (e) reconstruir el tramo cóncavo con dos funciones polinomiales auxiliares, las cuales mantienen la clase C^2 de $\check{f}_{\rm b}$. Finalmente en (f) resolvemos el problema directo usando el promedio de las tres funciones $\check{f}_{\rm b}$ construidas mediante el método de Godunov y lo graficamos sobre los datos experimentales para graficar las similitudes del método empleado.



Figura B.2: Construcción parte cóncava y posterior suavización con $\phi_0 = 0.148$.



Figura B.4: \check{f} simulada con $\phi_0 = 0.213$.



Figura B.5: Construcción parte cóncava y posterior suavización $\phi_0 = 0.213$.



Figura B.6: $f_{\rm bk}$ para $\phi = 0.213$.



Figura B.7: Construcción parte cóncava y posterior suavización $\phi_0 = 0.213$.



Figura B.8: $f_{\rm bk}$ para $\phi = 0.213$.



Figura B.10: Construcción parte cóncava y posterior suavización



Figura B.12: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$

time [s]







Figura B.14: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.16: Problema directo sobre los datos



Figura B.18: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$







Figura B.20: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.22: Problema directo sobre los datos



Figura B.23: Datos AD100.eps



Figura B.24: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$







Figura B.26: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.28: Problema directo sobre los datos

B.1. AD150.eps

Datos con AD 150



Figura B.29: Reconstrucción de \check{h} para los datos experimentales AD150





Figura B.31: Función de flujo $f_{\rm b}$ promediada de AD150







Figura B.33: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$


Figura B.35: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.37: Problema directo sobre los datos



Figura B.38: Datos AD150.eps



Figura B.39: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$



Figura B.41: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.43: Problema directo sobre los datos



Figura B.44: Datos AD150.eps



Figura B.45: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$



Figura B.47: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.49: Problema directo sobre los datos

B.1.1. AD_200.eps

Datos con AD200



Figura B.50: Reconstrucción de \check{h} para los datos experimentales AD200



Figura B.51: Funciones de flujo $f_{\rm b}$ para AD200



Figura B.52: Función de flujo $f_{\rm b}$ promediada de AD200



Figura B.53: Datos AD200.eps



Figura B.54: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$



Simulation of fb with Spline-fit method and 4 subintervals. AD

Figura B.55: \check{f} simulada



Figura B.56: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.58: Problema directo sobre los datos



Figura B.59: Datos AD200.eps



Figura B.60: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$



Simulation of fb with Spline-fit method and 4 subintervals. AD





Figura B.62: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$



Figura B.64: Problema directo sobre los datos







Figura B.66: \check{h} simulada $\phi_{0.eps} =$



Simulation of fb with Spline-fit method and 4 subintervals. AD

Figura B.67: \check{f} simulada



Figura B.68: Construcción parte cóncava $\phi_{0.eps} =$







Figura B.70: Problema directo sobre los datos

Bibliografía

- [1] Agricola, G., De re Metallica, translated from the firs Latin edition of 1556 by H.C. Hoover, Dover Publications, Inc., New York 1950.
- [2] Ardaillon, E., Les Mines du Laurion dans l'Antiquité, Paris 1897.
- [3] Aziz, A.A.A., de Kretser, R.G., Dixon, D.R. and Scales, P.J., 2000. The characterisation of slurry dewatering. Water Science and Technology 41(8), 9–16.
- [4] Ballou, D.P., 1970. Solutions to non-linear hyperbolic Cauchy problems without convexity conditions. Trans. Amer. Math. Soc., 152:441-460.
- [5] Barton, N.G., Li, C.-H. and Spencer, S.J., 1992. Control of a surface of discontinuity in continuous thickeners. Journal of the Australian Mathematical Society Series B 33, 269–289.
- [6] Becker, R., 1982. Espesamiento Continuo, Diseño y Simulación de Espesadores. Habilitación Profesional, Universidad de Concepción, Chile.
- [7] Benh, V.C. (1957) Settling behavior of waste suspensions, J. San. Engrg. Div. ASCE 83 No. SA 5, 1423-1-1423-20.
- [8] Bergström, L. (1992) Sedimentation offlocculated alumina suspensions: γ -ray measurements and comparison with model predictions, *J.Chem. Soc. Farad. Trans.* **88**, 3201-3211.
- [9] Berres, S., Bürger, R., Karlsen, K.H. and Tory, E.M., 2003. Strongly degenerate parabolic-hyperbolic systems modeling polydisperse sedimentation with compression. SIAM Journal on Applied Mathematics 64, 41–80.

- [10] F. Betancourt, R. Bürger, S. Diehl and C. Mejías, Advanced methods of flux identification for clarifier-thickener simulation models, *Minerals Engineering*, 63 (2014), 2–15.
- [11] Bowen, R., 1976. Theory of mixtures. In: Eringen, A.C. (Ed.), Continuum Physics, vol. 3 Academic Press, New York, pp. 1-127.
- [12] R. Bürger, A. Coronel, M. Sepúlveda, A semi-implicit monotone difference scheme for an initial-boundary value problem of a strongly degenerate parabolic equation modelling sedimentation-consolidation processes, *Math. Comp.* **75** (2006), 91–112.
- [13] R. Bürger, A. Coronel, M. Sepúlveda, Numerical solution of an inverse problem for a scalar conservation law modelling sedimentation. In: E. Tadmor, J.-G. Liu, and A.E. Tzavaras, editors, *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics and Applications*. Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, Vol. 67, Part 2, pp. 445–454. American Mathematical Society, Providence, RI, USA, 2009.
- [14] Bürger, R. and Diehl S., 2013. Convexity-preserving flux identification for scalar conservation laws modelling sedimentation. *Inverse Problems*, 29, paper 045008 (30pp).
- [15] Bürger, R., Diehl, S., Farås, S. and Nopens, I., 2012. On reliable and unreliable numerical methods for the simulation of secondary settling tanks in wastewater treatment. Computers & Chemical Engineering 41, 93–105.
- [16] Bürger, R., Diehl, S., Farås, S., Nopens, I. and Torfs, E., 2013. A consistent modelling methodology for secondary settling tanks: a reliable numerical method. Water Science and Technology, to appear.
- [17] Bürger, R., Diehl, S. and Nopens, I., 2011. A consistent modelling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment. Water Research 45, 2247–2260.
- [18] R. Bürger, S. Diehl, I. Nopens, A consistent modeling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment, *Water Res.* **45** (2011), 2247–2260.
- [19] R. Bürger, K.H. Karlsen, N.H. Risebro, J.D. Towers, Well-posedness in BV_t and convergence of a difference scheme for continuous sedimentation in ideal clarifier-thickener units, *Numerische Mathematik* **97** (2004), 25–65.
- [20] R. Bürger, K.H. Karlsen, H. Torres, J.D. Towers, Second-order schemes for continuous sedimentation in ideal clarifier-thickener units, *Numer. Math.* **116** (2010), 579–614.

- [21] R. Bürger, K.H. Karlsen, J.D. Towers, A model of continuous sedimentation of flocculated suspensions in clarifier-thickener units, *SIAM J. Appl. Math.* 65 (2005), 882–940.
- [22] Bürger, R., Karlsen, K.H. and Towers, J.D., 2005b. Mathematical model and numerical simulation of the dynamics of flocculated suspensions in clarifier-thickeners. Chemical Engineering Journal 111, 119–134.
- [23] Bürger, R., Karlsen, K.H., Torres, H., and Towers, J.D., 2010. Second-order schemes for conservation laws with discontinuous flux modelling clarifier-thickener units. Numerische Mathematik 116, 579–617.
- [24] Bürger, R. and Narváez, A., 2007. Steady-state, control, and capacity calculations for flocculated suspensions in clarifier-thickeners. International Journal of Mineral Processing 84, 274–298.
- [25] Bürger, R. and Wendland, W. L., 2001. Sedimentation and suspension flows: Historical perspective and some recent developmens. J. Engrg. Math., 41:101–116.
- [26] R. Bürger, W.L. Wendland and F. Concha, Model equations for gravitational sedimentation-consolidation processes, ZAMM Z. Angew. Math. Mech. 80 (2000), 79-92
- [27] Bustos, M.C., Concha, F., 1988. On the construction of global weak solutions in the Kynch theory of sedimentation. J. Differential Equations, 49:344–358.
- [28] Bustos, M.C., Concha, F., Bürger, R. and Tory, E.M., 1999. Sedimentation and Thickening, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.
- [29] Cacossa, K.F. and Vaccari, D.A., 1994. Calibration of a compressive gravity thickening model from a single batch settling curve. Water Science and Technology 30, 107–116.
- [30] Chancelier, J.P., Cohen de Lara, M., and Pacard, F., 1994. Analysis of a conservation PDE with discontinuous flux: A model of settler. SIAM Journal on Applied Mathematics 54, 954–995.
- [31] K.S Cheng, 1983. Constructing solutions of a single conservation law. J. Differential equations, 49:344–358.

- [32] Coe, H.S., Clevenger, G.H., 1916. Methods for determining the capacities of slime settling tanks. Transactions of the American Institute of Mining Engineers 55, 356– 385.
- [33] Comings, E.W., Pruiss, C.E. and De Bord, C. (1954) Continuous settling and thickening, *Ind. Engrg. Chem.* 46, 1164-1172.
- [34] Comings, E.W. (1940) Thickening calcium carbonate slurries, *Ind. Engrg. Chem.* **32**, 663-640.
- [35] F. Concha, R. Bürger, Thickening in the 20th century: a historical perspective, Minerals & Metallurgical Processing 20. (2003), 57–67. Numerical identification of parameters for a model of sedimentation processes. *Inverse Problems* 19, 951–972.
- [36] Coronel, A., James, F. and Sepúlveda, M., 2003. Numerical identification of parameters for a model of sedimentation processes. *Inverse Problems* 19, 951–972.
- [37] Davis, K.E., Russel, W.B. and Glantsching, W.J.(1991) Settling suspensions of colloidal silica: observations and X-ray measurements, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 87, 411-424.
- [38] David, R., Saucez, P., Vasel, J.-L. and Vande Wouwer, A., 2009a. Modeling and numerical simulation of secondary settlers: a method of lines strategy. Water Research 43, 319–330.
- [39] David, R., Vasel, J.-L. and Vande Wouwer, A., 2009b. Settler dynamic modeling and MATLAB simulation of the activated sludge process. Chemical Engineering Journal 146, 174–183.
- [40] De Clercq, J.,Devisscher, M., Boonen, I., Defravq, J and Vanrolleghem, P.A (2005) Analusis and simulation of the sludge profile dynamics in a full-scale clarifer, *J. Chen Technol. Biotechnol.* 80, 523-530.
- [41] De Clercq, J., jacobs, F., Kinnear, D.J., Nopes, I., Dierckx, R.A., Defrancq, J. and Vanrolleghem, P.A. (2005) Detiled spatio-temporal solids concentration profiling during batch settling of activated sludge using a radiotracer, *Wat. Res.* **39**, 2125-2135.
- [42] De Kretser, R.G., Usher, S.P., Scales, P.J., Boger, D.V. and Landman, K.A., 2001. Rapid filtration measurement of dewatering design and optimization parameters. AIChE Journal 47, 1758–1769.

- [43] S. Diehl, On scalar conservation laws with point source and discontinuous flux function, SIAM J. Math. Anal. 26 (1995), 1425–1451.
- [44] S. Diehl, A conservation law with point source and discontinuous flux function modelling continuous sedimentation, *SIAM J. Appl. Math.* **56** (1996), 388–419.
- [45] S. Diehl, Dynamic and steady-state behaviour of continuous sedimentation, *SIAM J. Appl. Math.* **57** (1997), 991–1018.
- [46] Diehl, S., 1988. Shock Behaviour of Sedimentation in Wasterwater Treatment. M. Sc. Thesis, University of Lund, Sweden.
- [47] Diehl, S., 2000. On boundary conditions and solutions for ideal clarifier-thickener units. Chemical Engineering Journal 80, 119–133.
- [48] Diehl, S., 2007. Estimation of the batch-settling flux function for an ideal suspension from only two experiments. Chemical Engineering Science 62, 4589–4601.
- [49] S. Diehl. The solids-flux theory ? confirmation and extension by using partial differential equations. Water Res. 42, 4976?4988, 2008.
- [50] Diehl, S., 2012. Shock-wave behaviour of sedimentation in wasterwater treatment: A rich problem. In: K. Aström et. al. (Eds.), Analysis fo Science, Engineering and Beyond, Springer-Verlag, Berlin, 175–214.
- [51] Diplas, P. and Papanicolaou, A.N., 1997. Batch analysis of slurries in zone settling regime. Journal of Evironmental Engineering 123, 659–667.
- [52] Dorr, J.V.N, 1915. The use of hydrometallurgical apparatus in chemical engineering. J Ind, Engrg. Chem., 7:119-130.
- [53] Einstein, A., 1911. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. Ann. d. Phys., 19:289-306
- [54] B. Engquist, S. Osher, One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws, *Math. Comp.* 36 (1981), 321–351.
- [55] Fit ch, E.B. (1966) Current theory and thickener design, *Ind. Engrg. Chem.* 58, 18-28.
- [56] Fit ch, E.B. (1971) Batch test predict thickener perfomance, Chem. Engrg. 78, 83-88.

- [57] Fit ch, E.B. (1975) Current theory and thickener design (1975)-Part 1, *Filtration & Separation*. 12, 355-359.
- [58] Fit ch, E.B. (1975) Current theory and thickener design (1975)-Part 2, Filtration & Separation. 12, 480-488, 553.
- [59] Fit ch, E.B. (1975) Current theory and thickener design (1975)-Part 3, *Filtration & Separation*. **12**, 636-638.
- [60] Fit ch, E.B. (1983) Kynch theory and compression zones, AIChE J. 29, 940-947.
- [61] Font, R. and Laveda, M.L., 2000. Semi-batch test of sedimentation. Application to design. Chemical Engineering Journal 80, 157–165.
- [62] Garrido, P., Bürger, R. and Concha, F., 2000. Settling velocities of particulate systems: 11. Comparison of the phenomenological sedimentation-consolidation model with published experimental results. International Journal of Mineral Processing 60, 213–227.
- [63] Garrido, P., Burgos, R., Concha, F. and Bürger, R., 2003. Software for the design and simulation of gravity thickeners. Minerals Engineering 16, 85–92.
- [64] S.K. Godunov, Finite difference methods for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluid dynamics, *Mat. Sb.* **47** (1959), 271–295. (in Russian).
- [65] Grassia, P., Usher, S.P. and Scales, P.J., 2008. A simplified parameter extraction technique using batch settling data to estimate suspension material properties in dewatering applications. Chemical Engineering Science 63, 1971–1986.
- [66] Grassia, P., Usher, S.P. and Scales, P.J., 2011. Closed-form solutions for batch settling height from model settling flux functions. Chemical Engineering Science 66, 964–972.
- [67] Grassmann, P. and Straumann, R., 1963. Enstehen und Wandern von Unstetigkeiten der Feststoffkozentration in Suspensionen. Chem.-Ing.-Techn., 35:477-482.
- [68] Godunov, S. K. (1959), ^A Difference Scheme for Numerical Solution of Discontinuous Solution of Hydrodynamic Equations", Math. Sbornik, 47, 271?306, translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226, 1969.
- [69] Hassett, N.J., Design and operation of continuous thickeners, *Ind. Chemist***34**, 116-120, 169-172, 489-494 (1958).

- [70] Hassett, N.J., Mechanism of thickening and thickener design, *Trans. Inst. Min. Metall.***75**, (1965).
- [71] Hassett, N.J., Thickening, theory and practice, Min. Sci.1, 24-40 (1968).
- [72] Hazen, A., On sedimentation, Trans. ASCE53, 45-71 (1904).
- [73] Hawksley, P.G.W, 1951, The effect of concentration on th settling of suspensions and flow through porus media. In: Some Aspects of Fluid Dlow, E. Arnold & Co., London pp. 114-135.
- [74] H. Holden, N.H. Risebro, *Front Tracking for Conservation Laws*, second corrected printing. Springer-Verlag, New York, 2007.
- [75] E. Iritani, T. Hashimoto, N. Katagiri, Gravity consolidation-sedimentation behaviors of concentrated TiO₂ suspensions, *Chem. Eng. Sci.* 64 (2009), 4414–4423.
- [76] Karamisheva, R.D. and Islam, M.A., 2005. Development of a new model for batch sedimentation and application to secondary settling tanks design. *Water Environment Research* 77, 3066–3073.
- [77] G.J. Kynch, A theory of sedimentation, Trans. Farad. Soc. 48 (1952). 166–176.
- [78] Lester, D.R., 2002. Colloidal Suspension Dewatering Analysis. Ph.D. thesis, Department of Chemical Engineering, University of Melbourne.
- [79] Lester, D.R., Usher, S.P. and Scales, P.J., 2005. Estimation of the hindered settling function $R(\phi)$ from batch-settling tests. AIChE Journal 51, 1158–1168.
- [80] Lev, O., Rubin, E. and Sheintuch, M., 1986. Steady state analysis of a continuous clarifier-thickener system, AIChE Journal 32, 1516–1525.
- [81] R.J. LeVeque, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Second Ed., Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.
- [82] Leveque, Randy J. (2002), "Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems", Cambridge University Press.
- [83] Liu, T.P., 1978, Invariants and asymptotic behavior of solutions of a conservatoin law. Proc. Amer. Math. Soc. 71:227–231

- [84] Y. Long, T. Dabros, H. Hamza, Stability and settling characteristics of solvent-diluted bitumen emulsions, *Fuel* (2002) 81, 1945–1952.
- [85] Mishler, R.T., Settling slimes at the Tigre Mill, Eng. Mining J.94, 643-646 (1912).
- [86] Nocoń, W., 2006. Mathematical modelling of distributed feed in continuous sedimentation. Simulation Modelling Practice and Theory 14, 493–505.
- [87] Nopens, I., (2005) Modelling the activated sludge flocculation process: a population balance approach. *PhD. Thesis.* Faculty of Bioscience Engineering. Ghent University. pp. 293.
- [88] Papanicolaou, A.N. and Diplas, P., Numerical solution of non-linear model for selfweight solids settlement, *Appl. Math. Modelling* 23, 345-362.
- [89] Papanicolaou, A.N. and Maxwell, A.R. (2006) Methodological considerations for studying self-weight fluidization in a sedimentation column, *Int. J. Mineral Process.* 78, 140-152.
- [90] Petty, C.A., Continuous sedimentation of a suspension with a nonconvex-flux law, *Chem. Eng. Sci.***30**, 1451-1458 (1975).
- [91] Richardson, J.F. and Zaki, W.N., 1954. Sedimentation and fluidization: part I. Transactions of the Institution of Chemical Engineers (London) 32, 35–53.
- [92] Scott, K.J., Theory of thickening: factors affecting settling rate of solids in flocculated pulps, *Trans. Inst. Min. Met.***77**, 85-97 (1968a).
- [93] Shannon, P.T., Dehaas, R.D., Stroupe, E.P. and Tory, E.M. (1964) Batch and continuous thickening, *I&EC Fund.* 3, 250-260.
- [94] Shannon, P.T. and Tory, E.M. (1965) Settling of slurries, Ind. Engrg. Chem. 57, 18-25.
- [95] Steinour, H.H., 1944, Nonflocculated suspensions of uniform spheres. Ing. Engrg. Chem., 26:618-624.
- [96] Stewart, R.F. and Roberts, E.J., The sedimentation of fine particles in liquids. A survey of theory and practice, *Trans. Inst. Chem. Engrg.* **11**, 137 (1933).
- [97] Stokes, G.G., On the effect of the internal friction on the motion pendulums.*Trans. Cambridge Phil. Soc.***9**, No.2, 8-106 (1851).

- [98] A.-E. Stricker, I. Takács, A. Marquot, Hindered and compression settling: parameter measurement and modelling, *Wat. Sci. Tech.* **56** (12) (2007), 101–110.
- [99] Takács, I., Patry, G.G., Nolasco, D., 1991. A dynamic model of the clarificationthickening process. Water Research 25, 1263–1271.
- [100] Talmage, W.P., Fitch, E.B., 1955. Determining thickener unit areas. Industrial and Engineering Chemistry 47, 38–41.
- [101] Tchobanoglous, G., Burton, F., Stensel, H., 2003. Wastewater Engineering: Treatment and reuse, 4th Edition. Metcalf and Eddy. McGraw - Hill, New York, USA
- [102] Tiller, F.M. (1981) Revision of Kynch sedimentation theory, AIChE J. 27, 823-829.
- [103] Tory, E.M., Batch and continuous thickening of slurries, PhD thesis, Purdue University, West Lafayette, Indiana, USA, 1961.
- [104] Tory, E.M. and Shannon, P.T. (1965) Reappraisal of the concept of settling in compression, *Ind. Engrg. Chem. Fund.* 4, 194-204.
- [105] Usher, S.P., de Kretser, R.G, and Scales, P.J., 2001. Validation of a new filtration technique for dewaterability characterization. AIChE Journal 47, 1561–1570.
- [106] Vand, V., 1948. Viscosity of solutions and suspensions. I. Theory. J. Phys. Chem., 52:277-299.
- [107] P.A. Vanrolleghem, B. de Clercq, J. de Clercq, M. Devisscher, D.J. Kinnear, I. Nopens, New measurement techniques for secondary settlers: a review, *Water Sci. Tech.* 53 (4–5) (2006), 419–429.
- [108] Wallis, G.B., 1962. A simplified one-dimensional representation of two-component vertical flow and its application to batch sedimentation. In: Proc. of the Symposium on the Interaction between Fluids and particles, London, June 20-22, 1962. Institution of Chemical Engineers, London, 9-16, 1962.
- [109] water.org. Consultado el 8 de marzo de 2015.
- [110] Wilhelm, J.H., Naide, Y., 1981. Sizing and operating continuous thickeners. Mining Engineering 33, 1710–1718

- [111] Wills, B.A. and Napier-Munn, T. (eds.), 2006. Wills' Mineral Processing Technology. Seventh Edition. Butterworth-Heinemann/Elsevier, Oxford, UK.
- [112] Wilson, A.J., 1994. The Living Rock. Woodhead Publishing, Cambridge, UK.
- [113] World Health Organisation, Water Sanitation and Health (WSH), (2014) http://www.who.int/water_sanitation_health/publications/ facts2004/es/. Consultado 8 de mazo de 2015.
- [114] Work, L.J. and Kohler, A.S., Sedimentation of suspensions, *Ind. Engrg. Chem.***32**, 1329-1334 (1940).
- [115] C.-H. Wu, J.-M. Chern, Experiment and simulation of sludge batch settling curve: a wave approach, *Ind. Eng. Chem. Res.* **45** (2006), 2026–2031.
- [116] Yoshioka, N., Hotta, Y., Tanaka, S., Naito, S. and Tsugami, S., Continuous thickening of homogeneous flocculated slurries, *Chem. Engrg. Japan* 21, 66-75 (1957).