



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

**UN CRITERIO PARA LA ELECCIÓN DE LA
FUNCIÓN DE FLUJO A PARTIR DE ENSAYOS DE
SEDIMENTACIÓN SÓLIDO-LÍQUIDO CON
APLICACIÓN A PULPAS DE RELAVE DE LA
MINERÍA Y LODOS ACTIVADOS EN PTAS**

POR
JAIME HEINRICH LUCKMANN CARRILLO

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la
Universidad de Concepcion para optar al título profesional de
Ingeniero Civil Matemático

Profesor Guía: Camilo Mejías Neira

Diciembre 2023
Concepción, Chile

© 2024 Jaime Heinrich Luckmann Carrillo
Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines
académicos, por cualquier medio o procedimiento,
incluyendo la cita bibliográfica del documento.

**UN CRITERIO PARA LA ELECCIÓN DE LA FUNCIÓN DE
FLUJO A PARTIR DE ENSAYOS DE SEDIMENTACIÓN
SÓLIDO-LÍQUIDO CON APLICACIÓN A PULPAS DE
RELAVE DE LA MINERÍA Y LODOS ACTIVADOS EN PTAS**

Jaime Luckmann Carrillo

COMISIÓN EVALUADORA

- ◇ Dr. Camilo Mejías [Profesor Guía]
Hibring.
- ◇ Dr. Raimund Bürger
Departamento de Ingeniería Matemática y CI²MA, Universidad de Concepción.
- ◇ Dr. Ricardo Jeldres
Departamento de Ingeniería Química y Procesos Minerales (DIQUIMIN),
Universidad de Antofagasta.
- ◇ Dr. Luis Miguel Villada Osorio
Departamento de Matemática, Universidad del Bío Bío.

FECHA DE LA DEFENSA: 21 de Marzo del 2024

A mi Tovejita ♡

Agradecimientos

La culminación de esta memoria marca el final de un viaje que ha sido tanto desafiante como gratificante. Este recorrido se define por el crecimiento personal y académico que ha representado. En este contexto, deseo expresar mi profundo agradecimiento a aquellos que han dejado una marca indeleble en este camino.

Deseo expresar mi más sincero agradecimiento a mis padres, cuya presencia y respaldo han sido fundamentales a lo largo de mi trayectoria universitaria. A mi madre, por su incansable labor en sus gestos cotidianos de apoyo y su disposición para brindarme consuelo en los momentos más difíciles. A mi padre, por su prontitud para venir en mi ayuda en cada situación que lo requería, y por inculcarme la importancia del esfuerzo y la valentía.

Le quiero expresar mi profundo agradecimiento a Lady, quien fue mi amor y mi mayor compañía en este proceso. Su constante disposición para escucharme y ayudarme a dar forma a mis ideas ha sido de un valor incalculable. Agradezco su paciencia y dedicación para garantizar la coherencia y claridad en mis escritos, así como sus abrazos reconfortantes en los momentos de mayor desafío. Su presencia fue fundamental para mantenerme firme en este camino, y valoro enormemente su amor, su amistad y su ayuda.

Mi viaje comenzó con mi primera incursión profesional en la empresa Hibring, un capítulo crucial en esta travesía. Agradezco sinceramente a Camilo Mejías, CEO de la empresa y mi profesor guía, por brindarme la oportunidad de integrar el aprendizaje práctico con la investigación académica. Reconozco las lecciones trascendentales que obtuve de nuestras interacciones, las cuales, aunque desafiantes en ocasiones, han contribuido significativamente a mi crecimiento tanto personal como laboral. Mis interacciones con él me han enseñado que el éxito no sólo está ligado al conocimiento adquirido, sino también a la perspectiva que se tenga y a las conexiones humanas que se establezcan. Valoraré siempre las experiencias vividas en su empresa como momentos de gran aprendizaje y crecimiento.

Durante mi experiencia en el equipo de taller, encontré mucho más que compañeros de trabajo: hallé un cálido hogar profesional. Desde el primer día, Joaquín demostró un compromiso inquebrantable al compartir su conocimiento. Más allá de su rol, se convirtió en un confidente y guía en mi trayectoria, reconociendo mi potencial incluso en mis errores más tempranos. Su apoyo constante me permitió encontrar mi voz en el equipo y sentirme parte fundamental de nuestros logros.

También conté con la invaluable colaboración de Lukas, Julio e Iván. Juntos formamos un equipo dinámico que enfrentaba cada desafío con entusiasmo y determinación. En nuestras sesiones de trabajo, aprendí a valorar la importancia de la colaboración y el debate constructivo, no solo para resolver problemas laborales, sino también como una filosofía de vida que adopté gracias a su ejemplo.

Además, quiero expresar mi gratitud a Guillermo, Víctor, Roberto, Javiera, Emilio, Elías, Julian, Paula, Javier, así como a todos los demás ex colegas con los que tuve el placer de trabajar. Haber compartido este periodo con ustedes ha sido de gran valor. Cada uno de ustedes dejó una impresión perdurable en mi vida profesional y personal, y valoro profundamente su apoyo, enseñanzas y camaradería. Juntos compartimos momentos de alegría, risas y camaradería, y les agradezco sinceramente por haber sido parte de este importante capítulo en mi vida. Su impacto ha sido fundamental para mi crecimiento y desarrollo durante esta etapa.

Quiero agradecer también a algunos de mis compañeros de carrera. A Milene, con quien disfruté mucho haber trabajado en la oficina, pero sobre todo quiero agradecerle por haberme escuchado y alentado durante todo el último periodo de mi tesis. A Lucas, por reunirse conmigo para resolver algunas dudas y ayudarme a completar mi marco teórico, su ayuda fue de gran valor.

Quiero expresar mi agradecimiento a mis dos jefes de carrera que fueron parte fundamental de este proceso. A la profesora Mónica Selva, por orientarme al inicio de este periodo, y al profesor Dominique Spehner, por guiarme hasta su finalización. Les agradezco sinceramente por tomarse el tiempo de escucharme y aconsejarme con gran empatía.

Agradezco profundamente a mi familia: mis tíos, primos, a mi madrina y mis dos abuelitas. Su constante apoyo y palabras de ánimo fueron fundamentales en mi trayectoria académica. Cada gesto de respaldo y cada oración dedicada a mi éxito significaron mucho para mí. Su presencia en mi vida ha sido un recordatorio constante del valor del amor y el apoyo familiar.

Mi profundo agradecimiento a Jonathan, mi psicólogo. Su apoyo fue fundamental para lograr terminar este trabajo, y también en mi crecimiento personal. Cada sesión con él contribuyó enormemente a mi bienestar y desarrollo. Gracias por ayudarme a encontrar seguridad en mi mismo y en mis decisiones.

En el tramo final de mi tesis, mientras aguardaba la fecha para mi defensa, deseo expresar mi sincero agradecimiento a todos los salseros y bachateros de Química con quienes compartí. Su compañía fue un gran respaldo durante aquellos meses de espera. El día que fui aprobado, celebrar bailando con ustedes se convirtió en un recuerdo que perdurará para siempre.

Finalmente, quisiera expresar mi más sincero agradecimiento a todos los que asistieron a la celebración que organicé la semana posterior a mi defensa. Su presencia y participación en cada una de las actividades no solo hicieron que el evento fuera especial, sino que también reafirmaron la importancia de este hito en mi vida. También quiero reconocer a aquellos que, a pesar de sus esfuerzos, no pudieron estar presentes. A todos ustedes, gracias de corazón.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Recuperación de agua en la minería	2
1.2. Recuperación de agua en el tratamiento de aguas servidas	4
1.3. Teoría de la sedimentación	7
1.4. Teoría del espesamiento	9
1.5. Función de densidad de flujo de sólidos	10
1.6. Objetivo de la memoria	13
1.7. Avance de contenidos	14
2. Leyes de conservación	15
2.1. Aspectos fundamentales	15
2.2. El método de las características	17
2.3. Ondas de choque y rarefacción	20
2.4. Condiciones de entropía	23
2.5. Métodos de volúmenes finitos	23
3. Selector de funciones de flujo	26
3.1. Preprocesamiento	29

3.2. Cálculo de modelos de funciones de flujo	30
3.3. Simulaciones de curvas de sedimentación	34
3.4. Cálculo de errores	39
3.5. Síntesis del Proceso de Selección	40
4. Aplicación del Selector	42
4.1. Conjuntos de datos de prueba	42
4.2. Resultados	48
4.3. Sensibilidad de los resultados	82
4.4. Análisis de los resultados	84
5. Conclusiones	87

CAPÍTULO 1

Introducción

El acceso a agua potable, saneamiento e higiene es la necesidad humana más básica para la salud y el bienestar. Según la Organización de las Naciones Unidas (ONU), miles de millones de personas carecerán de este recurso en 2030 a menos que se cuadruplicuen los avances. Esto se debe a la creciente demanda de agua debido al rápido crecimiento de la población, la urbanización y las necesidades de agua en sectores como la agricultura, la industria y la energía (ONU, [2022](#)).

La importancia del agua hace necesario tomar medidas enfocadas en generar y promover su consumo responsable. Estas medidas incluyen aprovechar al máximo el recurso disponible y buscar dar un mayor uso y reúso enfocado en una economía circular, así como realizar procesos para verter efluentes de la mejor calidad posible para su reutilización en otras actividades (Ramírez et al., [2020](#)).

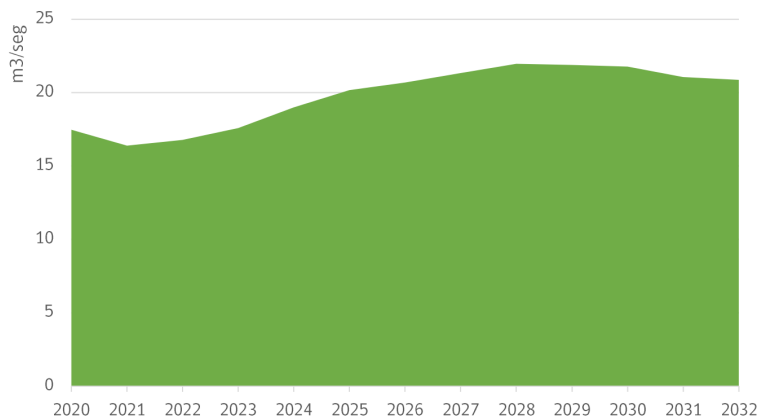


Figura 1.1: Proyección de demanda de agua en la minería del cobre 2021-2032 en Chile. (Comisión Chilena del Cobre, 2021).

1.1. Recuperación de agua en la minería

Las empresas dedicadas a la extracción de cobre, oro, plata y otros minerales requieren de agua para la elaboración de sus procesos, con una demanda de aproximadamente $13.61 \text{ m}^3/\text{s}$ en el año 2020 (Concha et al., 2020).

En Chile, la demanda de agua en la industria minera ha aumentado en los últimos años y se espera que siga creciendo en las próximas décadas (Concha et al., 2020). Los resultados obtenidos por COCHILCO[†] en la proyección de producción esperada del cobre para el periodo 2021-2032 muestran que, en comparación con la producción real de 2020, existe un incremento de 21.15 % hacia el cierre del periodo analizado. Para sostener este aumento de producción, se proyecta una demanda de agua de $20.9 \text{ m}^3/\text{s}$ para la próxima década (Figura 1.1) (Montes y Ramirez, 2021).

Para satisfacer esta demanda de agua y minimizar el impacto ambiental, es fundamental optimizar el uso del agua en el procesamiento de minerales sulfurados de cobre. Este proceso incluye varias etapas: en primer lugar, se extraen rocas desde una mina y se transportan al sector de chancado donde se realizan procesos de molienda para reducir el tamaño de las partículas de mena^{††}. Luego se separan las partículas grandes de las pequeñas mediante una clasificación selectiva (Betancourt et al., 2020).

[†]Comisión Chilena del Cobre

^{††}Mena: mineral de valor económico que constituye una pequeña parte del volumen total de la roca del yacimiento.

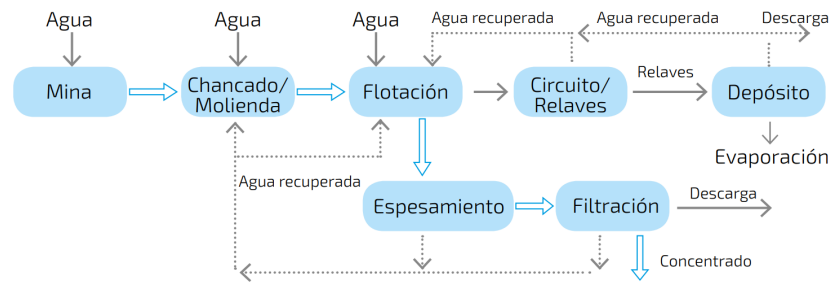


Figura 1.2: Diagrama del procesamiento de minerales de sulfuro de cobre, incluyendo el uso y recuperación de agua en cada etapa (Yepsen et al., 2021).

Posteriormente, se sumerge el mineral molido en celdas con reactivos para que el cobre emerja dentro de burbujas en un proceso llamado flotación, el cual requiere un contenido de agua de alrededor del 70% (Concha et al., 2020). Una vez separado el cobre del material sin valor económico, se intenta recuperar la mayor cantidad posible de agua de las colas[†] de flotación a través del espesamiento y la filtración. El agua recuperada del espesador se recicla en el proceso y el sedimento se envía al tranque de relaves, donde sigue sedimentando y el agua sobrenadante se recupera y recicla. El diagrama de la [Figura 1.2](#) resume el proceso e incluye el uso y recuperación de agua en cada etapa. El espesamiento es un proceso de separación sólido-líquido en el que las partículas de una pulpa decantan por acción de la gravedad (Concha, 2014). Se lleva a cabo en grandes depósitos cilíndricos llamados espesadores (ver [Figura 1.3](#)), donde se recupera el agua en la zona superior y se descarga el sedimento espesado en la zona inferior. Este último se desecha en tranques de relaves con un 30% de humedad en el mejor de los casos, lo que significa que se desperdicia una gran cantidad de agua. La acumulación de relaves en estos depósitos puede causar contaminación ambiental al filtrar agua con minerales y desechos a través del suelo hasta las aguas de napas subterráneas (Valencia et al., 2017). Para minimizar el desperdicio de agua y el impacto ambiental, es necesario administrar el proceso de espesamiento de manera eficiente y tratar de reutilizar tanta agua como sea posible.

[†]Cola o relave: Corriente pobre en mineral valioso, conformada principalmente por minerales de ganga.

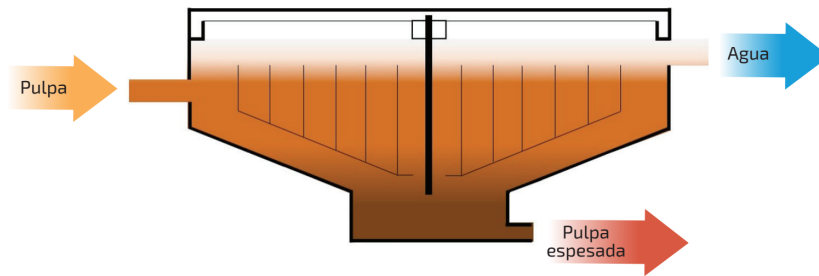


Figura 1.3: Esquema de un espesador mineral (Yepsen et al., 2021).

1.2. Recuperación de agua en el tratamiento de aguas servidas

El tratamiento de aguas servidas es un proceso fundamental para mantener la calidad del agua y el medio ambiente saludables. Las aguas residuales son el resultado del uso del agua en diversas aplicaciones y contienen componentes que las hacen inadecuadas para la mayoría de los usos sin tratamiento. Por lo tanto, es necesario eliminarlas de sus fuentes de generación y tratarlas para proteger la salud pública y el medio ambiente. Los sistemas de tratamiento de aguas servidas utilizan diversas técnicas y tecnologías para eliminar estos contaminantes y hacer que el agua sea segura para su reutilización o dispersión en el medio ambiente. Además, la recuperación de agua es un proceso cada vez más importante en un mundo en el que el agua se convierte progresivamente en un recurso más escaso y valioso (Casas et al., 2022; Metcalf et al., 2014).

Las aguas servidas constituyen la mezcla de los desechos líquidos provenientes de las aguas domésticas, industriales y aguas de lluvia, las que son juntadas y recogidas a través del sistema de alcantarillado (Báez, 2004). El proceso de tratamiento de estas aguas se lleva a cabo en plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS). Su función es reducir la presencia de contaminantes hasta concentraciones que no provoquen alteraciones al medio ambiente. Operan en una serie de etapas fisicoquímicas y biológicas orientadas principalmente a la eliminación de materia orgánica (Casas et al., 2022). Estas etapas son:

- a) **Tratamiento primario:** consiste en la eliminación de sólidos en suspensión del

agua mediante técnicas principalmente físicas, como la sedimentación, la flotación, la coagulación, la floculación y la filtración. Los procesos primarios remueven hasta un 70% de los sólidos suspendidos, siendo común un valor inferior a 60% (Araya et al., 2014).

- b) **Tratamiento secundario:** es un proceso de eliminación de compuestos orgánicos biodegradables y sólidos en suspensión del agua servida, a través de procesos biológicos que transforman estos compuestos en gas y biomasa (Casas et al., 2022). También puede incluir la desinfección del agua (Metcalf et al., 2014). El objetivo del tratamiento secundario es remover la materia orgánica disuelta y coloidal[†] para lograr una mayor pureza del agua antes de su descarga o reutilización.
- c) **Tratamiento terciario:** es una etapa de procesamiento de aguas residuales que se enfoca en la eliminación de contaminantes específicos y en mejorar aún más la calidad microbiana de los procesos de tratamiento secundario. Este proceso incluye la eliminación de sólidos suspendidos residuales mediante filtros de medio granular, filtros de tela o microfiltros, así como la desinfección para eliminar organismos patógenos (Metcalf et al., 2014). Además, el tratamiento terciario también se utiliza para eliminar nutrientes como el nitrógeno y el fósforo y otros compuestos solubles (Casas et al., 2022; Araya et al., 2014). Es comúnmente utilizado cuando el agua tratada se va a reutilizar o reciclar para fines como el riego de cultivos alimentarios, actividades recreativas o el suministro de agua potable (Henze et al., 2008).

El proceso de lodos activados es una técnica utilizada en el tratamiento secundario de aguas servidas, que consiste en la conversión de componentes orgánicos en gases y tejido celular a través de la acción de microorganismos aerobios mantenidos en suspensión. Los microorganismos forman partículas floculantes que se separan del efluente y luego se desechan o se devuelven al proceso de aireación (Metcalf et al., 2014). Este

[†]Tipo de materia orgánica presente en el agua que se encuentra en forma de partículas muy pequeñas que se suspenden en el líquido. Estas partículas tienen tamaños que van desde algunos nanómetros hasta algunos micrómetros, lo que las hace muy difíciles de eliminar mediante procesos físicos como la filtración o la sedimentación.

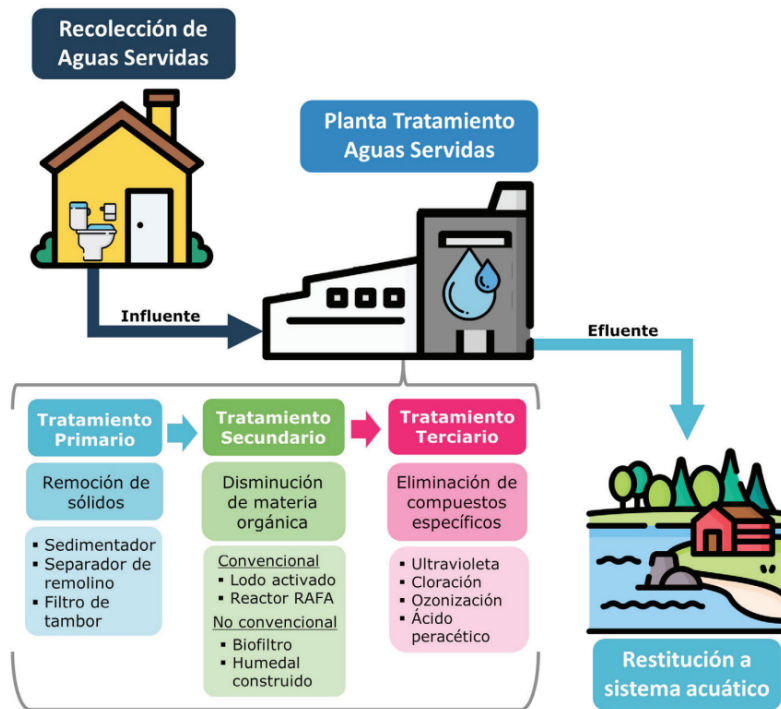


Figura 1.4: Principales tratamientos involucrados en las Plantas de tratamiento de aguas servidas. (Casas et al., 2022; Araya et al., 2014).

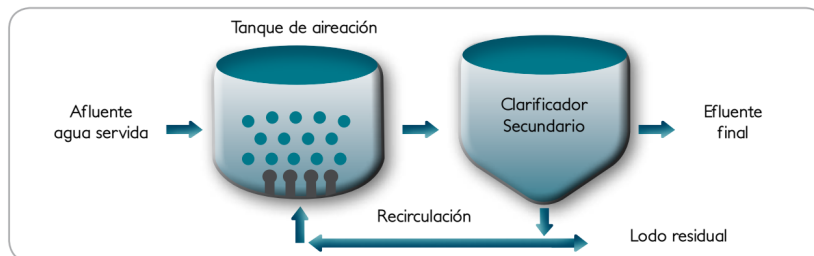


Figura 1.5: Esquema simplificado de un sistema de lodos activados. (Araya et al., 2014).

proceso se divide en dos etapas: una bioquímica y otra física. En el tanque de aireación, los lodos activados eliminan el carbono orgánico, el amonio y el fosfato de las aguas residuales. Luego, las partículas floculantes se separan del agua tratada por la gravedad en el tanque de sedimentación (Henze et al., 2008). El proceso de lodos activados es económico y de bajo consumo energético y es ampliamente utilizado en Chile, representando el 57,8% de las plantas de tratamiento de aguas servidas del país (Casas et al., 2022).

Después de la etapa bioquímica del proceso de lodos activados en el tanque de aireación se utilizan los tanques de sedimentación secundarios para separar los sólidos.

dos en suspensión presentes en el agua tratada. Estos tanques cumplen tres funciones principales: espesamiento, clarificación y almacenamiento de fangos. El espesamiento consiste en la producción de un flujo continuo de fangos espesados por parte del tanque de sedimentación secundaria, los cuales son devueltos al reactor biológico. La clarificación tiene como objetivo producir un efluente final clarificado. El almacenamiento de fangos se refiere a la capacidad del tanque de almacenar los fangos durante los picos de caudal (Nopens, 2005). La floculación es un proceso importante en la operación de un tanque de sedimentación secundaria, ya que afecta tanto la capacidad de sedimentación como la de espesamiento de los fangos. La floculación involucra la formación de agregados o flóculos a partir de partículas finamente divididas y de partículas químicamente desestabilizadas, lo que permite que estas partículas se eliminen fácilmente por decantación o filtración (Metcalf et al., 2014).

Es esencial gestionar adecuadamente los procesos en los tanques de sedimentación secundaria para prevenir problemas en el sistema de lodos activados. Una falla en el espesamiento, clarificación o almacenamiento de fangos puede resultar en un efluente de mala calidad y una pérdida excesiva de sólidos en suspensión que afectaría al comportamiento del proceso biológico y a la capacidad de tratamiento de la planta. Además, una mala gestión de la floculación puede afectar tanto la capacidad de sedimentación como la de espesamiento de los fangos, lo que puede llevar a una mala calidad del efluente y un rendimiento ineficiente de la planta (Nopens, 2005).

1.3. Teoría de la sedimentación

Los espesadores son equipos esenciales en la minería y el tratamiento de aguas servidas, ya que permiten aprovechar al máximo el uso y reúso del agua y reducir el impacto ambiental. Se ha demostrado en las secciones anteriores la importancia de estos equipos en la separación sólido-líquido. Sin embargo, es crucial gestionar adecuadamente el proceso de sedimentación en los espesadores para obtener resultados eficientes. Para esto, se han realizado grandes esfuerzos para modelar y optimizar el comportamiento de estos procesos en matemáticas aplicadas, control e ingeniería de

agua (Diehl y Farås, 2013).

Existen dos perspectivas en que se estudian los procesos de sedimentación: un enfoque discreto, en el que las leyes de la mecánica se aplican a partículas individuales del sistema y, un enfoque continuo, en el que se establecen procesos dinámicos entre las partículas. En este trabajo se estudia la sedimentación de suspensiones tratadas como medios continuos.

El primero en proponer un modelo de sedimentación por lotes para materiales incompresibles fue Kynch, en su célebre artículo «A theory of sedimentation» (Kynch, 1952). Para simplificar el problema, Kynch supuso que la velocidad de sedimentación obstaculizada está determinada únicamente por la concentración local de sólidos (Li y Stenstrom, 2014). Esta teoría cinemática se fundamentó en un conjunto de hipótesis ideales (Bustos et al., 1999) y fue basada en la propagación de ondas de sedimentación mediante la ecuación de continuidad de la fase sólida (Concha y Bürger, 2002)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f_{bk}}{\partial z} = 0, \quad 0 < z < B, \quad t > 0, \quad (1.1)$$

donde la incógnita corresponde a la concentración local de sólidos ϕ en función del tiempo t y del altura z , $f_{bk} = f_{bk}(\phi)$ es la función de densidad de flujo de sólidos y B corresponde a la altura inicial de sedimentación en un ensayo de sedimentación por lotes.

La validez de la teoría de Kynch fue demostrada mediante experimentos con esferas de vidrio en una serie de artículos (Shannon et al., 1963; Shannon et al., 1964; Tory y Shannon, 1965; Shannon y Tory, 1965; Shannon y Tory, 1966). Sin embargo, a pesar de que logra predecir con exactitud la sedimentación para suspensiones de partículas rígidas y de igual tamaño, no es así para suspensiones con materiales compresibles, irregulares y/o floculados (Yoshioka, 1957; Hassett, 1964; Shannon et al., 1963; Scott, 1968a; Scott, 1968b). En un esfuerzo por abordar estos casos, se intentó ampliar la teoría para incluir efectos compresivos (Fitch, 1983; Font, 1988), sin embargo, esto planteó varios problemas que no pudieron ser resueltos dentro del marco de la teoría original y se requirió un enfoque diferente. Como primer paso, se formalizó ma-

temáticamente la teoría de Kynch para suspensiones ideales, utilizando el método de las características (Bustos, 1984; Bustos y Concha, 1988a; Bustos y Concha, 1988b; Concha y Bustos, 1991). A partir de esto surgió una nueva teoría conocida como la teoría del espesamiento.

1.4. Teoría del espesamiento

El espesamiento consiste en la superposición de dos fenómenos: la sedimentación y la consolidación. Durante la sedimentación, las partículas se van depositando en el fondo de un fluido debido a la colisión entre ellas atravesándolo por presión y fricción. Si el sedimento es incompresible, el proceso se detendrá, pero si es compresible, la presión ejercida por el peso del sedimento puede expulsar el agua de los poros, a este fenómeno se le conoce como consolidación (Concha, 2014). La teoría del espesamiento modela el proceso de un espesamiento por lotes de un material compresible como un problema de valor inicial y de contorno con las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial f_{\text{bk}}}{\partial z} = \frac{\partial^2 A(\phi)}{\partial z^2}, \quad 0 < z < B, \quad t > 0, \quad (1.2)$$

$$\phi(z, 0) = \phi_0, \quad 0 < z < B, \quad (1.3)$$

$$f_{\text{bk}}(\phi) + \left. \frac{\partial A(\phi)}{\partial z} \right|_{z=z_b} = 0, \quad z_b \in \{0, B\}, \quad (1.4)$$

donde $A = A(\phi)$ es la función de difusión que está dada por

$$A(\phi) := \int_0^\phi a(s) ds, \quad a(\phi) := \frac{f_{\text{bk}}(\phi) \sigma'_e(\phi)}{\Delta \rho g \phi}. \quad (1.5)$$

A su vez, $\Delta \rho$ es la diferencia de densidad de masa entre el sólido y el 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 $\sigma_e(\phi) \geq 0$ para todo ϕ , por lo tanto,

$$\sigma'_e(\phi) := \frac{d\sigma_e(\phi)}{d\phi} \begin{cases} = 0 & \text{si } \phi \leq \phi_c, \\ > 0 & \text{si } \phi > \phi_c, \end{cases} \quad (1.6)$$

donde ϕ_c es la concentración crítica o punto gel a partir de la cual las partículas entran en contacto físico.

La ecuación (1.2) es una ecuación hiperbólica de primer orden para $\phi \leq \phi_c$ y parabólica de segundo orden para $\phi > \phi_c$. La función de densidad de flujo de sólidos f_{bk} y el coeficiente de difusión $a = a(\phi)$ reflejan propiedades específicas del material bajo consideración. En el caso de materiales no compresibles, el término difusivo no está presente dado que $\sigma_e \equiv 0$, por lo cual la ecuación (1.2) se reduce a (1.1).

La función de densidad de flujo de sólidos f_{bk} es esencial ya que esta rige en gran medida la velocidad en que sedimentan las partículas de un material. La importancia de esto radica en que esta misma expresión puede ser utilizada para mejorar la toma de decisiones en tanques de sedimentación en la minería o el tratamiento de aguas servidas. De hecho, en materiales no compresibles, la forma de sedimentar depende únicamente de f_{bk} (Concha y Bustos, 1991), además de las condiciones iniciales de altura y concentración.

1.5. Función de densidad de flujo de sólidos

La función de densidad de flujo de sólidos, o simplemente función de flujo, es una medida de la cantidad de sólido que fluye a través de una cierta superficie en un momento dado. Está expresada en unidades de cantidad de sólido por unidad de tiempo y área. Se suele representar como f_{bk} en alusión a “batch kynch function”. Esta verifica las siguientes condiciones:

$$f_{bk}(0) = f_{bk}(\phi_{\text{máx}}) = 0, \quad (1.7)$$

$$f_{bk}(\phi) > 0, \quad 0 < \phi < \phi_{\text{máx}}, \quad (1.8)$$

$$f'_{bk}(0) > 0, \quad f'_{bk}(\phi_{\text{máx}}) < 0, \quad (1.9)$$

donde $\phi_{\text{máx}}$ representa la concentración máxima del material (Bürger et al., 2000).

La función de densidad de flujo f_{bk} depende funcionalmente de la velocidad

de sedimentación obstaculizada $v_{hs} = v_{hs}(\phi)$, que se refiere a la velocidad a la que los sólidos sedimentan cuando están presentes en una concentración por debajo de la concentración crítica. f_{bk} se calcula como

$$f_{bk}(\phi) = \phi v_{hs}(\phi). \quad (1.10)$$

Existen varios modelos para representar la función v_{hs} cuyos parámetros se estiman utilizando datos experimentales de laboratorio. La práctica más común para encontrar estos datos es realizar ensayos de sedimentación por lotes en cilindros graduados a distintas concentraciones iniciales, midiendo su interfaz sólido-líquido (Concha, 2014). En aplicaciones prácticas en la ingeniería destacan los modelos empíricos debido a su sencillez y practicidad (Li y Stenstrom, 2014). En la tabla 1 de Li y Stenstrom, 2014 se encuentran resumidos los modelos más utilizados en la literatura incluyendo modelos polinomiales, de potencia, exponenciales y con efectos de compresión (Steinour, 1944; Richardson y Zaki, 1954; Yoshioka, 1957; Michaels y Bolger, 1962; Scott, 1966; Shannon et al., 1963; Vesilind, 1968; Stenstrom, 1976; Vaerenbergh, 1980; Takács et al., 1991; Cho et al., 1993; Cacossa y Vaccari, 1994; Bürger et al., 2000; Kinnear, 2002).

La variedad de modelos disponibles para representar a v_{hs} ha llevado a distintos trabajos a compararlos y evaluar su desempeño. Por ejemplo:

- ◇ En Shannon et al., 1963 se utilizaron polinomios de grado entre 3 y 7 como modelos de velocidad de sedimentación. Su criterio de bondad de ajuste fue el error cuadrático medio normalizado y se utilizaron datos de sedimentaciones con perlas de vidrio rígidas. Concluyeron que los polinomios de grado 3 y 4 fueron los que mejor se ajustaron a los datos. El error cuadrático medio disminuyó ligeramente para polinomios de mayor orden, sin embargo las curvas de velocidad calculadas oscilaron alrededor de los puntos experimentales lo cual las hace modelos inviables.
- ◇ En Cho et al., 1993 fueron comparados seis modelos de velocidad con dos

parámetros. Su criterio de bondad de ajuste fue el coeficiente de determinación R^2 (R cuadrado). El ajuste fue hecho con datos de sedimentaciones de laboratorio con lodos arcillosos floculados con una solución de poliacrilamida. Concluyen que el modelo de potencia $v_{hs}(\phi) = k\phi^{-n}$, el modelo exponencial $v_{hs}(\phi) = k\exp(-n\phi)$ y el modelo propuesto por ellos $v_{hs}(\phi) = k\exp(-n\phi)/\phi$ tienen un buen ajuste a aquellos datos experimentales, siendo el último el mejor. El modelo con peor desempeño según esta métrica fue el de Richardson y Zaki, 1954 $v_{hs}(\phi) = k(1 - n\phi)^{4.65}$.

- ◇ En Guo et al., 2010 se realizaron simulaciones de un clarificador secundario con los modelos exponenciales de Vesilind, 1968, y Takács et al., 1991 y se discutieron sus resultados. Se concluyó que la solución obtenida por el modelo de Takacs es mejor. Se destaca que las pruebas de sedimentación por lotes y la tecnología de ajuste desempeña un papel importante en las simulaciones de sedimentación.
- ◇ En Li y Stenstrom, 2014 se ajustaron 9 modelos de velocidad a datos experimentales proporcionados por Grieves y Stenstrom, 1976. Los modelos fueron comparados gráficamente. Se mostró que algunos modelos lograron ajustarse bien en rangos de concentración media, pero presentaron desviaciones significativas en condiciones de concentraciones altas y diluidas. También, en concentraciones altas, es posible observar en la Figura 1.6 cómo algunas de estas funciones se ajustaron mejor a los datos experimentales que otras.
- ◇ En Torfs et al., 2017 se ajustaron cuatro modelos diferentes: dos exponenciales (Vesilind, 1968; Takács et al., 1991) y dos de potencia (Cole, 1968; Diehl, 2015). Se utilizó el Criterio de Información de Akaike (AIC) para evaluar la bondad de ajuste y complejidad de cada uno de los modelos (Burnham y Anderson, 2004). Valores menores de AIC determinan un mejor modelo. Para la comparación se utilizaron conjuntos de sedimentaciones de plantas de tratamiento de aguas servidas de Destelbergen, Bélgica (De Clercq et al., 2005) y Rosheim, Francia (Locatelli et al., 2015). Los resultados muestran que los modelos de po-

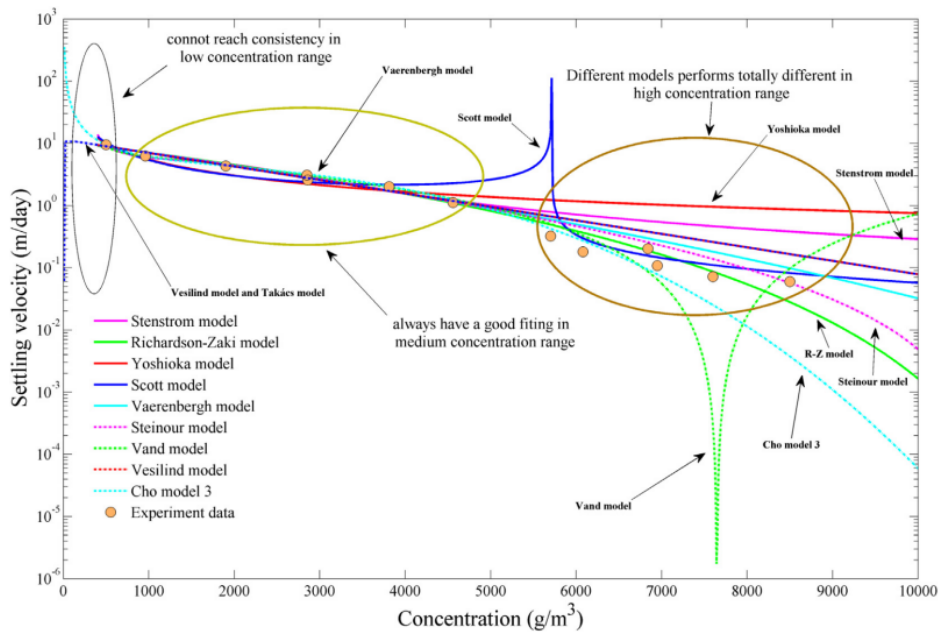


Figura 1.6: Ajuste de distintos modelos de velocidad de sedimentación con los datos recogidos de Grieves y Stenstrom, 1976 (Li y Stenstrom, 2014).

tencia parecen funcionar mejor con los datos de Locatelli et al., 2015, mientras que los datos de De Clercq et al., 2005 funcionan mejor con modelos de potencia. Sin embargo, los cuatro modelos muestran un buen ajuste a los datos y valores de AIC en rangos similares. Por lo tanto, se concluye que este criterio no es determinante para elegir un modelo óptimo.

Aunque existen numerosos criterios para evaluar el rendimiento de estos modelos, es importante tener en cuenta que todos ellos se enfocan en medir cuantitativa o cualitativamente el ajuste a los datos, pero no en evaluar su capacidad de predecir el proceso completo de la sedimentación (Shannon et al., 1963). Es por ello, que en el presente trabajo se pretende ofrecer un nuevo enfoque que sea capaz de determinar el modelo más adecuado con un criterio que evalúe esta capacidad de predicción con ensayos de sedimentación experimentales de distintos tipos de materiales.

1.6. Objetivo de la memoria

En esta memoria se plantea la creación de un procedimiento algorítmico que ajuste modelos de funciones de densidad de flujo a partir de un conjunto de ensayos de

sedimentación. Con estos modelos ajustados se busca realizar simulaciones de los ensayos originales para evaluar la capacidad de explicación de cada una de las funciones de flujo dadas a través de la teoría de la sedimentación.

Para ello se contará con una gran variedad de conjuntos de ensayos de sedimentación disponibles en la literatura sumado a datos proporcionados por la empresa [Hibring](#). Estos serán utilizados como base para el desarrollo del procedimiento algorítmico. Las simulaciones se realizarán mediante el método numérico descrito en la Metodología de Modelamiento Consistente de Bürger et al., 2013, y serán comparadas con las curvas sólido-líquido experimentales. Su diferencia será cuantificada con una métrica a determinar. El modelo óptimo será aquel que minimice esta métrica.

En definitiva, **el objetivo general de esta memoria es desarrollar un método para seleccionar el modelo de función de densidad de flujo más preciso para un conjunto de ensayos de sedimentación con una métrica que logre cuantificar la capacidad de explicación que esta aporta sobre el comportamiento de la sedimentación del material a través de la modelación numérica.**

1.7. Avance de contenidos

El capítulo 2 de este trabajo constituye el marco teórico de esta tesis. Se abordarán los principios fundamentales de las Leyes de Conservación, cuyo entendimiento resulta esencial para comprender las ecuaciones que gobiernan los procesos de sedimentación. En el Capítulo 3, se presentará en detalle un mecanismo compuesto por varias etapas. Este mecanismo se propone como solución al objetivo central de esta memoria y se desarrollará minuciosamente. El último capítulo será dedicado a la evaluación y análisis del Mecanismo propuesto. Se llevarán a cabo pruebas utilizando conjuntos de curvas de sedimentación de laboratorio y se discutirán los resultados obtenidos. Este capítulo culminará con una evaluación crítica de la solución propuesta y sus implicancias en el contexto de la investigación.

CAPÍTULO 2

Leyes de conservación

La teoría de la sedimentación y el espesamiento es un área fundamental en el estudio de procesos industriales y ambientales donde las leyes de conservación desempeñan un papel crucial. Este capítulo, apoyado en los trabajos de LeVeque, [1992](#); Knobel, [2000](#); LeVeque, [2002](#); Strauss, [2007](#) tiene como objetivo presentar los fundamentos teóricos de las leyes de conservación para el caso homogéneo y unidimensional, sentando los principios para una comprensión sólida de la teoría.

2.1. Aspectos fundamentales

Una ley de conservación es una ecuación que describe todas las formas en que la cantidad física Q de una magnitud específica puede cambiar. Esto es fundamental para el modelado matemático y se aplica a diversas cantidades como masa, energía, momento y población. En una dimensión espacial x , las leyes de conservación se expresan mediante la ecuación

$$u_t + f_x = 0, \tag{2.1}$$

donde $u = u(x, t)$ es la función de densidad o concentración de aquella cantidad Q y $f = f(x, t)$ es la función de flujo de u .

La ecuación (2.1) es una ecuación diferencial parcial con dos incógnitas: u y f . Para poder determinar una solución es necesario tener una ecuación adicional. Esta ecuación adicional, llamada ecuación constitutiva, a menudo se deriva de suposiciones basadas del proceso físico que se está modelando o en resultados experimentales. La ecuación constitutiva establece una relación entre el flujo f y la densidad u , generalmente en la forma $f = f(u)$. Haciendo esta suposición la ecuación (2.1) puede escribirse como

$$u_t + f'(u)u_x = 0. \quad (2.2)$$

Esta ecuación acompañada de una condición inicial constituye el problema con valor inicial

$$\begin{cases} u_t(x, t) + f'(u)u_x(x, t) = 0, & x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.3)$$

donde u_0 es una función dada que representa la distribución inicial de la cantidad conservada.

La formulación (2.3) es conocida como la formulación diferencial de una ley de conservación con valor inicial. Esta forma, en ocasiones, causa que este problema no tenga solución en el sentido clásico debido a las fuertes hipótesis de regularidad en u y sus derivadas; sin embargo existe una formulación integral que es consistente con la forma diferencial y que permite construir soluciones que puedan tener discontinuidades dando una noción de solución más flexible. Esta es la formulación débil y se expresa:

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} [u\phi_t + f(u)\phi_x] dxdt + \int_{\mathbb{R}} u_0(x)\phi(x, 0) dx = 0, \quad (2.4)$$

donde $\phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0, \infty))$, el espacio de funciones continuamente diferenciables con soporte compacto. En este sentido, una función u acotada en $\mathbb{R} \times [0, \infty)$ es llamada

solución débil del problema (2.3) si la ecuación (2.4) se cumple para toda función $\phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0, \infty])$.

Para analizar y resolver el problema de valor inicial en (2.3), se emplea un enfoque conocido como el *Método de las Características*. Este método transforma la ecuación diferencial parcial en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias a lo largo de curvas llamadas características. En la próxima sección se profundizará en este enfoque y se presentarán ejemplos que ilustran su aplicación.

2.2. El método de las características

Las características son curvas en el plano xt que transmiten el perfil inicial dado por $u(x, 0)$ hacia adelante en el tiempo. Estas son útiles para resolver problemas de leyes de conservación, como por ejemplo la ecuación de advección lineal con valor inicial:

$$\begin{cases} u_t(x, t) + cu_x(x, t) = 0, & x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.5)$$

donde c es una constante.

El método de las características utiliza curvas especiales en el plano xt a lo largo de las cuales la ecuación diferencial parcial $u_t + cu_x = 0$ se convierte en una ecuación diferencial ordinaria. Para ello se elige una curva paramétrica $(x(t), t)$ de forma conveniente. Por regla de la cadena se tiene que

$$\frac{d}{dt}u(x(t), t) = u_x(x(t), t) \frac{dx}{dt} + u_t(x(t), t). \quad (2.6)$$

Esto motiva a elegir

$$\frac{dx}{dt} = c \quad (2.7)$$

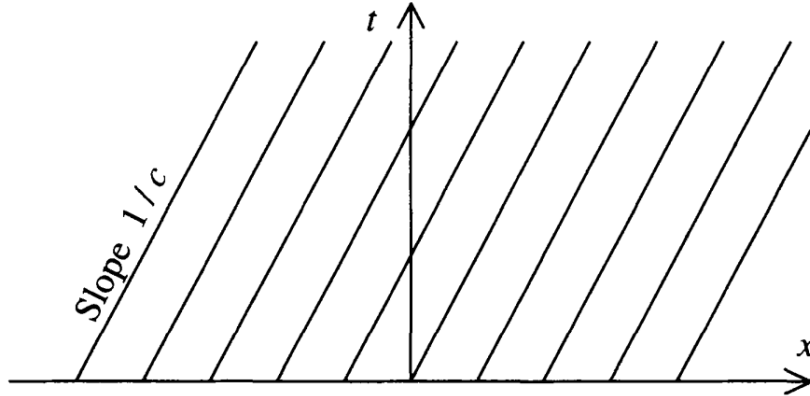


Figura 2.1: Características $x - ct = x_0$ de la ecuación de advección $u_t + cu_x = 0$ (Knobel, 2000).

para obtener

$$\frac{d}{dt}u(x(t), t) = cu_x + u_t = 0. \quad (2.8)$$

Esto significa que si se elije la familia de curvas paramétricas

$$\begin{cases} x'(t) = c \\ x(0) = x_0. \end{cases} \quad (2.9)$$

el valor de u será constante sobre cada una de ellas. La solución de la familia de ecuaciones diferenciales ordinarias (2.9) es

$$x(t) = ct + x_0. \quad (2.10)$$

Estas curvas son conocidas como las curvas características o simplemente características de la ecuación de advección lineal. Como se muestran en la Figura 2.1, las características son líneas paralelas en el plano xt , cada una con pendiente $1/c$ pero que comienzan en diferentes puntos iniciales $(x_0, 0)$ en el eje x . A la derivada $x'(t)$ se le conoce como velocidad de propagación de las características, que para este ejemplo es c .

Para encontrar la solución del problema (2.5) en un punto cualquiera (x, t) basta usar el hecho de que el valor de $u(x(t), t)$ es constante sobre cada punto de la

característica $x(t) = x_0 + ct$, por lo tanto

$$u(x, t) = u(x(t), t) = u(x(0), 0) = u(x_0, 0) = u_0(x_0) = u_0(x - ct). \quad (2.11)$$

Por consiguiente, dado que (x, t) fue elegido de forma arbitraria

$$u(x, t) = u_0(x - ct) \quad (2.12)$$

representa la solución del problema (2.5), la cual es una onda viajera con perfil inicial $u_0(x)$ que se transmite a través del medio con velocidad c .

Para el caso en que $c = c(u)$ se tiene un argumento similar. Aquí las características

$$\begin{cases} x'(t) = c(u) \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (2.13)$$

siguen siendo rectas, pero ahora no son necesariamente paralelas, sino que son rectas de la forma $x(t) = c(u_0(x_0))t + x_0$ con una velocidad de propagación $c(u_0(x_0))$. Aún así, el valor de u sobre cada una de las características $(x(t), t)$ sigue siendo constante ya que

$$\frac{d}{dt}u(x(t), t) = c(u)u_x + u_t = 0. \quad (2.14)$$

Por lo tanto, para conocer el valor u en cualquier punto (x, t) basta con hallar la característica $(x(t), t)$ que pasa por (x, t) y usar x_0 para calcular $u(x, t) = u(x_0, 0) = u_0(x_0)$.

Este último caso explicado en que $c = c(u)$ corresponde a la manera de encontrar soluciones para el problema (2.3), donde $c(u) = f'(u)$. A menos que $c(u)$ sea constante, las ecuaciones de este tipo $u_t + c(u)u_x = 0$ son conocidas como leyes de conservación no lineales. En este tipo de ecuaciones, el *Método de las Características* puede resultar insuficiente para hallar la solución, ya que es posible que dos características se intersecten en un punto (x, t) o incluso que haya regiones en el plano xt que no contengan características (Knobel, 2000). Estas situaciones pueden generar complicaciones en el análisis y requerir enfoques adicionales para abordar las singularidades

y discontinuidades que puedan surgir.

2.3. Ondas de choque y rarefacción

La ecuación de Burgers sin viscosidad será estudiada para motivar la manera de resolver problemas de leyes de conservación no lineales. El problema a considerar es el siguiente:

$$\begin{cases} u_t(x,t) + uu_x(x,t) = 0, & x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \\ u(x,0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.15)$$

donde

$$u_0(x) = \begin{cases} u_l & \text{si } x < 0, \\ u_r & \text{si } x > 0, \end{cases} \quad (2.16)$$

y u_l y u_r son constantes. Las soluciones son diferentes si $u_l < u_r$ y $u_l > u_r$. Se analizará cada uno de los casos.

◇ $u_l > u_r$:

Las curvas características de este problema son $x(t) = u_l t + x_0$ cuando $x_0 < 0$ y $x(t) = u_r t + x_0$ cuando $x_0 > 0$. Debido a que la velocidad de propagación de las características que inician desde el semiplano negativo son más rápidas que las del semiplano positivo, estas se encontrarán generando que se produzcan indeterminaciones. Cuando ocurre esto el procedimiento es hallar el primer instante de tiempo donde chocan las características. En este problema como la discontinuidad se encuentra en la condición inicial el choque se produce en $t = 0$. Esta discontinuidad se propagará a lo largo de una curva paramétrica $(x_s(t), t)$ que

inicia en $(0,0)$ y está dada según la *Condición de Rankine-Hugoniot*[†]

$$\frac{\partial x_s}{\partial t}(t) = \frac{f(u(x_s^+, t)) - f(u(x_s^-, t))}{u(x_s^+, t) - u(x_s^-, t)}, \quad (2.17)$$

donde $u(x_s^+, t)$ y $u(x_s^-, t)$ corresponden a el valor de $u(x_s, t)$ por la derecha e izquierda respectivamente. En este problema $f(u) = \frac{u^2}{2}$, de donde

$$\frac{\partial x_s}{\partial t}(t) = \frac{\frac{u_r^2}{2} - \frac{u_l^2}{2}}{u_r - u_l} = \frac{u_r + u_l}{2}. \quad (2.18)$$

Esto quiere decir que la discontinuidad se propaga desde el origen con velocidad $s = \frac{u_r + u_l}{2}$. Finalmente la solución está dada por

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l & \text{si } x < st, \\ u_r & \text{si } x > st. \end{cases} \quad (2.19)$$

Esta solución es una función suave a trozos con una discontinuidad en $x = st$. Este tipo de soluciones en leyes de conservación son conocidas como *ondas de choque*.

◇ $u_l < u_r$:

Similar al caso anterior las curvas características son $x(t) = u_l t + x_0$ cuando $x_0 < 0$ y $x(t) = u_r t + x_0$ cuando $x_0 > 0$; sin embargo, ahora la velocidad de propagación de las características que inician en $x < 0$ son más lentas que las de $x > 0$ por lo que la región $u_l t < x < u_r t$ no contiene características. Sobre esta región la solución se construye llenándola con un “abanico de características” de la forma $u(x, t) = g(x/t)$ donde u sería constante sobre cada una de estas características añadidas. La función g se encuentra sustituyendo $u(x, t) = g(x/t)$ en

[†]La *Condición de Rankine-Hugoniot* es una relación matemática derivada de las leyes de conservación que describe la conexión entre las propiedades de una solución en ambos lados de una discontinuidad, garantizando que se mantenga el equilibrio y la conservación de las variables a través de dicha discontinuidad.

$u_t + uu_x = 0$. Por regla de la cadena

$$u_t(x,t) = -\frac{x}{t^2}g'(x/t), \quad u_x(x,t) = \frac{1}{t}g'(x/t). \quad (2.20)$$

A continuación

$$-\frac{x}{t^2}g'(x/t) + g(x/t) \cdot \frac{1}{t}g'(x/t) = 0, \quad (2.21)$$

factorizando se tiene

$$\frac{1}{t}g'(x/t) \left(g(x/t) - \frac{x}{t} \right) = 0. \quad (2.22)$$

Esto implica que o bien $g' = 0$, o $g(x/t) = x/t$. Se puede demostrar que la primera opción no es válida dado que viola la condición de Rankine-Hugoniot (2.17) tanto en $x = u_l t$ como en $x = u_r t$. Por lo tanto $g(x/t) = x/t$. Así la solución será una función definida por partes

$$u(x,t) = \begin{cases} u_l & \text{si } x < u_l t, \\ x/t & \text{si } u_l t < x < u_r t, \\ u_r & \text{si } x > u_r t. \end{cases} \quad (2.23)$$

Esta función es continua, pero no es derivable. A soluciones de este tipo se les llama *ondas de rarefacción*.

En general, las leyes de conservación no lineales pueden poseer soluciones débiles que se construyen utilizando una combinación de ondas de choque y de rarefacción. Estas soluciones débiles son el resultado de conectar soluciones clásicas y ondas de rarefacción de forma continua, así como ondas de choque que satisfacen la condición de Rankine-Hugoniot; sin embargo, la búsqueda de soluciones débiles enfrenta problemas en relación a la unicidad. Debido a esto es necesario establecer condiciones que permitan escoger la solución físicamente correcta.

2.4. Condiciones de entropía

Cuando un problema de valor inicial tiene más de una solución, es necesario especificar información adicional para seleccionar una solución concreta. En la dinámica de gases, por ejemplo, las condiciones de entropía se utilizan para seleccionar la solución que sea físicamente más realista (Knobel, 2000).

La condición de entropía desempeña un papel crucial en el diseño de métodos numéricos para construir aproximaciones a soluciones de leyes de conservación. Dado que una ley de conservación puede admitir múltiples soluciones débiles, es esencial garantizar que el método numérico empleado no solo converja, sino que converja hacia la solución físicamente correcta y deseada. La condición de entropía actúa como un criterio de selección que permite discriminar entre las soluciones débiles y asegura que la solución obtenida sea única y respete las propiedades físicas fundamentales del sistema en estudio. En el marco de ecuaciones diferenciales hiperbólicas algunos ejemplos de condiciones de entropía son las dadas por Lax (1957), Oleinik (1963) y Kružkov (1970).

2.5. Métodos de volúmenes finitos

Los métodos de volúmenes finitos son métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales parciales. Se derivan a partir de la forma integral de una ley de conservación. En una dimensión espacial, un método de volúmenes finitos se basa en subdividir el dominio espacial en intervalos (también llamados celdas) y llevar un registro de una aproximación de la integral de u sobre cada uno de estos volúmenes. En cada paso temporal se actualizan estos valores utilizando aproximaciones al flujo a través de los puntos extremos de los intervalos (LeVeque, 2002).

Para el caso unidimensional las celdas corresponden a intervalos de la forma

$$C_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2}), \quad (2.24)$$

donde $x_{i+1/2} = x_j + \Delta x/2$ y Δx es tamaño de la celda. Sobre C_i se define u_i^n como el promedio dentro del intervalo, ósea

$$u_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{C_i} u(x, t_n) dx. \quad (2.25)$$

Por otra parte, la forma integral de la ley de conservación sobre cada celda es

$$\frac{d}{dt} \int_{C_i} u(x, t) dx = f(u(x_{i-1/2}, t)) - f(u(x_{i+1/2}, t)). \quad (2.26)$$

Al integrar esta expresión en el tiempo entre t_n y t_{n+1} y dividir por Δx se obtiene la representación exacta

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{\Delta x} \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{i-1/2}, t)) dt \right]. \quad (2.27)$$

Esta nos dice la manera de actualizar de forma exacta u_j^n en cada paso temporal; sin embargo, no es posible evaluar las integrales presentes en (2.27) debido a que $u(x_{i\pm 1/2}, t)$ varía con el tiempo a lo largo de cada borde de la celda, y no se tiene la solución exacta para trabajar. Por esto se estudian métodos numéricos de la forma

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n \right), \quad (2.28)$$

donde $F_{i-1/2}^n$ es una aproximación al flujo medio a lo largo de $x = x_{i-1/2}$:

$$F_{i-1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{i-1/2}, t)) dt. \quad (2.29)$$

Para problemas hiperbólicos, la información se propaga con velocidad finita[†], por lo que se suele suponer que $F_{i-1/2}^n$ puede obtenerse sólo en función de los valores u_{i-1}^n y u_i^n , ósea

$$F_{i-1/2}^n = \mathcal{F}(u_{i-1}^n, u_i^n), \quad (2.30)$$

[†]La información o perturbaciones se transmiten gradualmente a través del espacio, en lugar de propagarse instantáneamente.

donde \mathcal{F} es alguna función de flujo numérico. El método (2.28) se reescribe como

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathcal{F}(u_i^n, u_{i+1}^n) - \mathcal{F}(u_{i-1}^n, u_i^n)]. \quad (2.31)$$

Un método específico se obtiene dependiendo de como se elija el flujo numérico \mathcal{F} . Este debe tener la propiedad de consistencia ($\mathcal{F}(\bar{u}, \bar{u}) = f(\bar{u})$), para cualquier valor \bar{u} , y debe ser estable numéricamente[†]. El tipo de flujo numérico que se utiliza depende de las propiedades físicas del problema. En particular, en el campo de la sedimentación el flujo numérico de Godunov (Godunov y Bohachevsky, 1959)

$$F_{i-1/2}^n = \begin{cases} \min_{u_{i-1}^n \leq u \leq u_i^n} f(u) & \text{si } u_{i-1}^n \leq u_i^n, \\ \max_{u_i^n \leq u \leq u_{i-1}^n} f(u) & \text{si } u_i^n \leq u_{i-1}^n, \end{cases} \quad (2.32)$$

(LeVeque, 2002) es una buena opción puesto que este tiene en cuenta la condición de entropía (Bürger et al., 2011).

Una condición necesaria adicional para la convergencia y estabilidad de cualquier método de volúmenes finitos es la condición CFL (Courant et al., 1967). Esta establece una restricción en el tamaño de paso temporal Δt respecto al paso espacial Δx . Para los métodos de la forma (2.31) está dada por

$$\Delta t \max_u |f'(u)| \leq \Delta x. \quad (2.33)$$

La teoría de las leyes de conservación es una herramienta fundamental en el modelamiento matemático de procesos físicos, y en particular, es crucial para entender la sedimentación. Lo discutido en este capítulo permite comprender la base de esta teoría e intenta servir de motivación a métodos numéricos más avanzados que se utilizarán en el próximo capítulo, el cual presentará una solución al objetivo de esta memoria.

[†]Un método numéricamente estable asegura que solo las discontinuidades físicamente relevantes estén presentes en la aproximación obtenida (Bürger et al., 2011).

CAPÍTULO 3

Selector de funciones de flujo

Este capítulo presenta una solución para alcanzar el objetivo de esta memoria mediante un mecanismo llamado *Selector de funciones de flujo* compuesto por varias etapas. El Selector se utiliza para determinar el modelo de función de flujo que mejor describe el comportamiento de sedimentación de las partículas de un material M . Para lograr esto se utiliza un criterio que involucra el uso de simulaciones numéricas de curvas de sedimentación. El proceso es ilustrado en el diagrama de la Figura 3.1.

El Selector recibe un conjunto de $p \geq 3$ curvas de sedimentación C_1, C_2, \dots, C_p del material M a distintas concentraciones $\phi_0^1, \phi_0^2, \dots, \phi_0^p$. Una curva de sedimentación representa un conjunto de datos de tiempo versus altura que se registran al medir la interfaz líquido-suspensión en un ensayo de laboratorio realizado en una columna cilíndrica con partículas del material M a una concentración inicialmente homogénea ϕ_0 . Según Karamisheva e Islam (2005), una curva de sedimentación se compone de cuatro zonas distintas: (1) zona de retraso, (2) zona constante, (3) zona de transición y (4) zona de compresión (ver Figura 3.2). Se asume que las curvas inician inmedia-

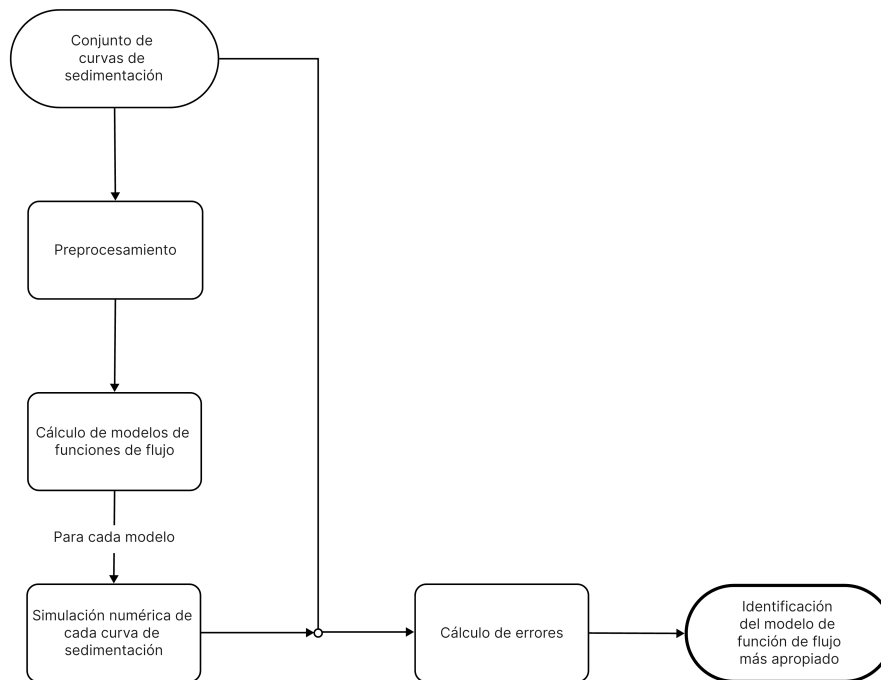


Figura 3.1: Diagrama general del Selector de funciones de flujo.

tamente en la zona constante; sin embargo, si esto no fuera así los datos deben ser preprocesados sin modificar la velocidad de sedimentación en la zona constante ni la altura inicial para garantizar la autenticidad de los resultados.

La etapa siguiente del Selector consiste en el cálculo de modelos de funciones de densidad de flujo. En este trabajo se han considerado dos modelos semiempíricos: el modelo de Michaels y Bolger (1962) y el modelo de Takács et al., (1991) definidos en las ecuaciones (3.4) y (3.5) respectivamente. Para llevar a cabo el cálculo, se realizará un ajuste de los parámetros de ambos modelos a los datos de velocidad y concentración iniciales del conjunto de curvas de sedimentación. Una vez determinados los modelos, se procederá a realizar una simulación numérica de cada una de las curvas experimentales con cada modelo para poder obtener una comparativa posteriormente.

Las simulaciones son realizadas por medio de la simplificación del método numérico presentado en Bürger et al., (2013) y adaptado específicamente para ensayos de columna y despreciando los efectos de compresión. Este método toma como entrada una concentración inicial y un modelo de función de flujo, y simula el perfil de concentración en el espacio y tiempo dentro de la columna. La curva simulada de

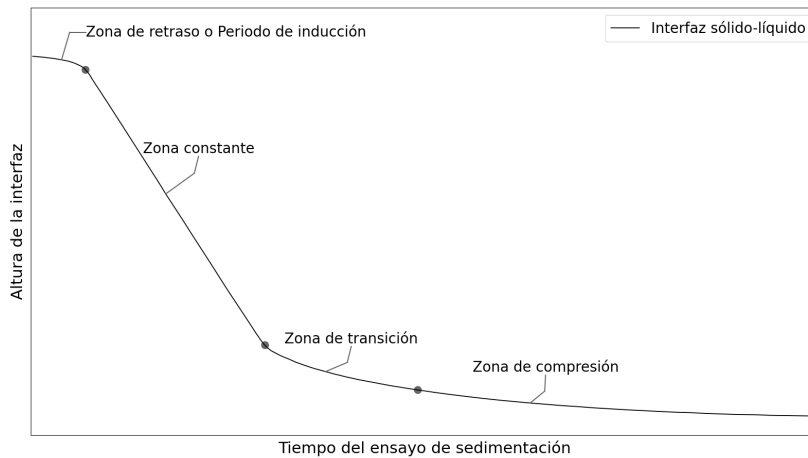


Figura 3.2: Una curva de sedimentación suele presentar cuatro zonas representativas según Vesilind y Jones (1990) y Karamisheva e Islam (2005): la zona de retraso, la zona constante, la zona de transición y la zona de compresión (ilustración inspirada en Torfs et al., (2017)).

sedimentación se obtiene a partir del conjunto de puntos de tiempo y altura que conforman la discontinuidad superior de la solución numérica. Para identificar y extraer esta curva se emplea un algoritmo que se describirá en detalle más adelante.

La idoneidad de los modelos de función de flujo obtenidos es cuantificada por medio del error entre las curvas experimentales y sus simulaciones numéricas correspondientes utilizando la *norma 1*. Esta medida mide la suma de las diferencias absolutas entre los valores de la curva experimental y los valores de la curva simulada en cada punto. A continuación, se promedian los errores de todas las curvas experimentales para un modelo de función de flujo dado. Este valor se ha denominado *Error de Ajuste Promedio (EAP)* y se utiliza para comparar la capacidad explicativa de los diferentes modelos de función de flujo. El Selector, en su último paso, compara los distintos valor de *EAP* e identifica cual es el modelo de función de flujo más apropiado según este criterio.

En las secciones siguientes se describirá en detalle cada una de las etapas del Selector de funciones de flujo.

3.1. Preprocesamiento

En las curvas de sedimentación es común observar un periodo de inducción antes de que se alcance una velocidad de sedimentación constante. Este período es debido al tiempo que se requiere para que la mezcla forme flóculos (Ekama et al., 1997). Por otro lado, las ecuaciones (1.2)-(1.4) que gobiernan la sedimentación no describen esta zona de retraso. Esto se debe a que inicialmente las características son constantes a causa de la condición inicial de homogeneidad (ecuación 1.3). Por lo tanto, para comparar adecuadamente los resultados experimentales y numéricos es necesario realizar una etapa de preprocesamiento de los datos experimentales.

La curva preprocesada debe tener la misma altura inicial y velocidad que en la zona lineal dado que, en ensayos reales, estas pueden influir en el comportamiento de la sedimentación (Iritani et al., 2009). El procedimiento utilizado se describe a continuación. Para ello, considere una curva de sedimentación

$$C = \{(t_k, h_k)\}_{k=0}^n \quad (3.1)$$

ilustrada en la Figura 3.3 (Datos originales). Esta curva tiene un periodo de inducción en $t < t^*$, mientras que su zona lineal está comprendida en $t^* \leq t \leq t'_0$. Los pasos a seguir son los siguientes:

1. Calcular la velocidad de sedimentación $v_0 < 0$ en la zona lineal.
2. Eliminar datos de C en que $t \leq t^*$.
3. Trasladar datos restantes $t^* - (h_0 - h^*)/|v_0|$ unidades de tiempo hacia la izquierda.
4. Definir la partición temporal $T : 0 = \bar{t}_1, \bar{t}_2, \dots, \bar{t}_M = (h_0 - h^*)/|v_0|$, con $M \geq 2$. M representa el número de puntos (a elección) que se quieran añadir al inicio de la gráfica como datos nuevos.
5. Evaluar $\bar{h}_i = h_0 + v_0 \cdot \bar{t}_i$ para cada $i = 1, \dots, M$.
6. Finalmente añadir el conjunto de puntos ordenados $\{\bar{t}_i, \bar{h}_i\}_{i=1}^M$ a la curva C . En la

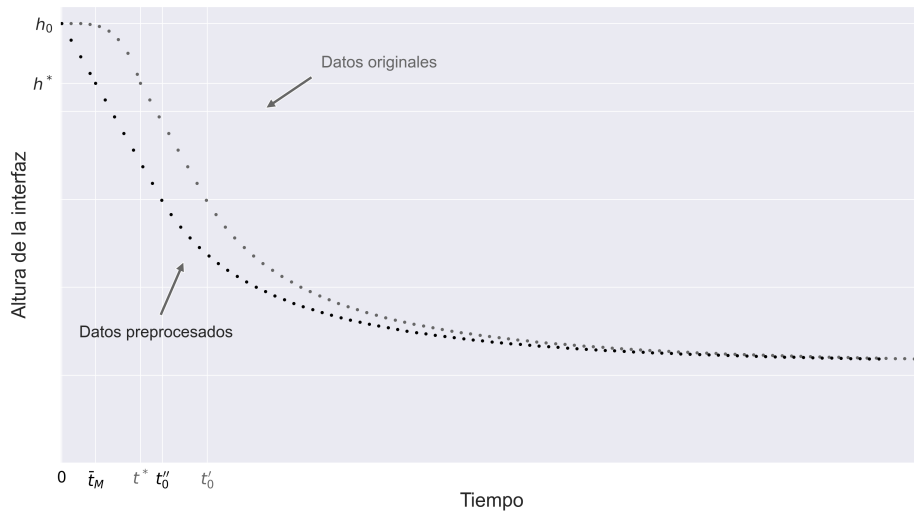


Figura 3.3: Imagen ilustrativa que compara un ejemplo de una posible sedimentación batch (datos originales) con el resultado después de pasar por la etapa de preprocesamiento (datos preprocesados).

Figura 3.3 está representado visualmente el resultado (Datos preprocesados).

Este procedimiento es realizado sobre cada curva que recibe el Selector de forma manual. Aquellas que no presenten una zona de retraso pueden ser omitidas de esta etapa. El conjunto de curvas resultante será utilizado en la etapa siguiente para ajustar los modelos de funciones de flujo.

3.2. Cálculo de modelos de funciones de flujo

Los modelos de funciones de flujo, tal como se mencionó en la sección 1.5, están definidos funcionalmente a través de los modelos de velocidad de sedimentación obstaculizada v_{hs} por medio de la relación (1.10). Los modelos de funciones de flujo además deben satisfacer las condiciones (1.7)-(1.9); sin embargo, muy pocos modelos empíricos y semiempíricos las verifican. Por ejemplo, el modelo de potencia de Yoshioka (1957)

$$v_{hs}(\phi) = k\phi^{-n}, \quad k > 0, \quad n > 0, \quad (3.2)$$

implica que $f_{bk}(0^+) = -\infty$ y $f_{bk}(\phi_{\text{máx}}) < 0$, mientras que el modelo exponencial de Vesilind (1968)

$$v_{hs}(\phi) = ke^{-n\phi}, \quad k > 0, \quad n > 0, \quad (3.3)$$

implica que $f_{bk}(\phi_{\text{máx}}) < 0$. De este modo, fueron considerados dos modelos semi-empíricos: El modelo de Michaels y Bolger (1962)

$$v_{hs}(\phi) = k \left(1 - \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}}\right)^n, \quad k > 0, \quad n > 1, \quad (3.4)$$

y el modelo de Takács et al., (1991)

$$v_{hs}(\phi) = k \left(e^{-n\phi} - e^{-n\phi_{\text{máx}}}\right), \quad k > 0, \quad n > 0. \quad (3.5)$$

Ambos modelos contienen dos parámetros, k y n , que deben ser calculados en función del comportamiento de sedimentación del material con los datos de velocidad y concentración inicial de cada curva de sedimentación. Esto se debe a que la velocidad de sedimentación inicial v_0 de una curva inicialmente homogeneizada a una concentración ϕ_0 representa una estimación del valor de v_{hs} a aquella concentración.

En este trabajo, la velocidad de sedimentación inicial de las curvas es determinada mediante una adaptación del *Método de Mínimos Cuadrados* (Montgomery et al., 1992). El objetivo es ajustar los parámetros m y b del modelo $h(t) = mt + b$ a la zona lineal de la curva $C = \{(t_k, h_k)\}_{k=0}^n$, con $h(t_0) = h_0$ como restricción. De este modo b queda determinado por m por medio de la relación $b = h_0 - mt_0$ generando un modelo con un sólo grado de libertad.

Dado $(t_k, h_k) \in C$, se define el error cuadrático entre el $h(t_k)$ y h_k como

$$E_k = (h_k - mt_k - b)^2. \quad (3.6)$$

Así, se puede definir el error cuadrático medio hasta un punto $j \leq n$ como

$$E_j = \frac{\sum_{k=1}^j (h_k - mt_k - b)^2}{j}. \quad (3.7)$$

Derivando parcialmente respecto a la pendiente m , se tiene que

$$\frac{j}{2} \frac{\partial E_j}{\partial m} = \sum_{k=1}^j (h_k - mt_k - b)(-t_k). \quad (3.8)$$

Por otro lado, haciendo $\frac{\partial E_j}{\partial m} = 0$ para minimizar E_j

$$\sum_{k=1}^j bt_k - \sum_{k=1}^j h_k t_k + m \sum_{k=1}^j t_k^2 = 0, \quad (3.9)$$

reemplazando $b = h_0 - mt_0$

$$\sum_{k=1}^j (h_0 - mt_0)t_k - \sum_{k=1}^j h_k t_k + m \sum_{k=1}^j t_k^2 = 0, \quad (3.10)$$

y factorizando

$$m \left(\sum_{k=1}^j t_k(t_k - t_0) \right) = \sum_{k=1}^j t_k(h_k - h_0), \quad (3.11)$$

se obtiene el valor de la velocidad inicial de sedimentación

$$v_0 = m = \frac{\sum_{k=1}^j t_k(h_k - h_0)}{\sum_{k=1}^j t_k(t_k - t_0)}. \quad (3.12)$$

El valor de j debe ser elegido de modo que el tiempo t_j no supere el instante donde termina la zona lineal. Asimismo, la recta $h(t) = mt + b$ resultante debe ser semejante gráficamente a la zona lineal de la curva.

Una vez obtenidas las velocidades iniciales de sedimentación $v_0^1, v_0^2, \dots, v_0^p > 0$ de las curvas C_1, C_2, \dots, C_p se procede a ajustar los modelos. El modelo de Michaels y Bolger (1962) se ajusta mediante el *Método de Mínimos Cuadrados*. Para ello, es necesario convertirlo en un modelo lineal. En primer lugar, se evalúa $\phi = \phi_0$ en (3.4),

obteniendo

$$v_0 = k \left(1 - \frac{\phi_0}{\phi_{\text{máx}}} \right)^n. \quad (3.13)$$

Luego, se aplica logaritmo y se reorganizan los términos para obtener

$$\log(v_0) = \log(k) + n \log \left(1 - \frac{\phi_0}{\phi_{\text{máx}}} \right). \quad (3.14)$$

Al realizar un cambio de variables $y = \log(v_0)$, $x = \log \left(1 - \frac{\phi_0}{\phi_{\text{máx}}} \right)$, $p_0 = \log(k)$ y $p_1 = n$, se obtiene el modelo lineal

$$y = p_0 + p_1 x, \quad (3.15)$$

cuyos parámetros p_0 y p_1 son ajustados a los datos de

$$y_l = \log(v_0^l), \quad x_l = \log \left(1 - \frac{\phi_0^l}{\phi_{\text{máx}}} \right), \quad (3.16)$$

para $l = 1, \dots, p$. Finalmente, se calculan los parámetros del modelo original como

$$k = e^{p_0}, \quad n = p_1. \quad (3.17)$$

Por otro lado, el modelo de Takács et al., (1991) no puede ser linealizado por lo que sus parámetros son ajustados a los datos $\{(\phi_0^l, v_0^l)\}_{l=1}^p$ con el *Algoritmo de Levenberg-Marquardt*[†] (Moré, 2006) con una estimación inicial de $k = n = 1$.

Una vez que se han obtenido los parámetros de los modelos de funciones de flujo mencionados en las ecuaciones (3.4) y (3.5), se procede a la siguiente etapa del proceso, que implica la realización de simulaciones numéricas de las curvas de sedimentación originales. Estas simulaciones permiten evaluar la capacidad explicativa de cada modelo en relación al comportamiento de sedimentación del material M .

[†]El *Algoritmo de Levenberg-Marquardt* es una técnica numérica de optimización no lineal que combina los métodos de Gauss-Newton y Gradiente Descendiente para encontrar los parámetros óptimos de un modelo no lineal que mejor se ajuste a un conjunto de datos experimentales.

3.3. Simulaciones de curvas de sedimentación

En esta sección se describe el método empleado para simular curvas de sedimentación en columnas de ensayo. Primero se presenta el método numérico para obtener el perfil de concentración de la columna en el tiempo y luego se detalla el procedimiento utilizado para identificar y extraer la curva de sedimentación a partir de los resultados numéricos obtenidos.

El método numérico utilizado para simular ensayos de columna sin considerar efectos de compresión se basa en la simplificación de la Metodología de Modelamiento Consistente (MMC) propuesta por Bürger et al., (2013). El perfil de concentración de una curva experimental $C = \{(t_k, h_k)\}_{k=0}^n$ a una concentración inicial ϕ_0 se simula sobre la partición espacial

$$z_j = j\Delta z, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad (3.18)$$

que representa la profundidad de una columna de sedimentación; y temporal

$$T_i = i\Delta t, \quad i = 0, 1, \dots, M, \quad (3.19)$$

con el modelo discreto de ecuaciones:

$$\hat{\phi}_1^{n+1} = \hat{\phi}_1^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} f_{\text{bk}}(\hat{\phi}_1^n), \quad (3.20)$$

$$\hat{\phi}_j^{n+1} = \hat{\phi}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} (G_j^n - G_{j-1}^n), \quad (3.21)$$

$$\hat{\phi}_N^{n+1} = \hat{\phi}_N^n + \frac{\Delta t}{\Delta z} G_{N-1}^n, \quad (3.22)$$

para $j = 2, \dots, N-1$ y la condición inicial

$$\hat{\phi}_j^0 = \phi_0, \quad \text{para } j = 1, \dots, N. \quad (3.23)$$

Aquí $\Delta z = h_0/N$, mientras que N corresponde al número de intervalos equiespaciados en los cuales se divide la columna verticalmente, $M = \lceil t_n/\Delta t \rceil$ y Δt se elige

según la condición CFL 3.37, f_{bk} corresponde a un modelo de función de flujo y G_j representa el flujo numérico de Godunov en la capa j . El valor de G_j^n se define mediante la ecuación

$$G_j = G_j(\phi_j, \phi_{j+1}) := \begin{cases} \min_{\phi_j \leq \phi \leq \phi_{j+1}} f_{\text{bk}}(\phi) & \text{si } \phi_j \leq \phi_{j+1}, \\ \max_{\phi_j \geq \phi \geq \phi_{j+1}} f_{\text{bk}}(\phi) & \text{si } \phi_j > \phi_{j+1}. \end{cases} \quad (3.24)$$

Sin embargo, para modelos de f_{bk} con un único máximo local se puede simplificar el cálculo utilizando el Algoritmo 1. Tal es el caso de las funciones (3.4) y (3.5) quienes tienen un único máximo en $[0, \phi_{\text{max}}]$. En el caso de la función de Takács, su máximo se encuentra en el intervalo $(0, \frac{2}{n})$ y no se expresa analíticamente (ver Teorema 1). Para aproximar este máximo se utiliza el *Método de Newton Raphson*[†] (Engquist, 2015) que resuelve iterativamente la ecuación $f'_{\text{bk}}(\phi) = 0$ con una estimación inicial $\phi = 0$, una tolerancia de 10^{-6} y un límite de 10000 iteraciones. El máximo del modelo de Michaels y Bolger es $\phi = \phi_{\text{max}}(n+1)^{-1}$ (ver Teorema 2).

Algoritmo 1 Cálculo de G_j

Require: Concentraciones ϕ_j y ϕ_{j+1} , función f_{bk} con exactamente un máximo en $\hat{\phi}$

if $\phi_j \leq \phi_{j+1}$ **then**
 $G_j \leftarrow \min\{f_{\text{bk}}(\phi_j), f_{\text{bk}}(\phi_{j+1})\}$
else
 if $(\hat{\phi} - \phi_j)(\hat{\phi} - \phi_{j+1}) < 0$ **then**
 $G_j \leftarrow f_{\text{bk}}(\hat{\phi})$
 else
 $G_j \leftarrow \max\{f_{\text{bk}}(\phi_j), f_{\text{bk}}(\phi_{j+1})\}$
 end if
end if
return Valor de G_j

Teorema 1. *La función de flujo de Takács*

$$f_{\text{bk}}(\phi) = k\phi \left(e^{-n\phi} - e^{-n\phi_{\text{max}}} \right), \quad k > 0, \quad n > 0, \quad (3.25)$$

[†]El *Método de Newton-Raphson* es un algoritmo de optimización numérica utilizado para encontrar las raíces de una función no lineal.

tiene un sólo máximo y este se encuentra en el intervalo $(0, \frac{2}{n})$.

Demostración. Se calculan las derivadas de (3.25):

$$f'_{\text{bk}}(\phi) = k \left((1 - n\phi)e^{-n\phi} - e^{-n\phi_{\text{máx}}} \right), \quad (3.26)$$

$$f''_{\text{bk}}(\phi) = -kn(2 - n\phi)e^{-n\phi}, \quad (3.27)$$

$$f'''_{\text{bk}}(\phi) = kn^2e^{-n\phi}(3 - n\phi). \quad (3.28)$$

La naturaleza no lineal de f'_{bk} no permite encontrar los puntos críticos de f_{bk} de manera explícita; sin embargo, dado que

$$f'_{\text{bk}}(0) = k \left(1 - e^{n\phi_{\text{máx}}} \right) > 0, \quad (3.29)$$

y

$$f'_{\text{bk}}\left(\frac{2}{n}\right) = -k \left(e^{-2} + e^{-n\phi_{\text{máx}}} \right) < 0, \quad (3.30)$$

al ser f'_{bk} continua en $[0, \frac{2}{n}]$ por ser composición de funciones continuas, el Teorema de Bolzano (Apostol, 1991) afirma que existe $\bar{\phi} \in (0, \frac{2}{n})$ tal que $f'_{\text{bk}}(\bar{\phi}) = 0$. Este además es único dado que f'''_{bk} es monótona creciente ya que $f'''_{\text{bk}} > 0$ para todo $\phi \in (0, \frac{2}{n})$.

Adicionalmente, se tiene que $f''_{\text{bk}}(\bar{\phi}) < 0$. Esto implica que $\bar{\phi}$ es único punto de máximo de f_{bk} en $(0, \frac{2}{n})$. Por último, notar que

$$f'_{\text{bk}}(\phi) < 0, \quad \forall \phi \geq \frac{2}{n}. \quad (3.31)$$

Ósea que f_{bk} es monótona decreciente para $\phi \geq \frac{2}{n}$. Esto demuestra que el único máximo de f_{bk} se encuentra en $(0, \frac{2}{n})$. \square

Teorema 2. *La función de flujo de Michaels y Bolger*

$$f_{\text{bk}}(\phi) = k\phi \left(1 - \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}} \right)^n, \quad k > 0, \quad n > 1, \quad (3.32)$$

tiene un único máximo en $(0, \phi_{\text{máx}})$.

Demostración. Se calculan las derivadas de (3.32):

$$f'_{\text{bk}}(\phi) = k \left(1 - \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}}\right)^{n-1} \left(1 - (n+1) \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}}\right), \quad (3.33)$$

$$f''_{\text{bk}}(\phi) = -\frac{k}{\phi_{\text{máx}}} \left(1 - \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}}\right)^{n-2} \left(2n - \left(2 + (n-1)(n+2) \frac{\phi}{\phi_{\text{máx}}}\right)\right). \quad (3.34)$$

Haciendo $f'_{\text{bk}}(\bar{\phi}) = 0$; se obtiene el punto crítico $\bar{\phi} = \phi_{\text{máx}}/(n+1)$. Este es máximo absoluto pues

$$f''_{\text{bk}}(\bar{\phi}) = -\frac{kn}{\phi_{\text{máx}}} \left(\frac{n}{n+1}\right)^{n-2} < 0. \quad (3.35)$$

□

Por su parte, el paso temporal Δt debe ser elegido según la expresión de la condición CFL encontrada en Bürger et al., (2013), la cual se simplifica en

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{\max_{0 \leq \phi \leq \phi_{\text{máx}}} |f'_{\text{bk}}(\phi)|}. \quad (3.36)$$

Más aún, debido a la naturaleza física de las funciones de flujo este máximo se alcanza siempre en $\phi = 0$. Con lo cual

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{|f'_{\text{bk}}(0)|}. \quad (3.37)$$

Una vez obtenida la solución numérica ϕ_j^i , el siguiente paso es obtener la curva de sedimentación simulada $\hat{C} = \{(\hat{t}_k, \hat{h}_k)\}_{k=0}^{\hat{n}}$. Para lograr esto se ha desarrollado un procedimiento que se fundamenta en la premisa de que la concentración en la columna de sedimentación por encima de la interfaz líquido-suspensión es menor que la concentración inicial ϕ_0 . Los puntos que se encuentran por encima de esta interfaz representan el líquido clarificado. En este contexto, se define Φ^j como el conjunto de índices j que conforman el líquido clarificado en el paso temporal t_i , dado por la expresión:

$$\Phi^i = \{j \in \{1, \dots, N\} : \phi_j^i < \phi_0\}, \quad i = 1, \dots, M, \quad (3.38)$$

y se elije

$$j_i = \underset{j}{\text{máx}} \Phi^j, \quad (3.39)$$

luego el conjunto

$$\hat{C}_z := (t_0, z_0) \cup \{(t_i, z_{j_i}) : i = 1, \dots, M\} \quad (3.40)$$

contiene los pares ordenados de tiempo versus profundidad que conforman la interfaz en la solución ϕ_j^i . Finalmente se escogen

$$\hat{t}_i = T_i + t_0, \quad (3.41)$$

$$\hat{h}_i = \begin{cases} z_0 & \text{si } i = 0, \\ h_0 - z_{j_i} & \text{si } i > 0, \end{cases} \quad (3.42)$$

para cada $i = 1, \dots, M$. La adición de t_0 en (3.41) es necesaria para poder realizar una comparación entre las curvas C y \hat{C} posteriormente. Esto es debido a que el instante inicial t_0 puede haber sido registrado como $t_0 > 0$.

Al llevar a cabo este procedimiento, en algunos casos, se obtuvieron curvas erróneamente extraídas en la zona lineal. La curva simulada en esta zona se mostraba por debajo de la verdadera interfaz real apreciada por la discontinuidad. Esto es debido a aproximaciones computaciones que calculaban la concentración sobre la interfaz con valores ligeramente menores a ϕ_0 . Por este motivo, la definición de (3.38) fue adaptada a

$$\Phi^i = \{j \in \{1, \dots, N\} : \phi_j^i < 0.99 \times \phi_0\}, \quad i = 1, \dots, M; \quad (3.43)$$

sin embargo, el añadir este factor 0.99 causó que en ciertas ocasiones el conjunto Φ^i fuera vacío. Cuando ocurriera esto se utilizó 0.9999 en vez de 0.99. Luego de estas modificaciones todas las curvas \hat{C} fueron correctamente extraídas.

3.4. Cálculo de errores

Definir una métrica de error entre la curva de sedimentación $C = \{(t_k, h_k)\}_{k=0}^n$ y una simulación $\hat{C} = \{(\hat{t}_k, \hat{h}_k)\}_{k=0}^{\hat{n}}$ calculada con el método de la sección anterior es clave para que el Selector identifique el modelo de función de flujo más apropiado. En este trabajo, se ha optado por una métrica que mide la suma de las diferencias absolutas entre ambas curvas dado que esta considera el error a lo largo de toda la curva.

Debido a que ninguna de las curvas se comporta de manera continua es necesario realizar una intervención sobre al menos una de ellas. Para ello se propone realizar una interpolación lineal sobre los puntos de la curva simulada \hat{C} . De esta forma se obtiene una representación continua de la simulación \hat{C} , la cual queda descrita por la función interpoladora $\hat{h} = \hat{h}(t)$ para $\hat{t}_0 \leq t \leq \hat{t}_{\hat{n}}$. Esto permite definir el error entre C y \hat{C} como:

$$e(C, \hat{C}) = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n |h_i - \hat{h}(t_i)|. \quad (3.44)$$

Así, para un conjunto de p experimentos de sedimentación $\{C_k\}_{k=1}^p$ con sus respectivas simulaciones $\{\hat{C}_k\}_{k=1}^p$, se define el *Error de Ajuste Promedio* como:

$$EAP = \frac{1}{p} \cdot \sum_{k=1}^p e(C_k, \hat{C}_k). \quad (3.45)$$

Este valor permite cuantificar la capacidad predictiva de un modelo de función de flujo f_{bk} para las partículas sólidas del material M . Durante la etapa de cálculo de errores, se obtiene un valor de EAP para cada uno de los modelos utilizados. El Selector elige el mejor modelo como aquel que tenga el valor más bajo de EAP , lo que indica una mayor precisión en la predicción del comportamiento de sedimentación del material.

3.5. Síntesis del Proceso de Selección

Se presenta a continuación un resumen que reúne las distintas partes del Selector de funciones de flujo en un algoritmo estructurado. Este enfoque permite identificar el modelo de función de flujo óptimo para describir el comportamiento de sedimentación de partículas en un material específico. Los cinco pasos fundamentales del algoritmo, que incorporan los conceptos y métodos abordados previamente en este capítulo, se describen brevemente a continuación:

1. Reunir un conjunto de curvas de sedimentación experimentales de la forma $C = \{(t_k, h_k)\}_{k=0}^n$ para un material M , así como las condiciones iniciales de concentración y velocidad, ϕ_0 y v_0 .
2. Seleccionar un conjunto de modelos de función de flujo f_{bk} que cumplan las condiciones (1.7)-(1.9), como los modelos de Michaels y Bolger (1962) y Takács et al., (1991), y otros que sean relevantes para el comportamiento de sedimentación de partículas.
3. Para cada función de flujo f_{bk} en el conjunto:
 - a) Simular las curvas de sedimentación en columnas de ensayo con el modelo presentado en las ecuaciones (3.18)-(3.37)
 - b) A partir de los resultados numéricos obtenidos, identificar y extraer la curva de sedimentación simulada $\hat{C} = \{(\hat{t}_k, \hat{h}_k)\}_{k=0}^{\hat{n}}$ utilizando el procedimiento descrito en la sección 3.3.
4. Calcular el Error de Ajuste Promedio (EAP) entre las curvas de sedimentación experimentales C y las simulaciones \hat{C} para cada función de flujo f_{bk} utilizando la fórmula (3.44).
5. Comparar los valores de EAP obtenidos para cada modelo de función de flujo f_{bk} . El Selector elige el mejor modelo como aquel que tenga el valor más bajo de EAP.

Con esto concluye el procedimiento del Selector de funciones de flujo. Se

revisó el funcionamiento de este mecanismo y sus etapas correspondientes con el fin de poder determinar el modelo de función de flujo más idóneo para la descripción del comportamiento de sedimentación de las partículas de un material dado. En el siguiente capítulo se pondrá a prueba el simulador con distintos conjuntos de curvas de sedimentación.

CAPÍTULO 4

Aplicación del Selector

El Selector de funciones de flujo presentado anteriormente será puesto en practica sobre distintos conjuntos de curvas de sedimentación. El objetivo de este capítulo es, por lo tanto, evaluar el desempeño y la capacidad predicción de este instrumento en las etapas de sedimentación aplicado a diferentes materiales. Más adelante se mostrarán los gráficos correspondientes a cada conjunto de los datos de prueba. Luego, con los resultados de las simulaciones se podrá identificar la función de flujo más apropiada para cada caso específico, analizar posibles patrones, entre otros.

4.1. Conjuntos de datos de prueba

Se emplearon varios conjuntos de ensayos de sedimentación extraídos de diversas fuentes bibliográficas, además de una serie de curvas obtenidas por el tesista mediante el uso del instrumento Interface Tracker de [Hibring](#). Todos estos datos se resumen en el Cuadro (4.1). Cada conjunto consta de un tipo de sólido diferente, y en todos ellos se utilizó agua como líquido de la mezcla, excepto en el conjunto [4] donde

se utilizó agua pura. La tabla también incluye la concentración máxima de compresión $\phi_{\text{máx}}$ de cada sólido.

Conjunto	Referencia	Sólido	$\phi_{\text{máx}}$
[1]	De Clercq et al., (2005)	Lodos activados	22 g/l
[2]	Gupta y Yan (2016)	Cobre-Níquel	100 %
[3]	Gupta y Yan (2016)	Oro floculado	100 %
[4]	Iritani et al., (2009)	Dióxido de titanio	100 %
[5]	Karamisheva e Islam (2005)	Lodos activados	15.76 g/l
[6]	Locatelli et al., (2015)	Lodos activados	31 g/l
[7]	Ramin et al., (2014)	Lodos activados (Lundtoffe)	12 g/l
[8]	Ramin et al., (2014)	Lodos activados (Lynetten)	12 g/l
[9]	Shannon et al., (1964)	Micro esferas de vidrio	100 %
[10]	Stricker et al., (2007)	Lodos activados	17 g/l
[11]	Vanderhasselt y Vanrolleghem (2000)	Lodos activados	54.56 g/l
[12]	Hibring	Relave de Andacollo	37.76 %

Cuadro 4.1: Resumen de los conjuntos de curvas de sedimentación utilizados en el Selector. Cada fila presenta información sobre la fuente de los datos, el tipo de sólido utilizado y su concentración máxima de compresión $\phi_{\text{máx}}$.

Los valores de ϕ_{max} se obtuvieron de diferentes formas para cada conjunto de ensayos. Para el conjunto [1], el valor se encontró expresamente en la referencia correspondiente. En el caso de los conjuntos [7] y [8] el valor de ϕ_{max} fue estimado a partir de la Figura 3 de Ramin et al., (2014). Para los demás conjuntos, se estimó el valor de ϕ_{max} . En aquellos casos en que la concentración se registró en unidades adimensionales (V/V o m/m), como sucede en los conjuntos [2], [3], [4] y [9], se consideró que $\phi_{\text{max}} = 100\%$. Para los conjuntos [5], [10] y [11], se utilizó la ecuación de balance de masas:

$$\phi_f = \phi_0 \cdot \frac{h_0}{h_f}. \quad (4.1)$$

Aquí, h_0 representa la altura inicial del ensayo, y h_f y ϕ_f la altura y concentración

media estimada al final del experimento. Dentro de cada conjunto se seleccionaron las curvas donde visualmente se aprecia una aproximación a un estado estacionario en la zona de compresión. El valor de ϕ_f de cada curva es calculado mediante la ecuación (4.1). Por consiguiente, $\phi_{m\acute{a}x}$ se eligió como el promedio de los distintos valores de ϕ_f . En los Cuadros 4.2, 4.3 y 4.4 se resumen estos cálculos. En particular, las curvas del conjunto [10] aún permanecen en un estado transitorio en fase de compresión por un tiempo indeterminado. Por este motivo se le aumentará levemente su valor.

Conjunto [5]	h_0 (mm)	h_f (mm)	ϕ_f (g/l)
$\phi_0 = 1.6$ g/l	379.45	39.385	15.415
$\phi_0 = 2.4$ g/l	379.45	56.83	16.02
$\phi_0 = 3.7$ g/l	379.45	85.631	15.840
$\phi_{m\acute{a}x}$	-	-	15.76

Cuadro 4.2: Estimación de $\phi_{m\acute{a}x}$ para el conjunto [5].

Conjunto [10]	h_0 (mm)	h_f (mm)	ϕ_f (g/l)
$\phi_0 = 3.74$ g/l	1143	272	15.72
$\phi_0 = 4.68$ g/l	1153	346	15.6
$\phi_0 = 6.005$ g/l	1173	432	16.3
$\phi_0 = 7.03$ g/l	1159	511	15.95
$\phi_0 = 8.324$ g/l	1163	614	15.77
$\phi_{m\acute{a}x}$	-	-	15.87 \rightarrow 17

Cuadro 4.3: Estimación de $\phi_{m\acute{a}x}$ para el conjunto [10].

Conjunto [11]	h_0 (mm)	h_f (mm)	ϕ_f (g/l)
$\phi_0 = 3.0$ g/l	588	20.93	84.281
$\phi_0 = 5.0$ g/l	544	63.35	42.936
$\phi_0 = 7.7$ g/l	573	121.04	36.452
$\phi_{m\acute{a}x}$	-	-	54.56

Cuadro 4.4: Estimación de $\phi_{m\acute{a}x}$ para el conjunto [11].

A continuación se presentan los gráficos de cada conjunto de ensayos de la tabla (4.1). En sus leyendas se encuentra su concentración inicial ϕ_0 . Estas curvas ya fueron preprocesadas por la técnica descrita en la sección 3.1.

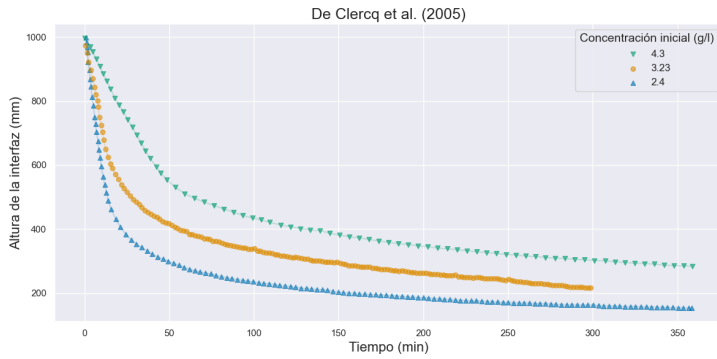


Figura 4.1: Curvas del conjunto [1]

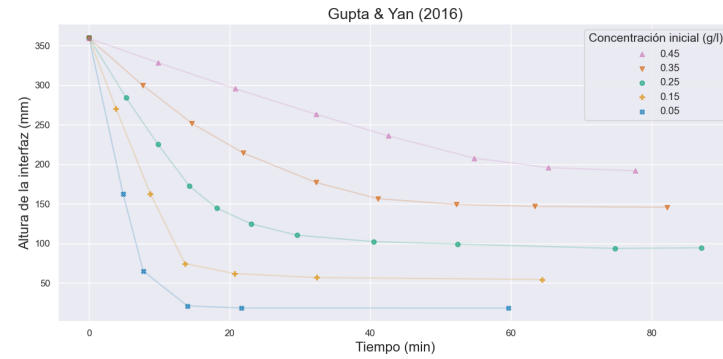


Figura 4.2: Curvas del conjunto [2]

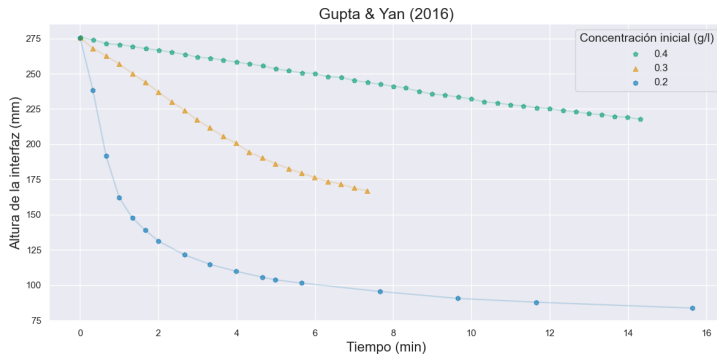


Figura 4.3: Curvas del conjunto [3]

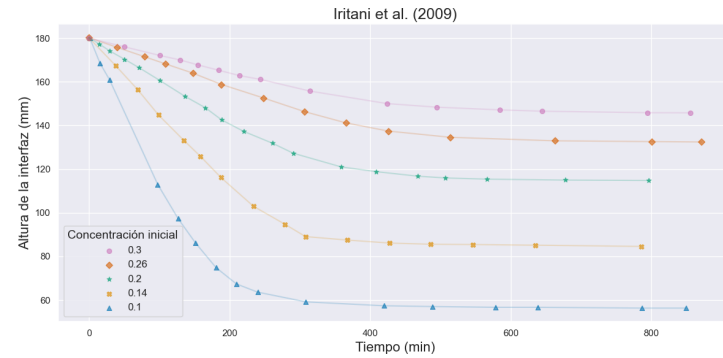


Figura 4.4: Curvas del conjunto [4]

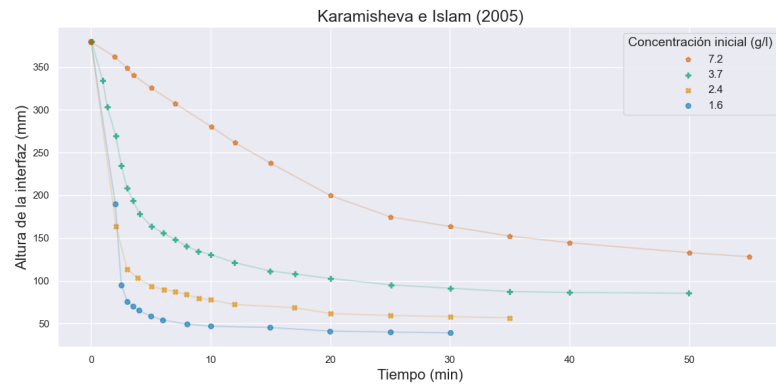


Figura 4.5: Curvas del conjunto [5]

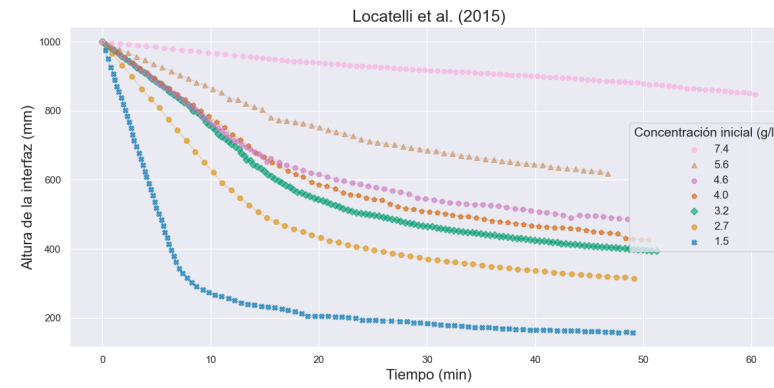


Figura 4.6: Curvas del conjunto [6]

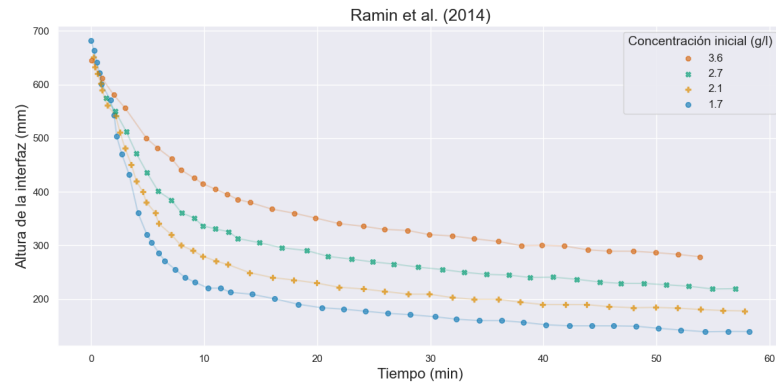


Figura 4.7: Curvas del conjunto [7]

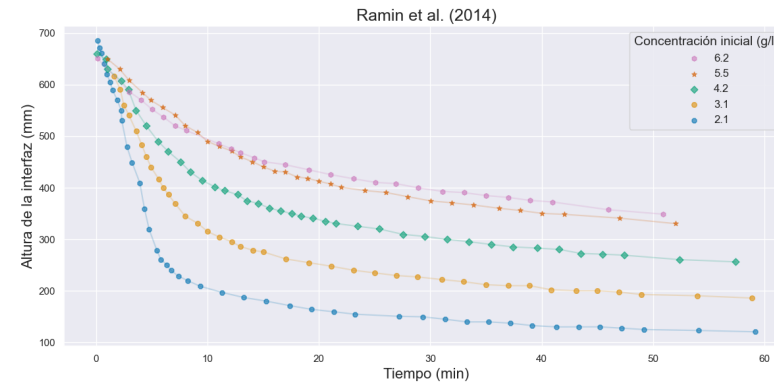


Figura 4.8: Curvas del conjunto [8]

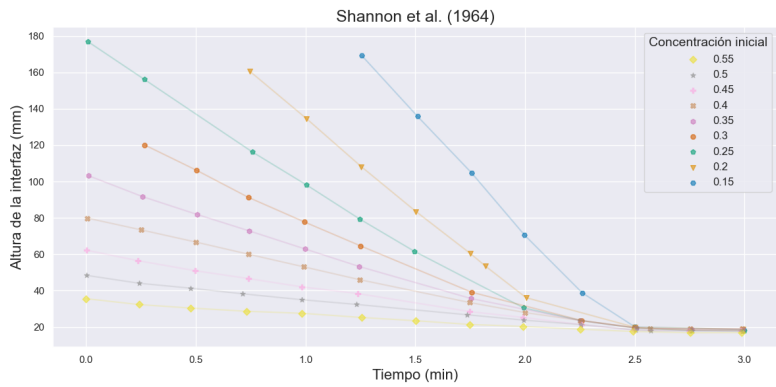


Figura 4.9: Curvas del conjunto [9]

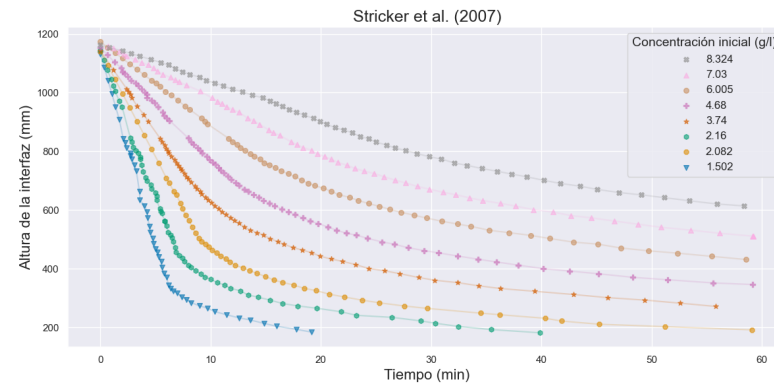


Figura 4.10: Curvas del conjunto [10]

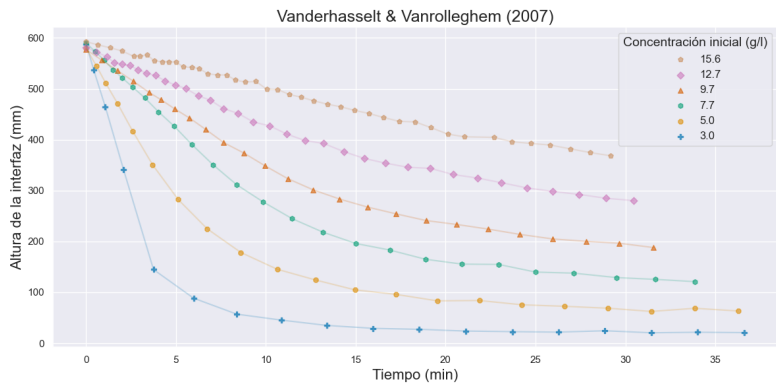


Figura 4.11: Curvas del conjunto [11]

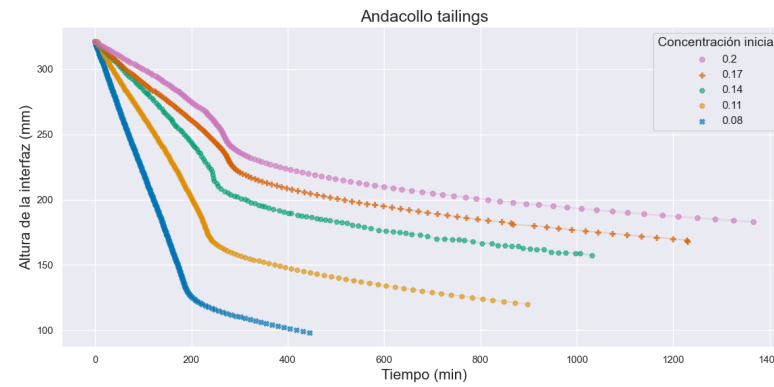


Figura 4.12: Curvas del conjunto [12]

4.2. Resultados

Se utilizó el criterio de selección de funciones de flujo dado por el Selector en los conjuntos del Cuadro 4.1. Para ello, se eligió $N = 400$ y el paso temporal correspondiente a la etapa de simulaciones igual a

$$\Delta t = 0.99 \cdot \frac{\Delta z}{|f'_{bk}(0)|}, \quad (4.2)$$

el cual verifica la condición CFL (3.37).

A continuación, se mostrarán en detalle los resultados de cada etapa del conjunto [1]. Los lodos activados proceden de una planta depuradora municipal de Destelbergen, Bélgica.

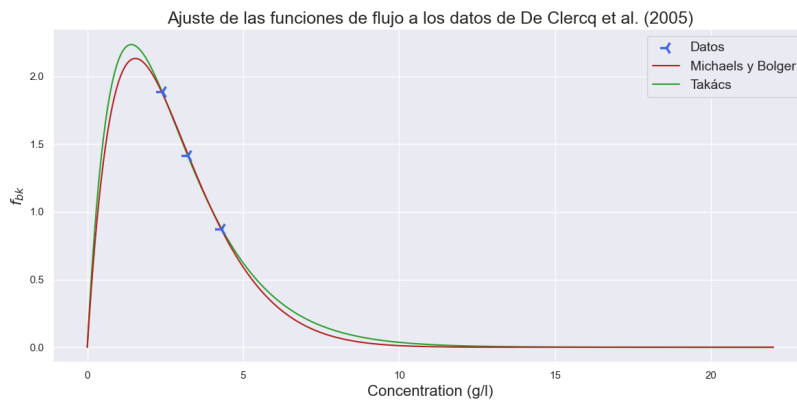
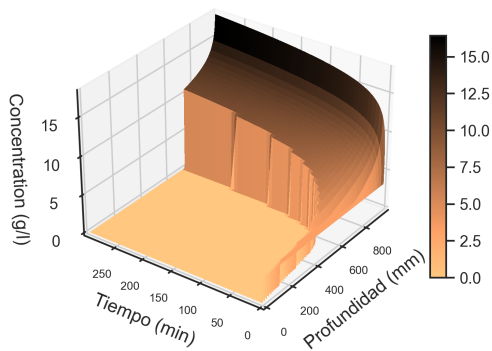


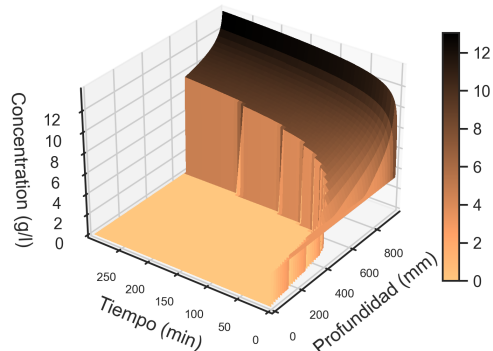
Figura 4.13: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [1].

Simulación de De Clercq et al. 3.23 g/l

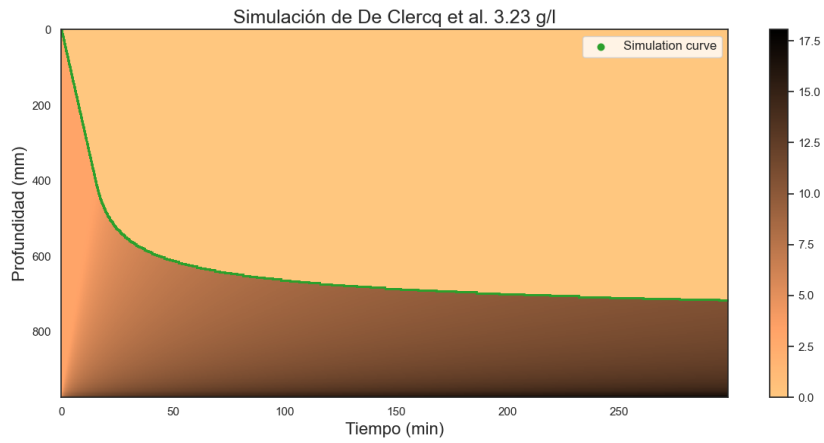


(a) Solución por Takacs

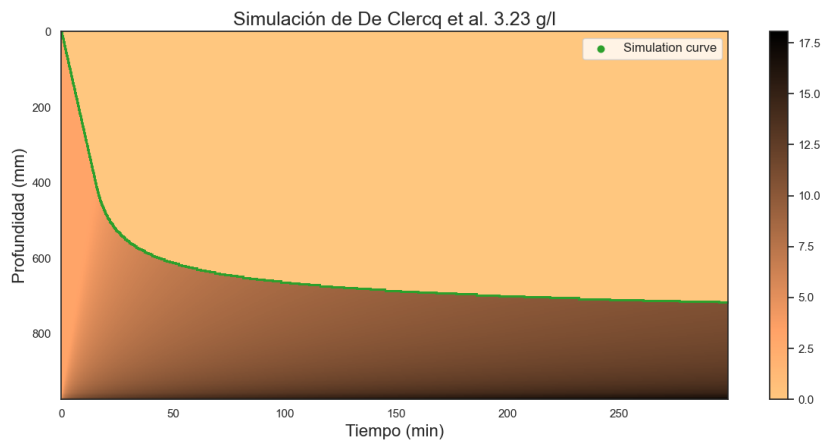
Simulación de De Clercq et al. 3.23 g/l



(b) Solución por Michaels y Bolger

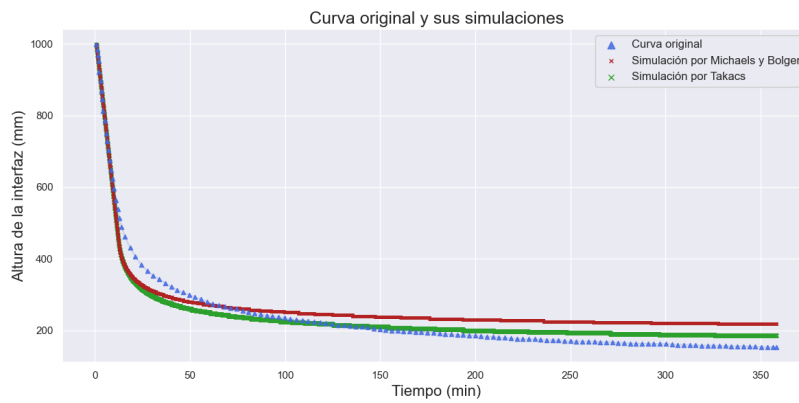


(c) Solución de la simulación en conjunto con la curva simulada \hat{C} por Takacs

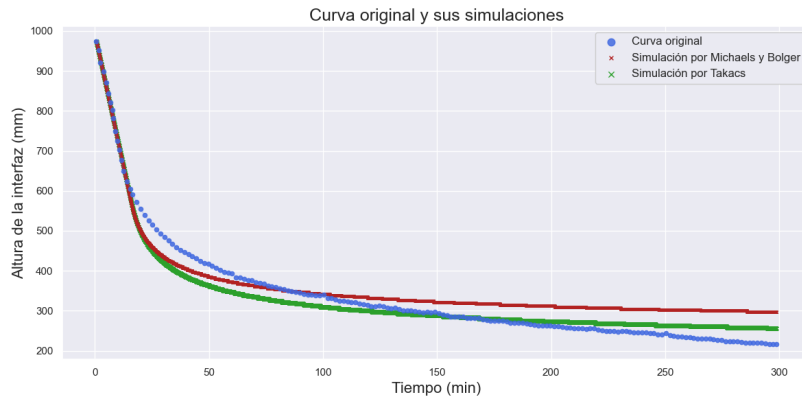


(d) Solución de la simulación en conjunto con la curva simulada \hat{C} por Michaels y Bolger

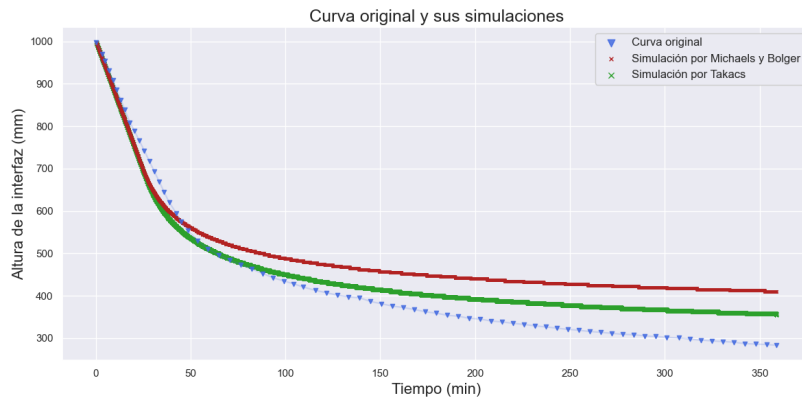
Figura 4.14: Simulaciones del conjunto [1] con $\phi_0 = 3.23$ g/l



(a) $\phi_0 = 2.40$ g/l



(b) $\phi_0 = 3.23$ g/l

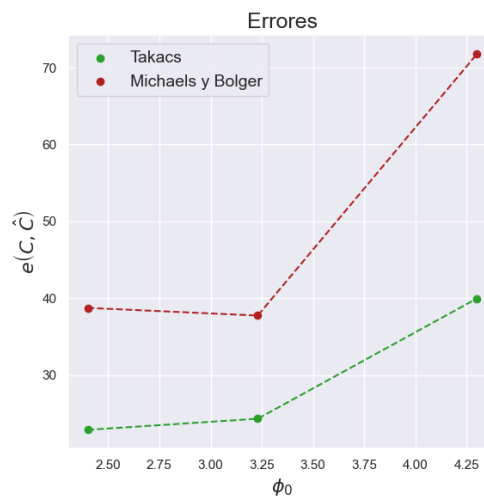


(c) $\phi_0 = 4.30$ g/l

Figura 4.15: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [1].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
2.4	22.8737	38.7398
3.23	24.3206	37.7415
4.3	39.9596	71.7694
EAP	29.051	49.417

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.16: El método seleccionado para el conjunto [1] por el Selector es el de Takács

De acuerdo a los resultados obtenidos en el Cuadro 4.16a se establece que el modelo de Takács es más adecuado que el de Michaels y Bolger para el conjunto de curvas del conjunto [1]. Por lo tanto, el Selector identifica que la función (3.4) con parámetros $k = 3.6305$ y $n = 13.281$ logra predecir mejor a las partículas de lodos activados utilizados.

A continuación se mostrarán los resultados obtenidos con los conjuntos restantes. En estos sólo se mostrará el ajuste de los modelos de f_{bk} , la comparación entre las curvas experimentales y las simuladas, y la determinación del mejor modelo tabulado en los cuadros de error. En el cuadro 4.5 están resumidos los valores de los parámetros k y n ajustados de los modelos (3.4) y (3.5).

- ◇ Las curvas del conjunto [2] fueron registradas a partir de ensayos de sedimentación con relave de cobre-níquel. Los resultados son:

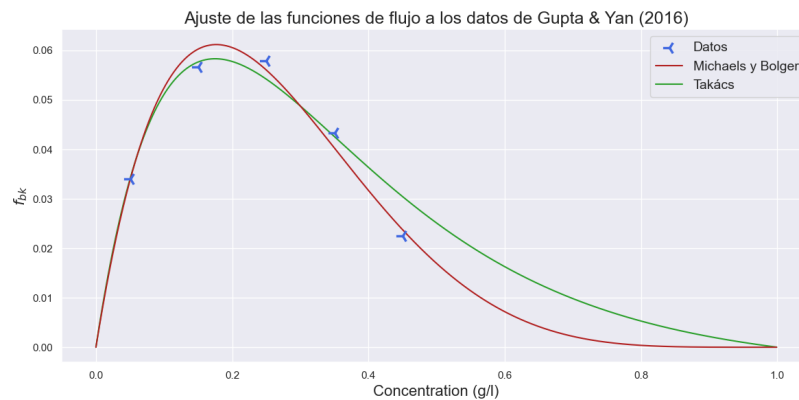
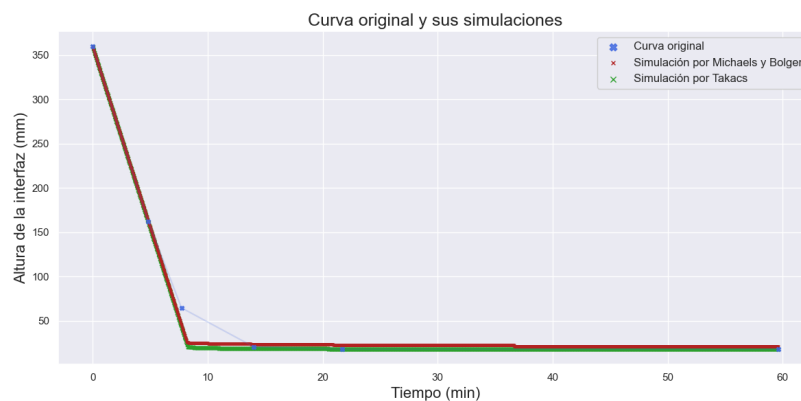
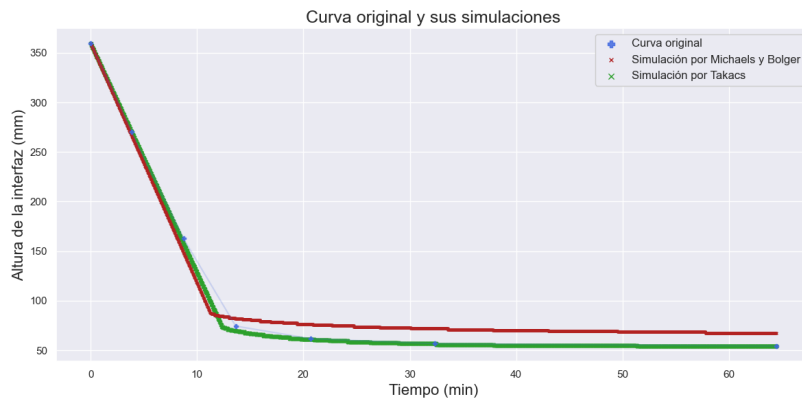


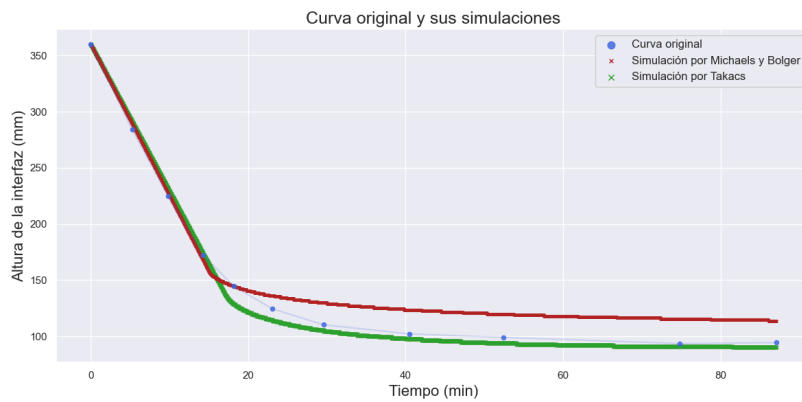
Figura 4.17: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [2].



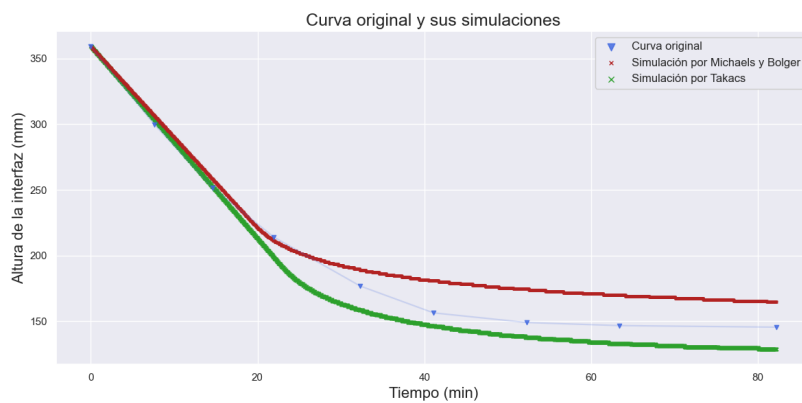
(a) $\phi_0 = 5\%$



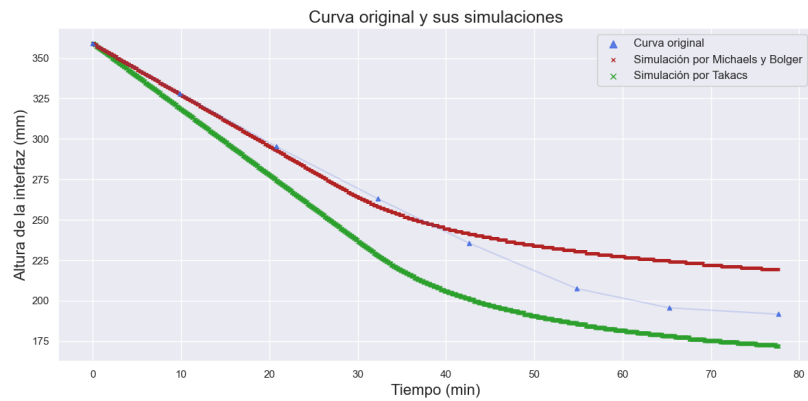
(b) $\phi_0 = 15\%$



(c) $\phi_0 = 25\%$



(d) $\phi_0 = 35\%$

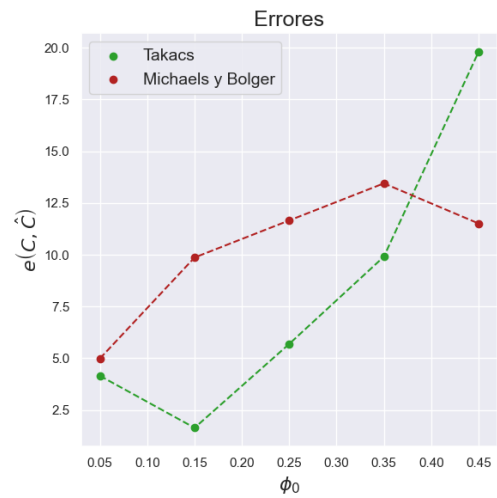


(e) $\phi_0 = 45\%$

Figura 4.18: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [2].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
0.05	4.1517	4.9915
0.15	1.6418	9.8666
0.25	5.6931	11.6562
0.35	9.9049	13.4461
0.45	19.7882	11.5113
<i>EAP</i>	8.236	10.294

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.19: El método seleccionado para el conjunto [2] por el Selector es el de Takács

◇ Las curvas del conjunto [3] fueron registradas a partir de ensayos de sedimentación con relave de oro floculado. Los resultados son:

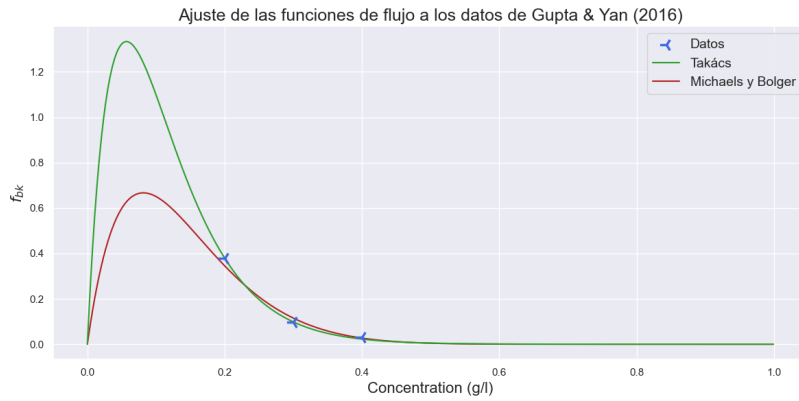
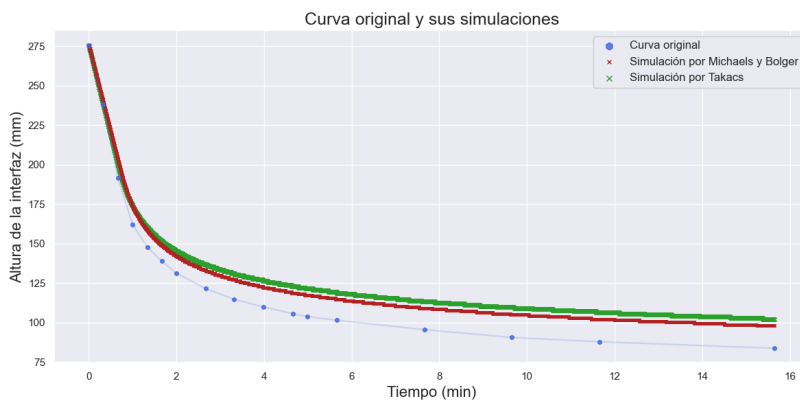
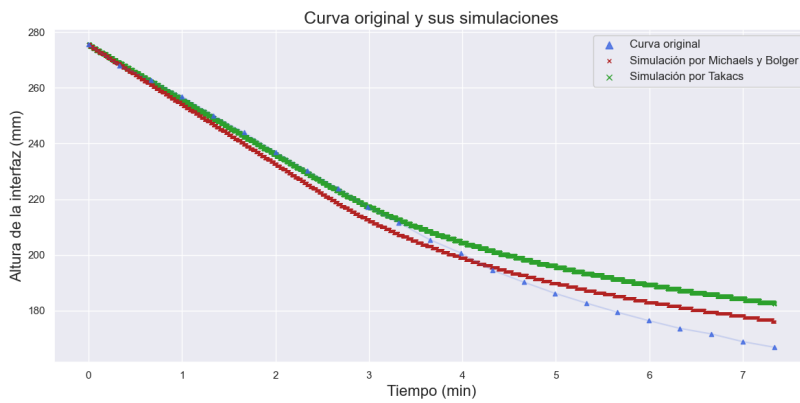


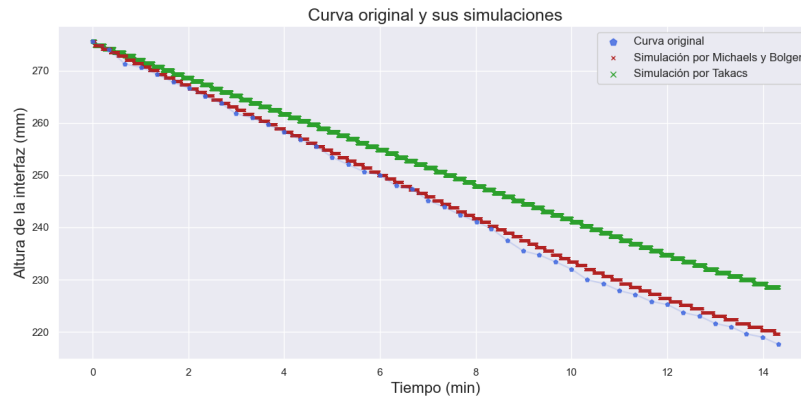
Figura 4.20: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [3].



(a) $\phi_0 = 20\%$



(b) $\phi_0 = 30\%$

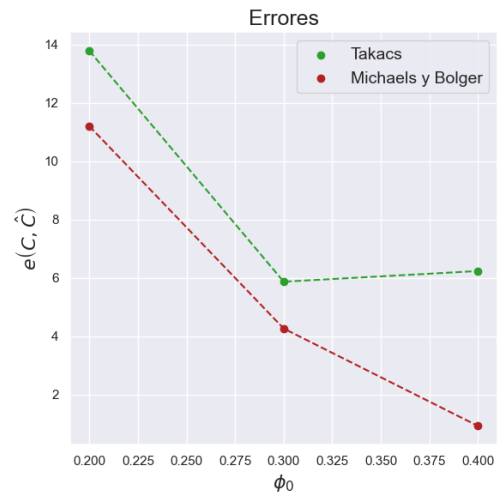


(c) $\phi_0 = 40\%$

Figura 4.21: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [3].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
0.2	13.7852	11.202
0.3	5.8715	4.2654
0.4	6.2372	0.9234
<i>EAP</i>	8.631	5.464

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.22: El método seleccionado para el conjunto [3] por el Selector es el de Michaels y Bolger (1962)

◇ Los ensayos del Conjunto [4] fueron realizados con partículas de dióxido de titanio en cilindros verticales de plexiglás con un diámetro interno de 5 cm. Los resultados son:

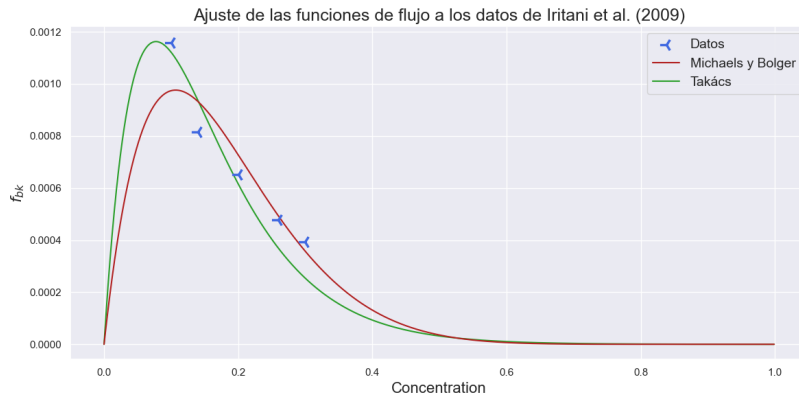
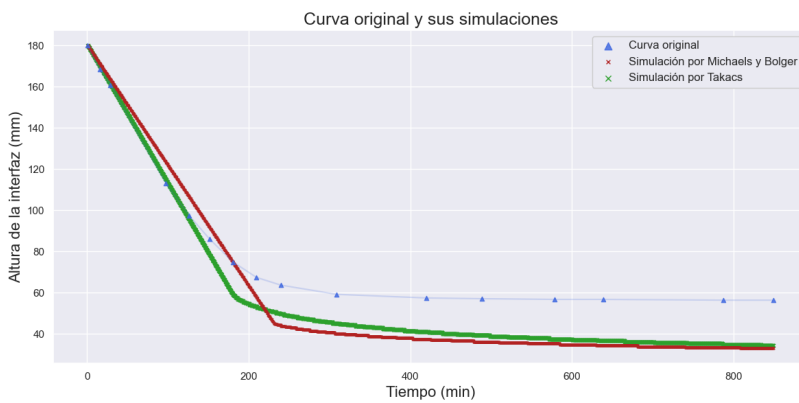
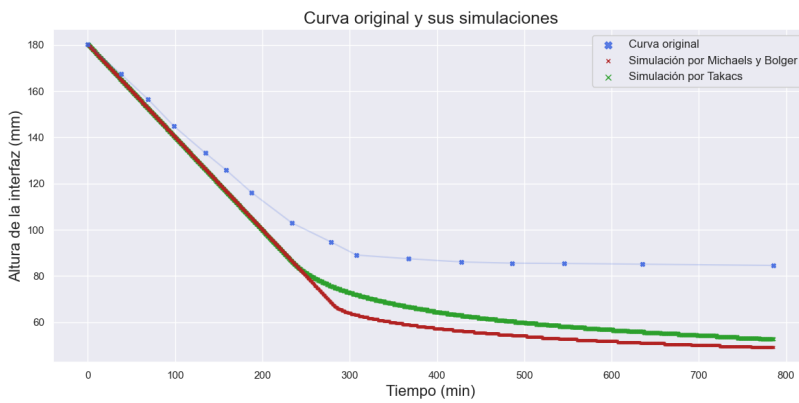


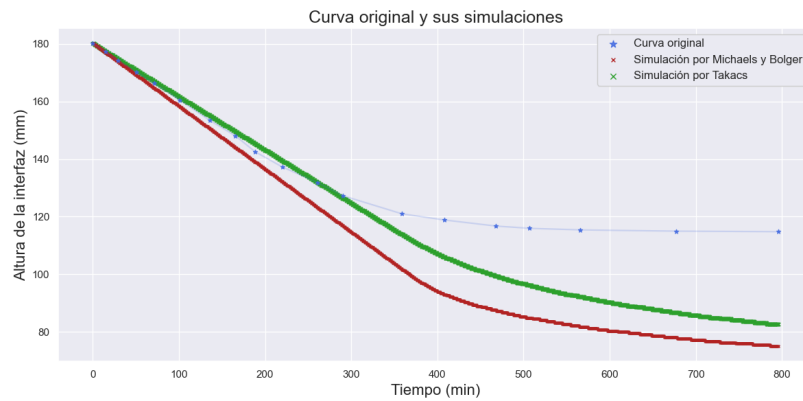
Figura 4.23: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [4].



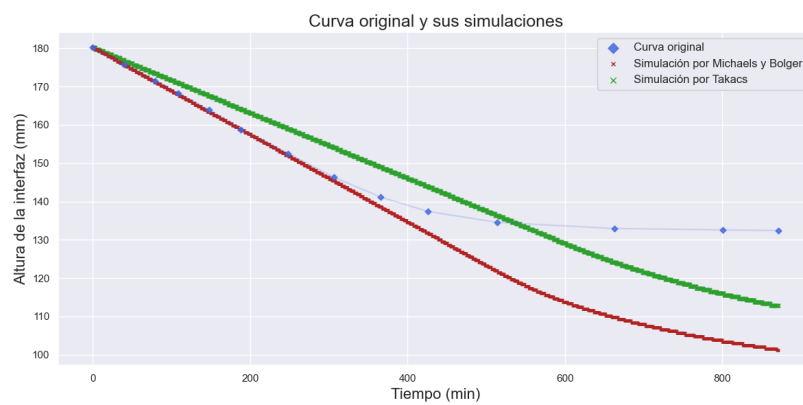
(a) $\phi_0 = 10\%$



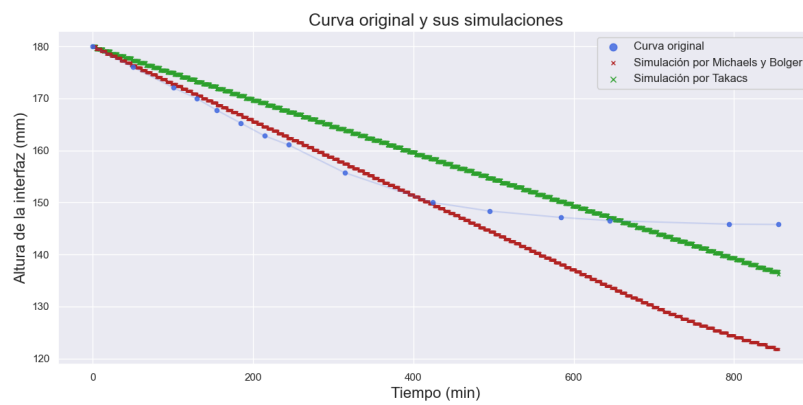
(b) $\phi_0 = 14\%$



(c) $\phi_0 = 20\%$



(d) $\phi_0 = 26\%$

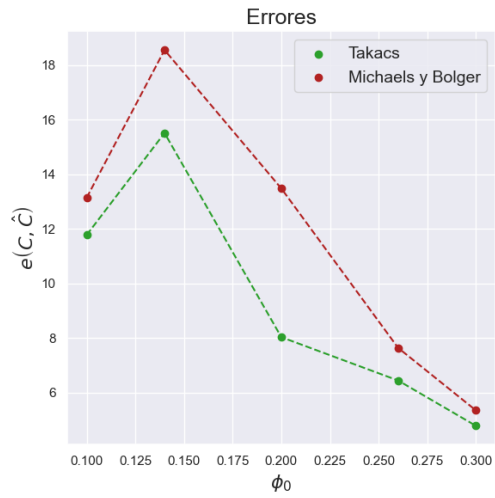


(e) $\phi_0 = 30\%$

Figura 4.24: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [4].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
0.1	11.78	13.1436
0.14	15.5131	18.5531
0.2	8.0364	13.4826
0.26	6.4493	7.6447
0.3	4.7884	5.3528
<i>EAP</i>	9.313	11.635

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.25: El método seleccionado para el conjunto [4] por el Selector es el de Takács

- ◇ Los curvas registradas del conjunto [5] fueron medidas con lodos activados de una planta de tratamiento de aguas residuales de Razgrad, Bulgaria. Los resultados son:

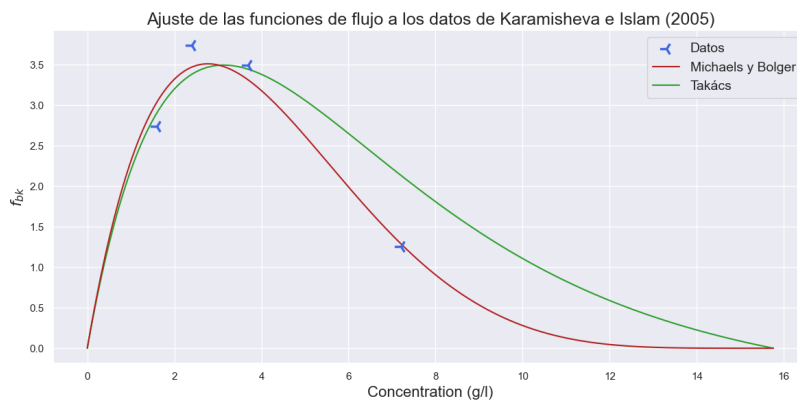
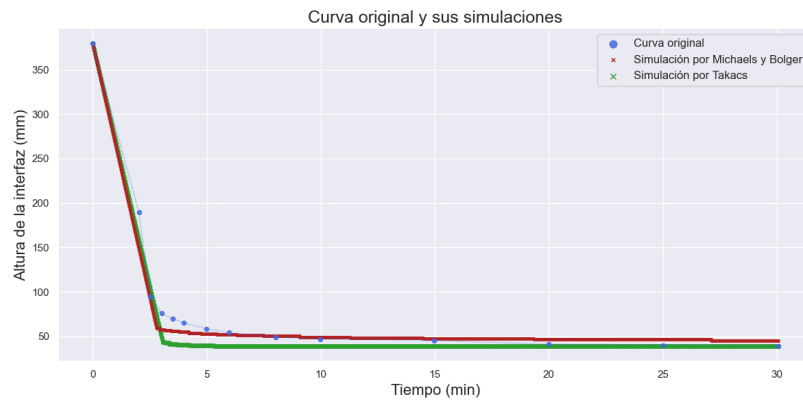
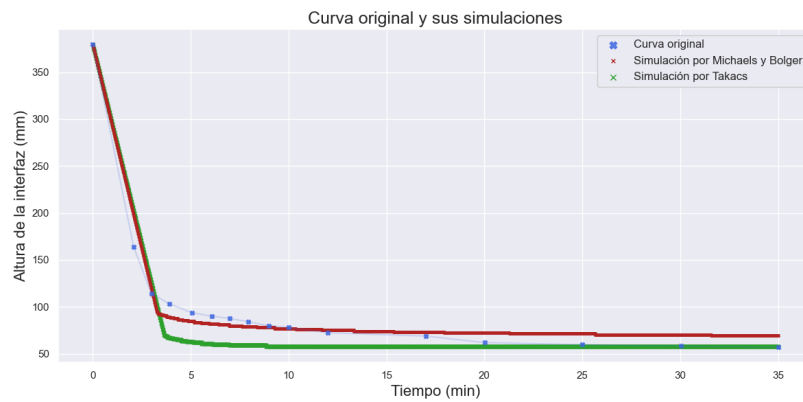


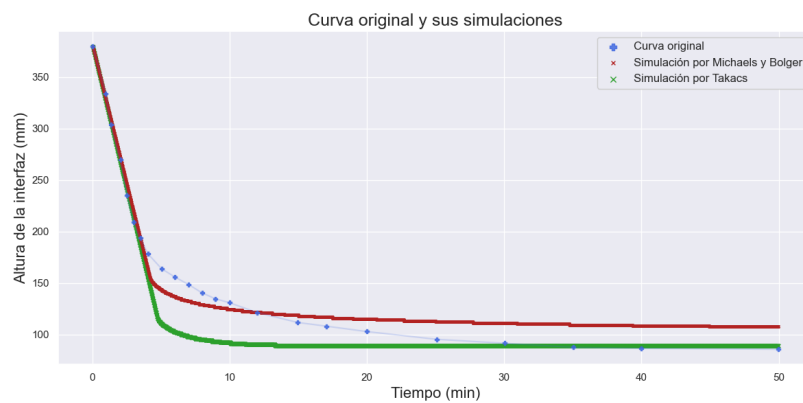
Figura 4.26: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [5].



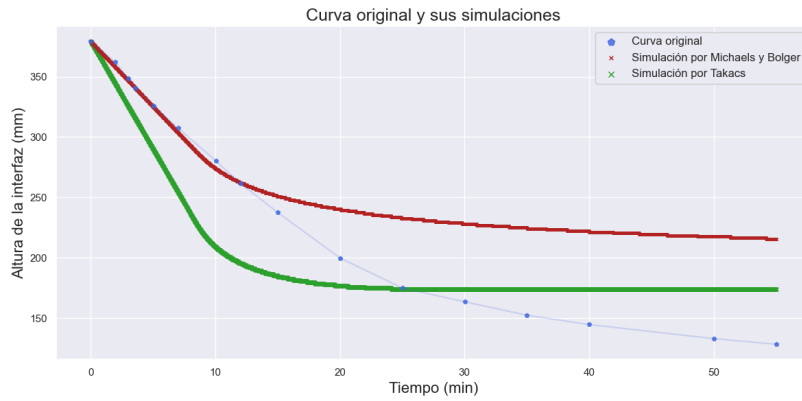
(a) $\phi_0 = 1.6 \text{ g/l}$



(b) $\phi_0 = 2.4 \text{ g/l}$



(c) $\phi_0 = 3.7 \text{ g/l}$

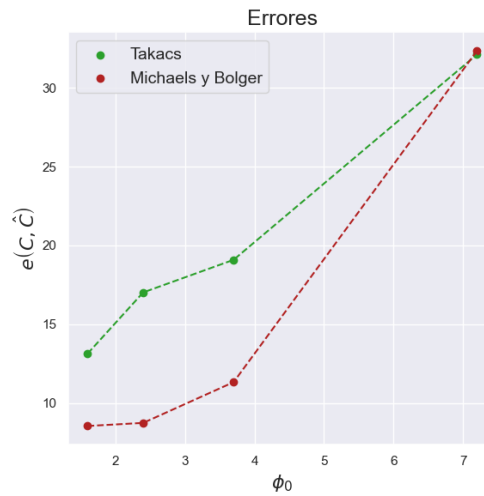


(d) $\phi_0 = 7.2 \text{ g/l}$

Figura 4.26: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [5].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takacs	Michaels
1.6	13.1398	8.5513
2.4	17.0228	8.7472
3.7	19.0907	11.3314
7.2	32.1103	32.3399
<i>EAP</i>	20.341	15.242

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.27: El método seleccionado para el conjunto [5] por el Selector es el de Michaels y Bolger (1962)

- ◇ Los ensayos del conjunto [6] fueron realizados con lodos activados de la planta de tratamiento de aguas residuales del sindicato Rosenmeer (Rosheim, Francia, Bajo Rin). Los resultados son:

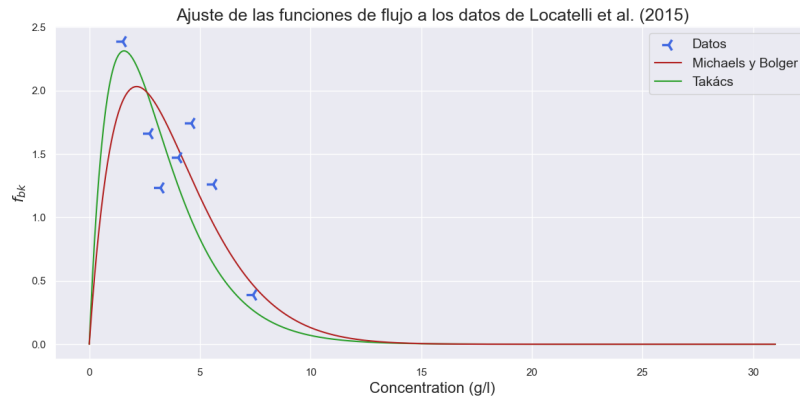
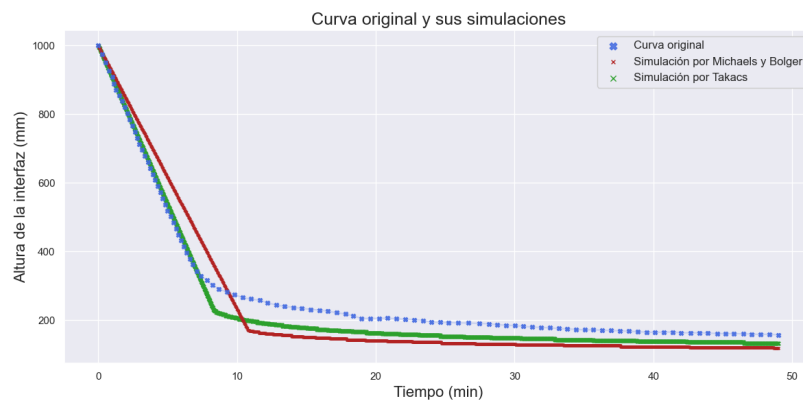
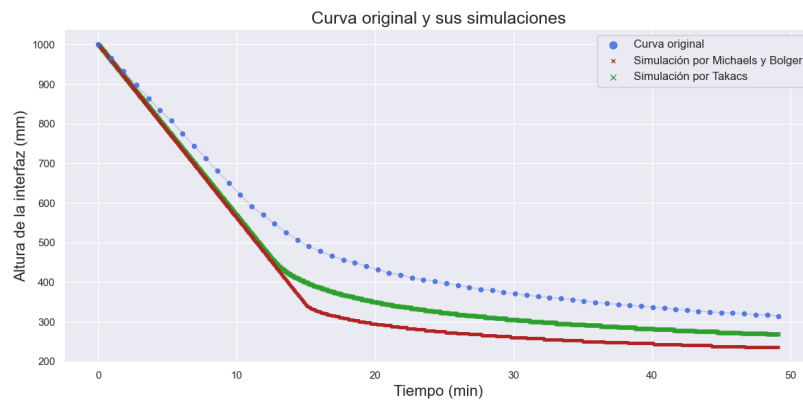


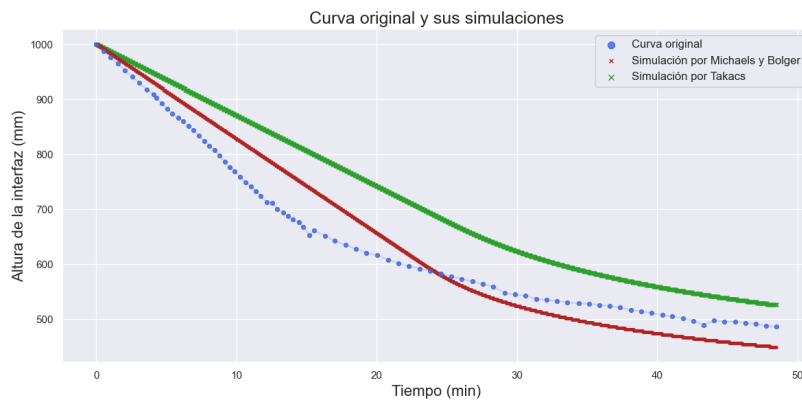
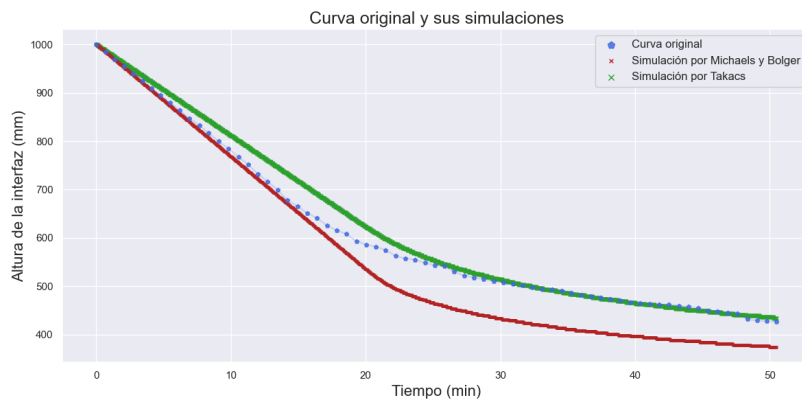
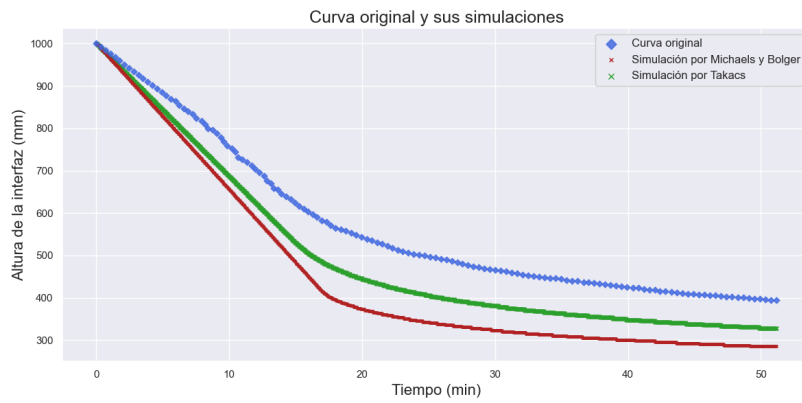
Figura 4.28: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [6].

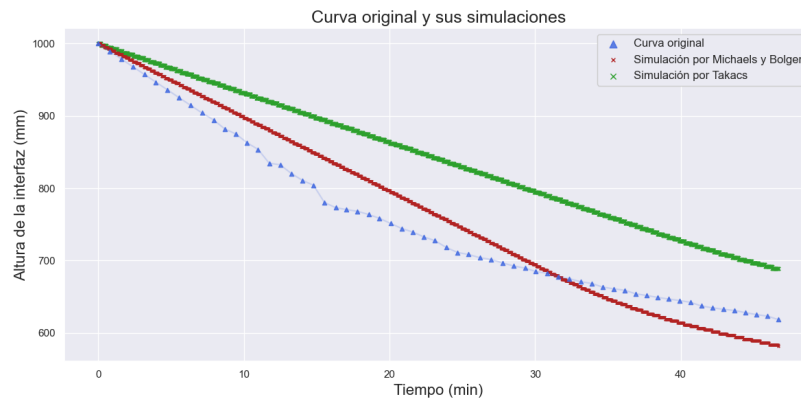


(a) $\phi_0 = 1.5 \text{ g/l}$

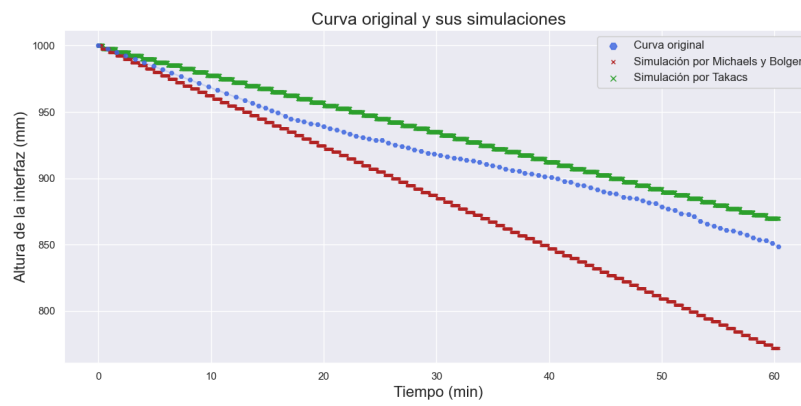


(b) $\phi_0 = 2.7 \text{ g/l}$





(f) $\phi_0 = 5.6 \text{ g/l}$

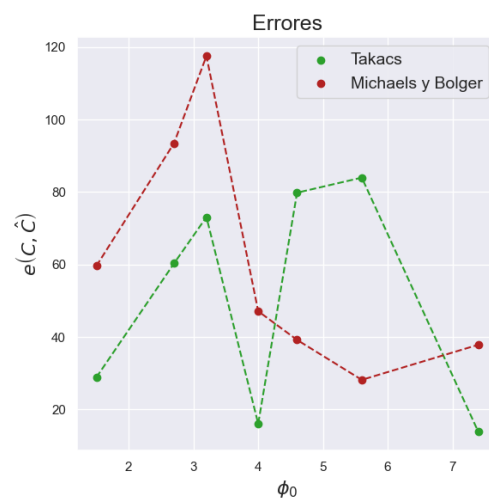


(g) $\phi_0 = 7.4 \text{ g/l}$

Figura 4.29: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [6].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
1.5	28.8579	59.5867
2.7	60.3051	93.4852
3.2	73.0885	117.5251
4.0	16.0572	47.1041
4.6	79.8091	39.1933
5.6	83.968	28.1671
7.4	13.8235	37.851
EAP	50.844	60.416

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.30: El método seleccionado para el conjunto [6] por el Selector es el de Takács

- ◇ Los experimentos de sedimentación del conjunto [7] fueron realizados con lodos activados de la planta de tratamiento de aguas residuales de Lundtoffe (Lyngby, Dinamarca). Los resultados son:

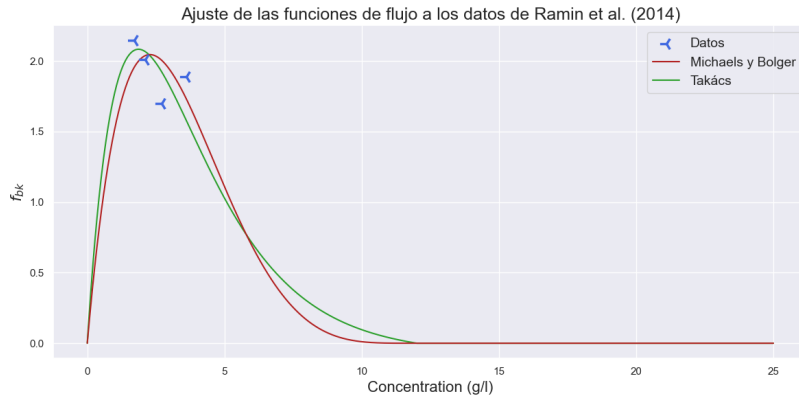
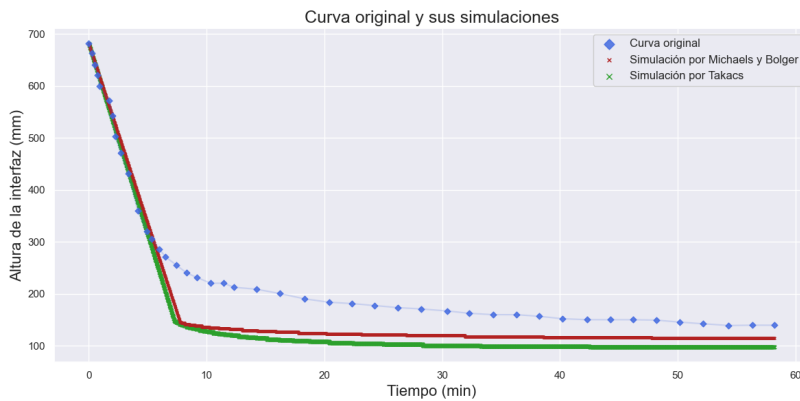
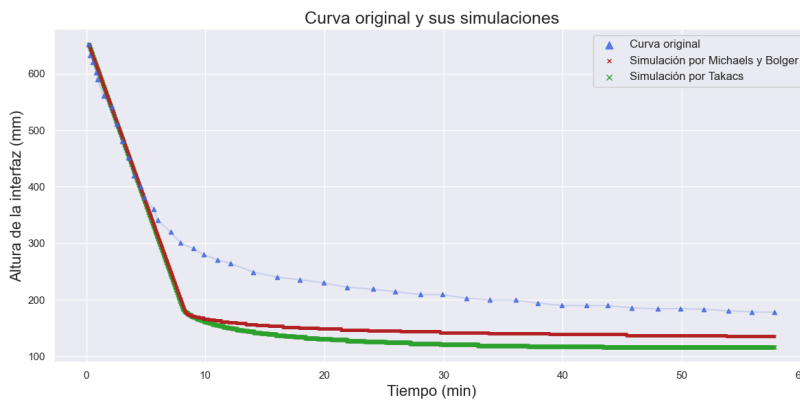


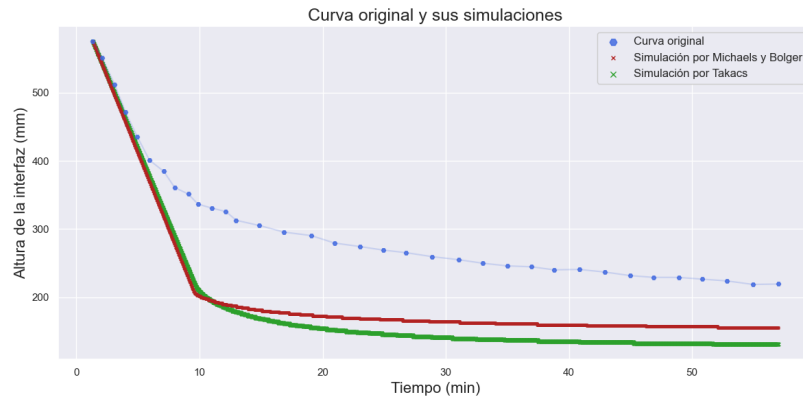
Figura 4.31: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [7].



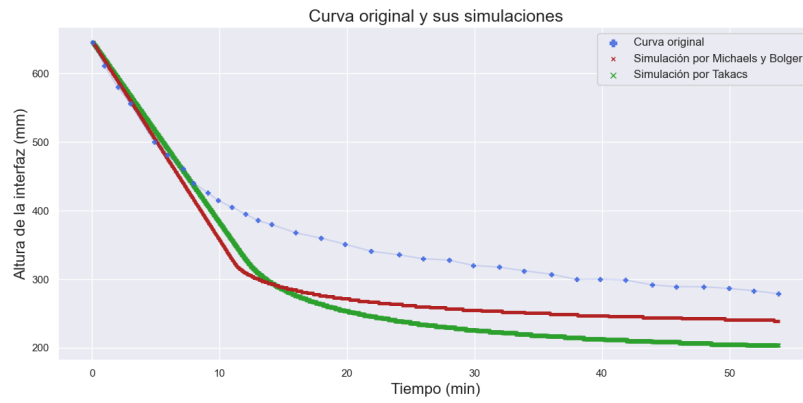
(a) $\phi_0 = 1.7 \text{ g/l}$



(b) $\phi_0 = 2.1 \text{ g/l}$



(c) $\phi_0 = 2.7 \text{ g/l}$

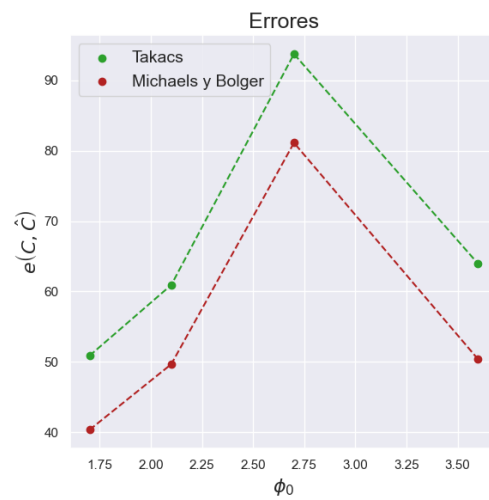


(d) $\phi_0 = 3.6 \text{ g/l}$

Figura 4.32: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [7].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
1.7	50.8634	40.3317
2.1	60.9206	49.6618
2.7	93.7345	81.118
3.6	63.9482	50.3741
<i>EAP</i>	67.367	55.371

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.33: El método seleccionado para el conjunto [7] por el Selector es el de Takács

- ◇ Los experimentos de sedimentación del conjunto [8] fueron realizados con lodos activados de la planta de tratamiento de aguas residuales de Lynetten (Lyngby, Dinamarca). Los resultados son:

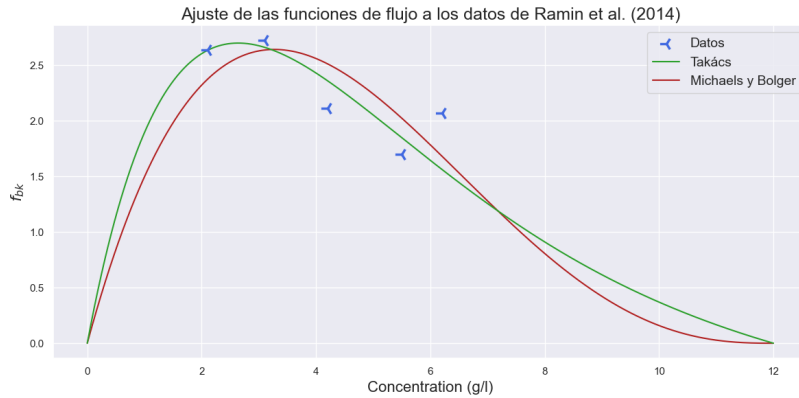
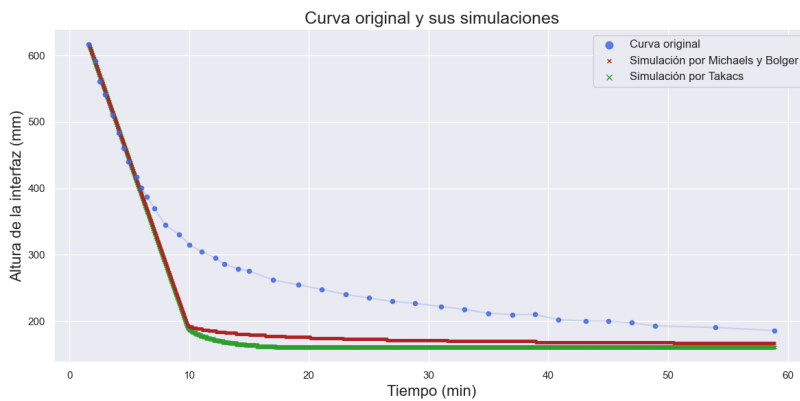
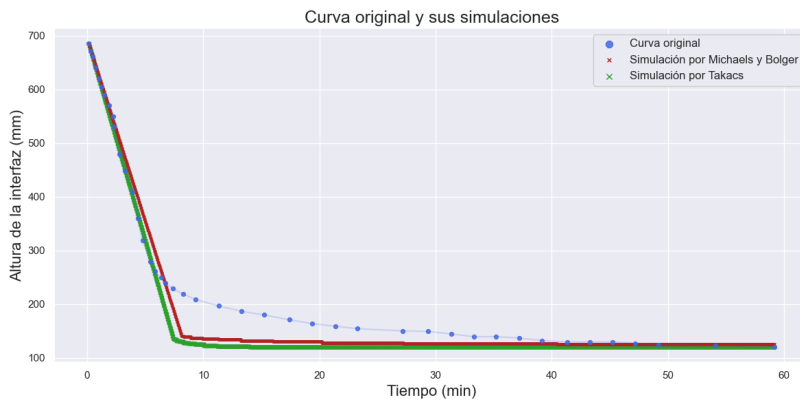
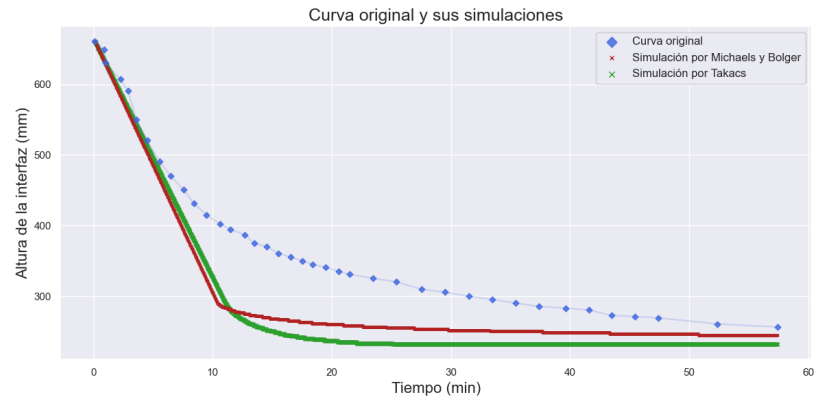
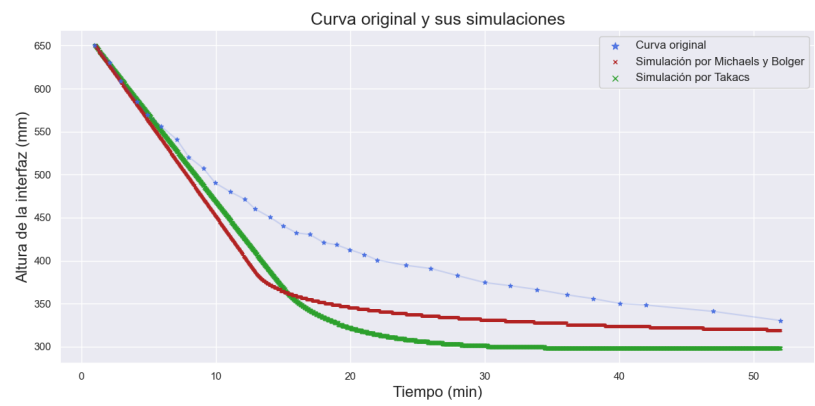


Figura 4.34: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [8].

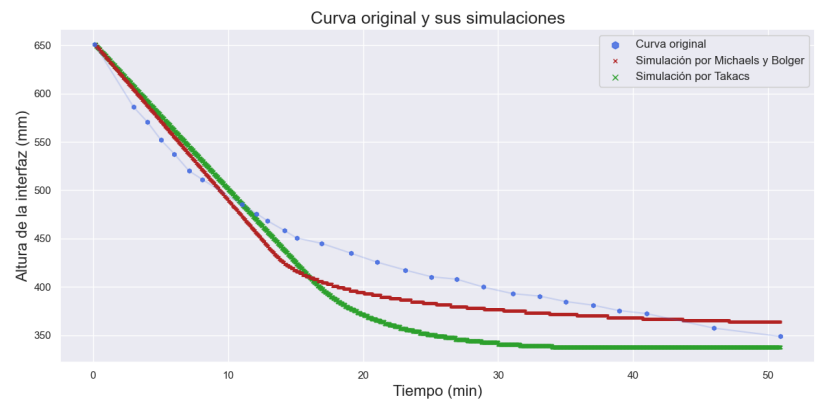




(b) $\phi_0 = 4.2 \text{ g/l}$



(c) $\phi_0 = 5.5 \text{ g/l}$

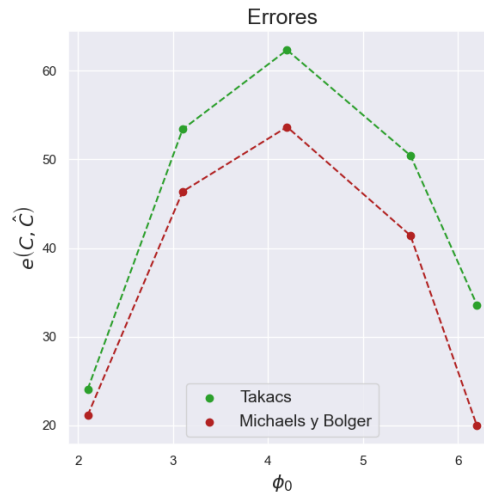


(d) $\phi_0 = 6.2 \text{ g/l}$

Figura 4.36: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [8].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
2.1	24.0854	21.1411
3.1	53.388	46.3658
4.2	62.3231	53.6524
5.5	50.4264	41.4108
6.2	33.5964	19.9615
<i>EAP</i>	44.764	36.506

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.37: El método seleccionado para el conjunto [8] por el Selector es el de Michaels y Bolger (1962)

- ◇ El sólido utilizado en el conjunto [9] fue microesferas de vidrio. Los resultados son:

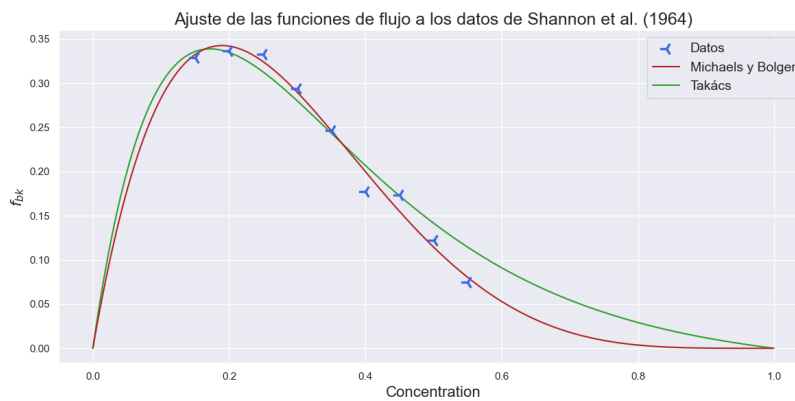
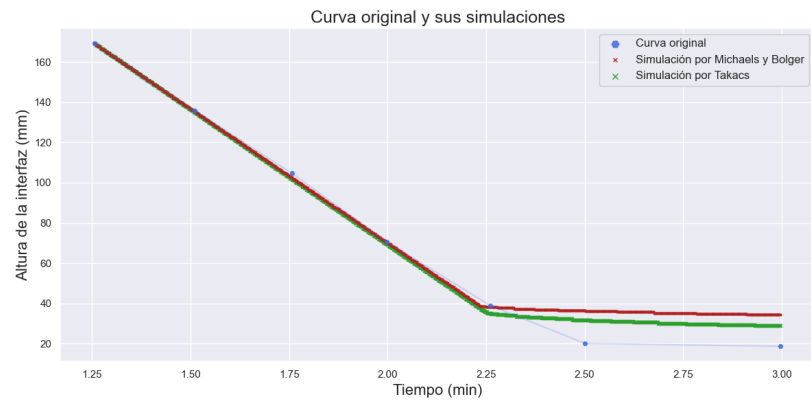
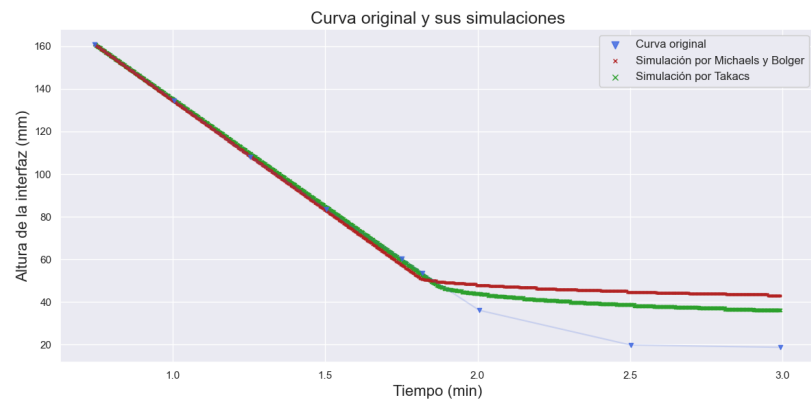


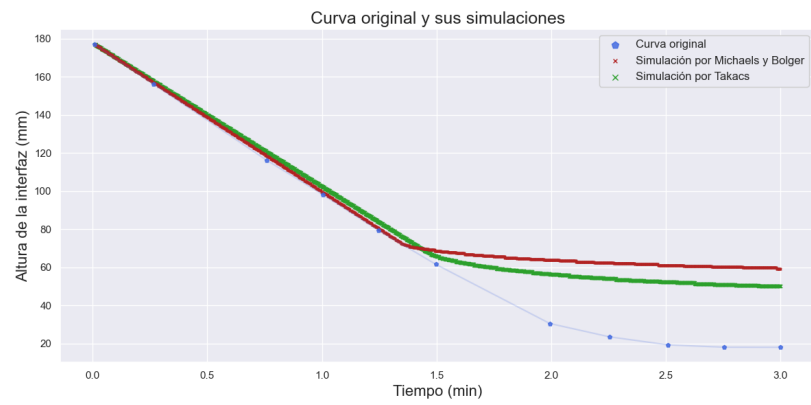
Figura 4.38: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [9].



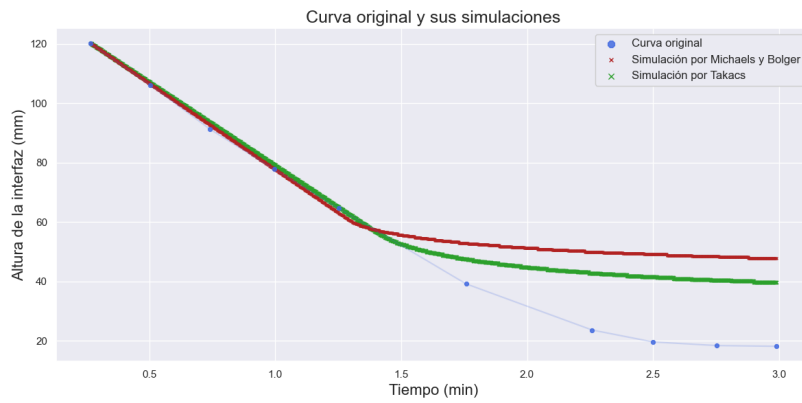
(a) $\phi_0 = 15\%$



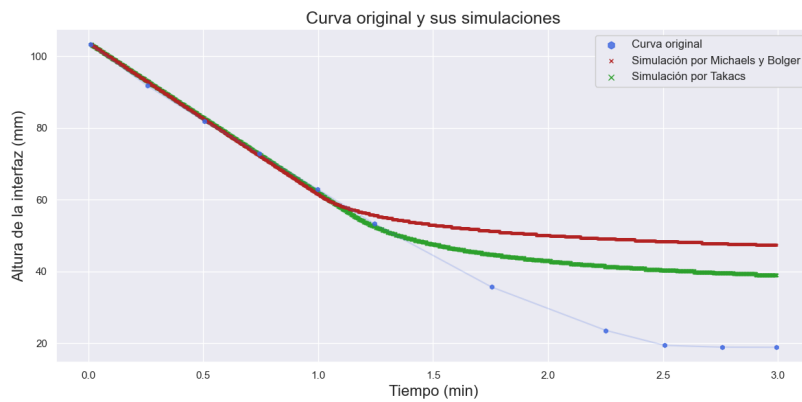
(a) $\phi_0 = 20\%$



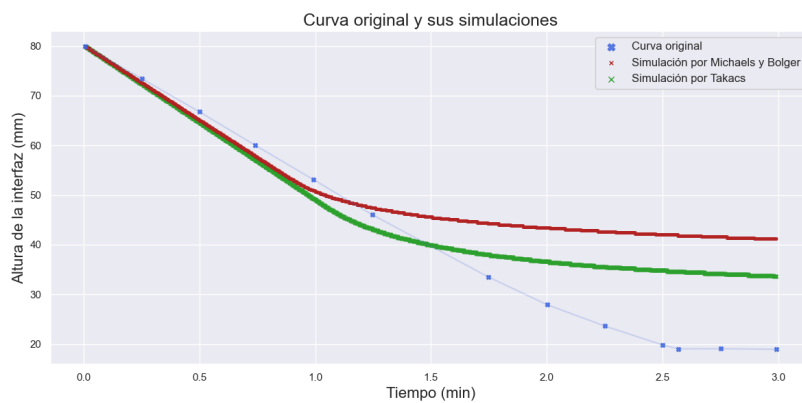
(b) $\phi_0 = 25\%$



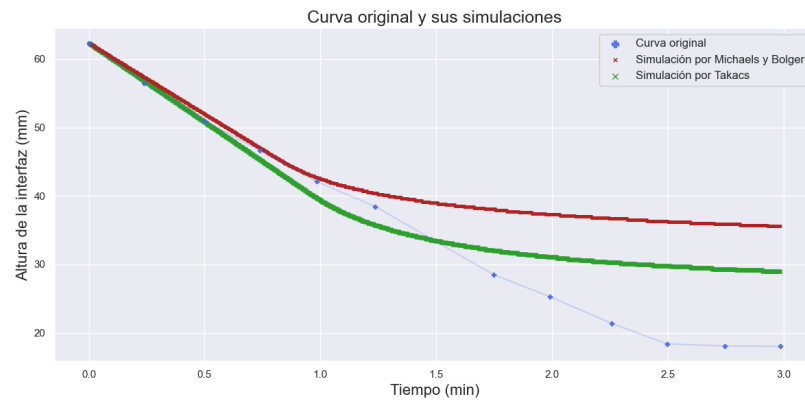
(c) $\phi_0 = 30\%$



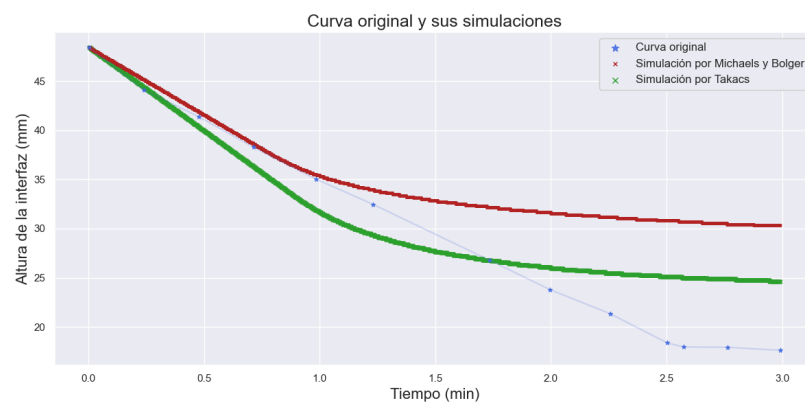
(d) $\phi_0 = 35\%$



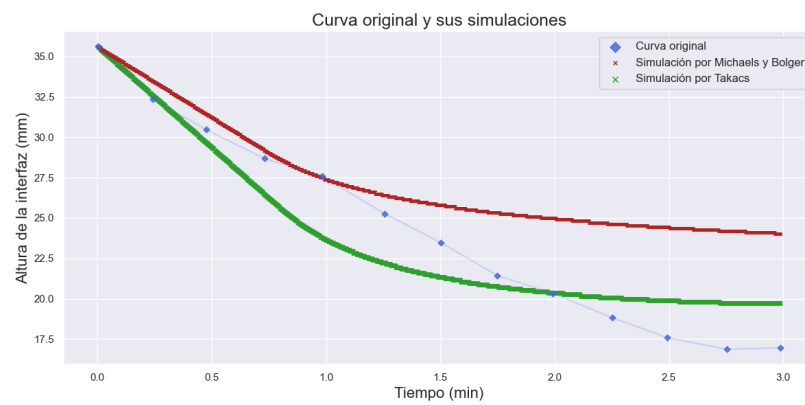
(e) $\phi_0 = 40\%$



(f) $\phi_0 = 45\%$



(g) $\phi_0 = 50\%$

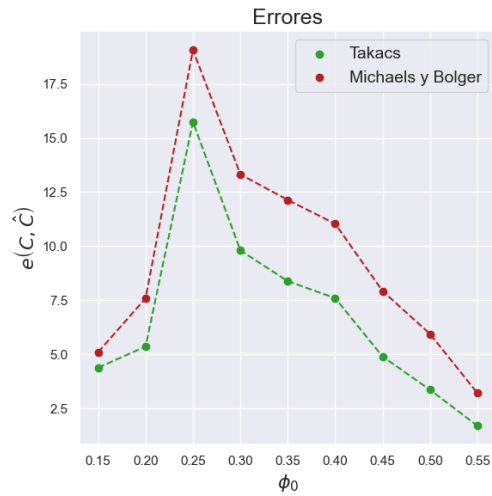


(h) $\phi_0 = 55\%$

Figura 4.40: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [9].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
0.15	4.3821	5.0995
0.2	5.3582	7.5876
0.25	15.739	19.0651
0.3	9.8039	13.3157
0.35	8.3787	12.135
0.4	7.5954	11.0314
0.45	4.8951	7.9227
0.5	3.3588	5.9396
0.55	1.6935	3.2075
<i>EAP</i>	6.801	9.478

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.41: El método seleccionado para el conjunto [9] por el Selector es el de Takács

◇ Los lodos activados utilizados en los experimentos de sedimentación del conjunto [10] proceden de un reactor discontinuo de secuenciación (SBR) a escala piloto que funciona en la sala experimental del Ministerio de Medio Ambiente de Canadá. Los resultados son:

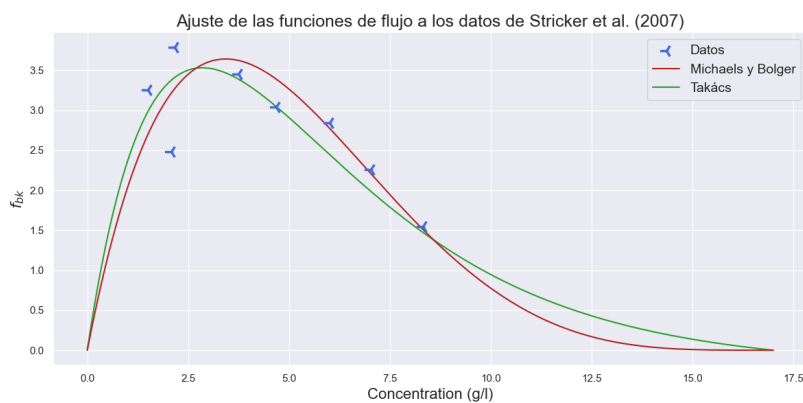
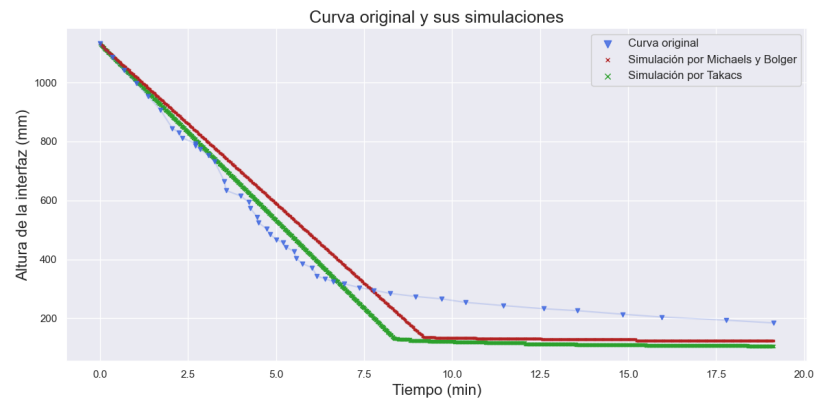
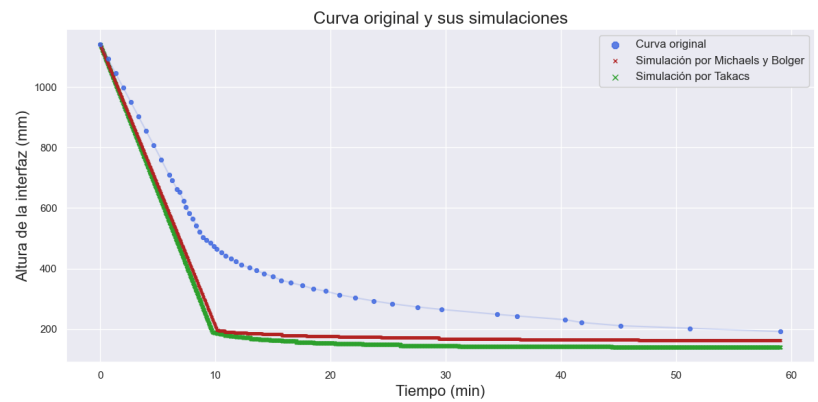


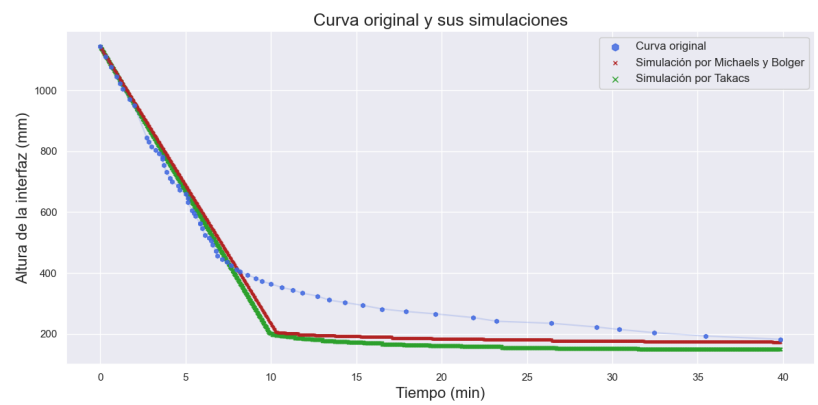
Figura 4.42: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [10].



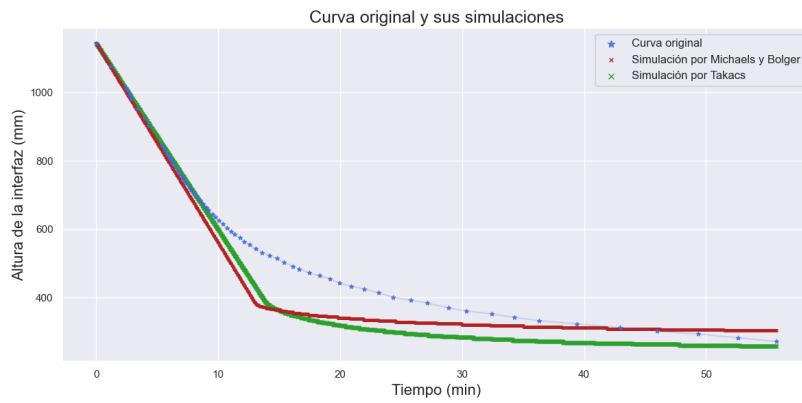
(a) $\phi_0 = 1.502 \text{ g/l}$



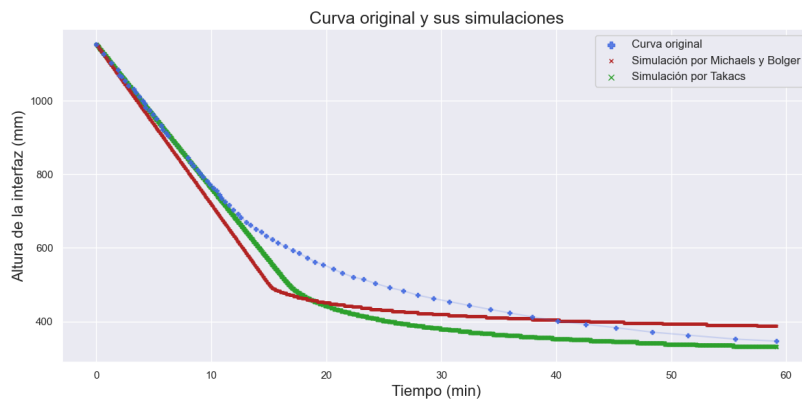
(b) $\phi_0 = 2.082 \text{ g/l}$



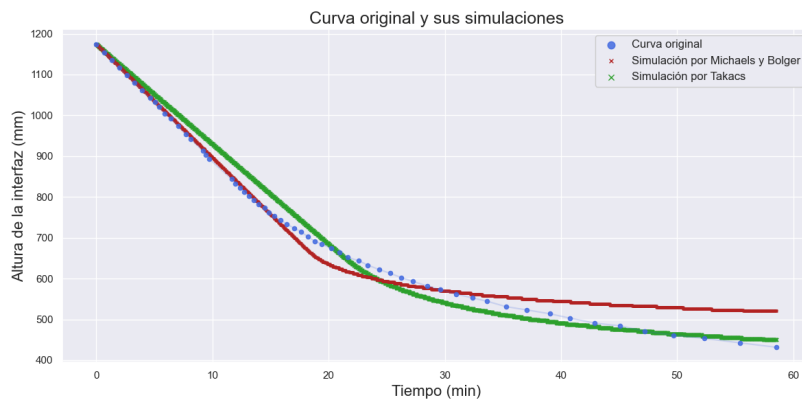
(c) $\phi_0 = 2.160 \text{ g/l}$



(d) $\phi_0 = 3.740 \text{ g/l}$



(e) $\phi_0 = 4.680 \text{ g/l}$



(f) $\phi_0 = 6.005 \text{ g/l}$

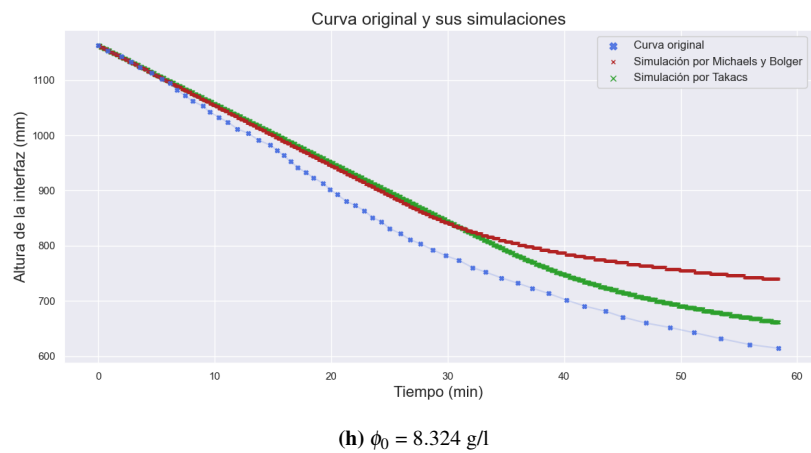
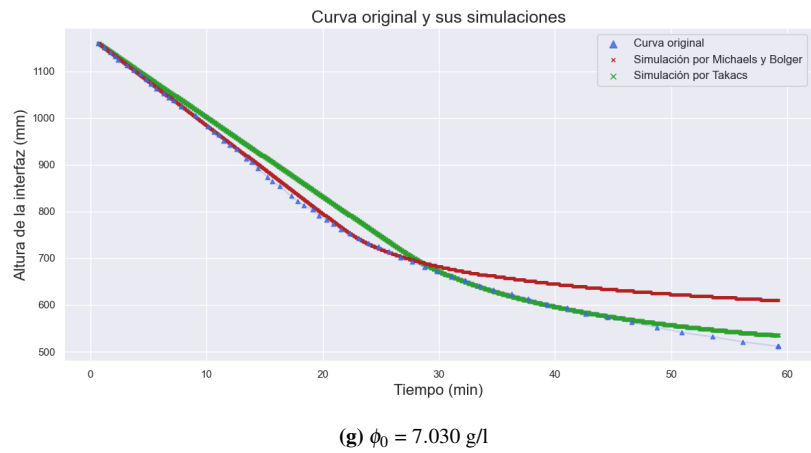
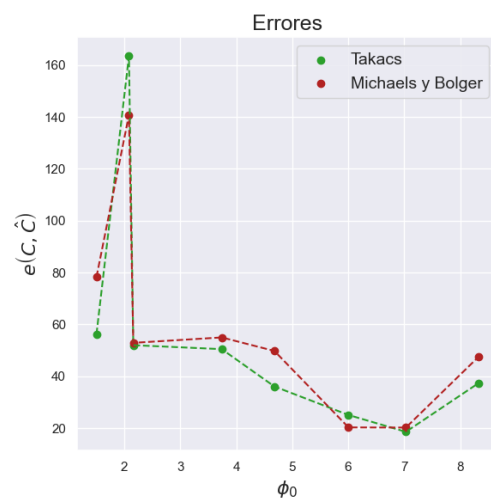


Figura 4.43: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [10].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
1.502	56.1883	78.2376
2.082	163.5024	140.7602
2.16	51.9728	52.8709
3.74	50.4362	54.9623
4.68	36.0543	49.7497
6.005	25.0368	20.2516
7.03	18.5454	20.1922
8.324	37.2703	47.3946
EAP	54.876	58.052

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.44: El método seleccionado para el conjunto [10] por el Selector es el de Takács

◇ Resultados del Conjunto [11]:

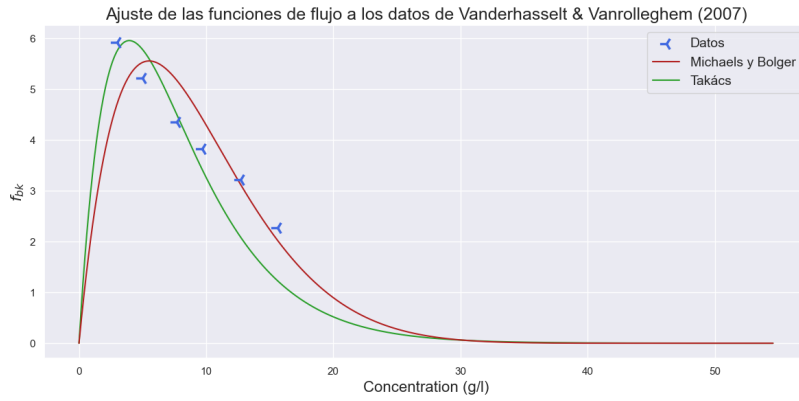
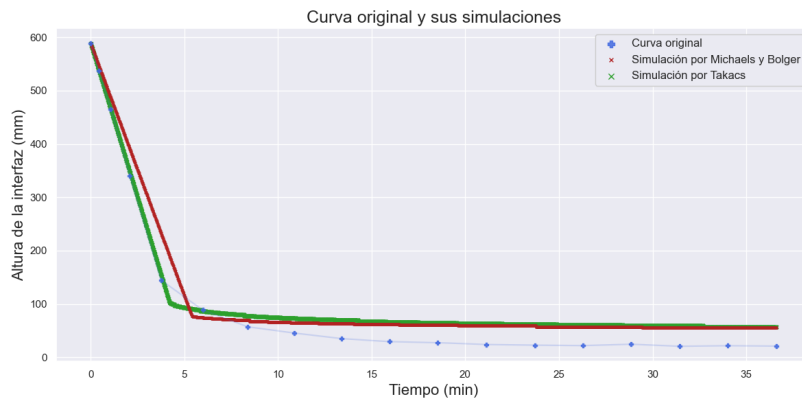
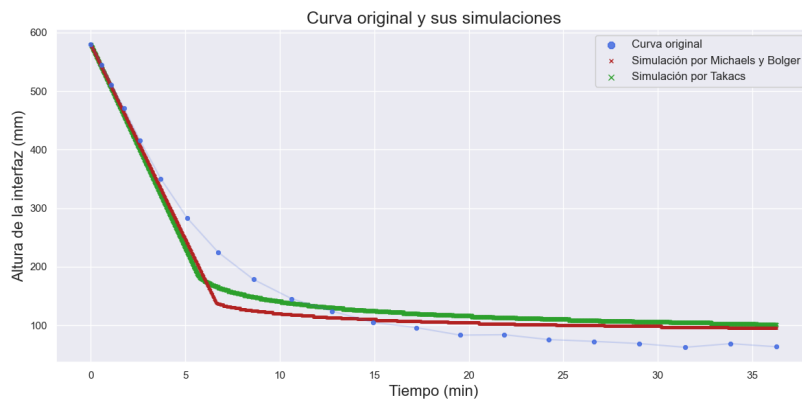


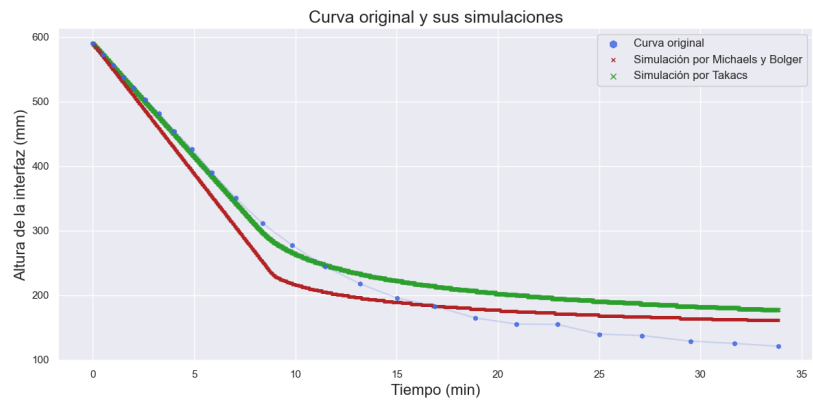
Figura 4.45: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [11].



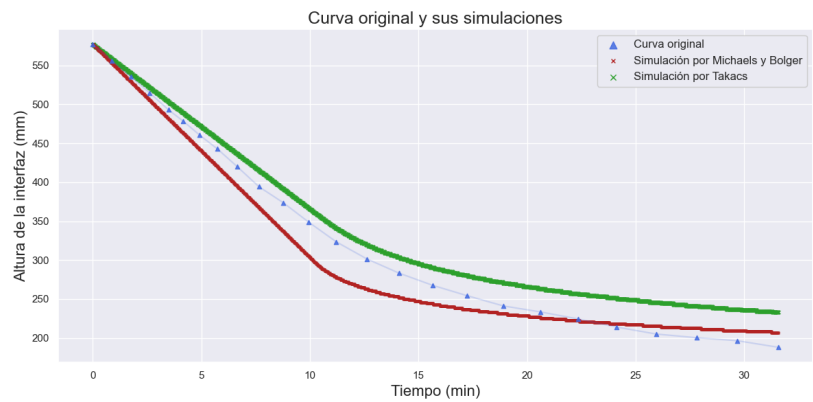
(a) $\phi_0 = 3.0 \text{ g/l}$



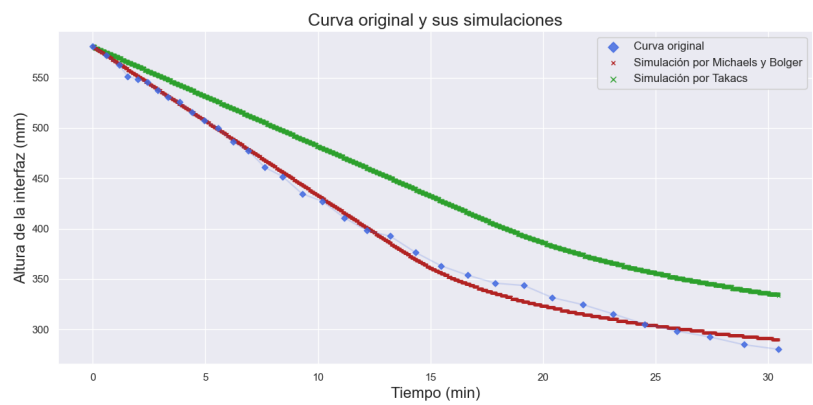
(b) $\phi_0 = 5.0 \text{ g/l}$



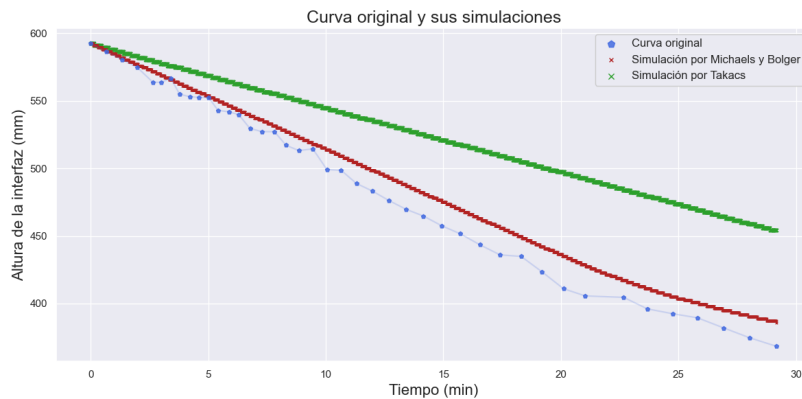
(c) $\phi_0 = 7.7 \text{ g/l}$



(d) $\phi_0 = 9.7 \text{ g/l}$



(e) $\phi_0 = 12.7 \text{ g/l}$

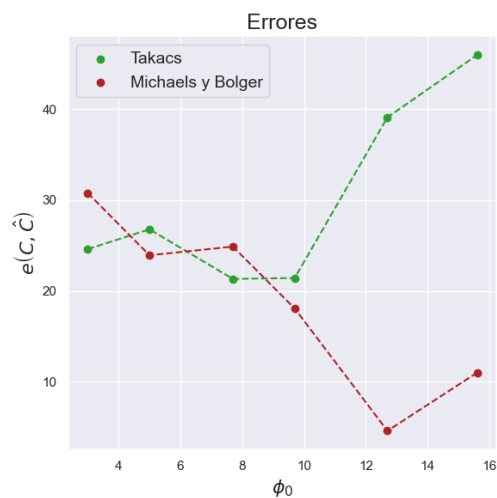


(f) $\phi_0 = 15.6 \text{ g/l}$

Figura 4.46: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [11].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takács	Michaels
3.0	24.6018	30.7808
5.0	26.781	23.927
7.7	21.3224	24.8803
9.7	21.426	18.0644
12.7	39.1042	4.6072
15.6	45.9614	11.0035
EAP	29.866	18.877

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.47: El método seleccionado para el conjunto [11] por el Selector es el de Takács

◇ Las curvas del conjunto [12] fueron registradas por el presente memorista con el instrumento de medición *Interface Tracker* de [Hibring](#) con relave minero de Andacollo. Los Resultados son:

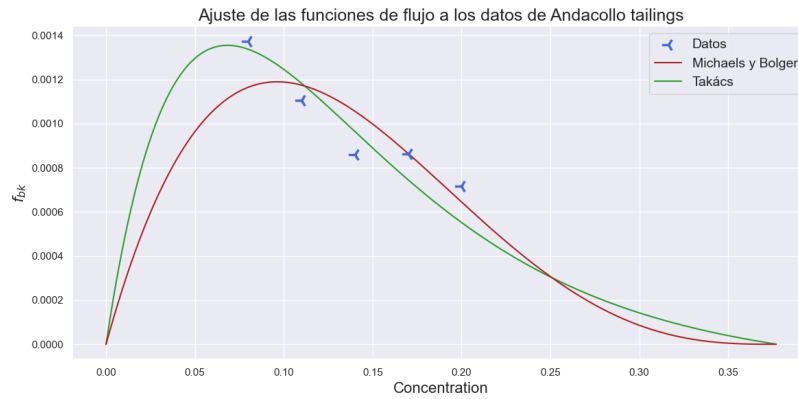
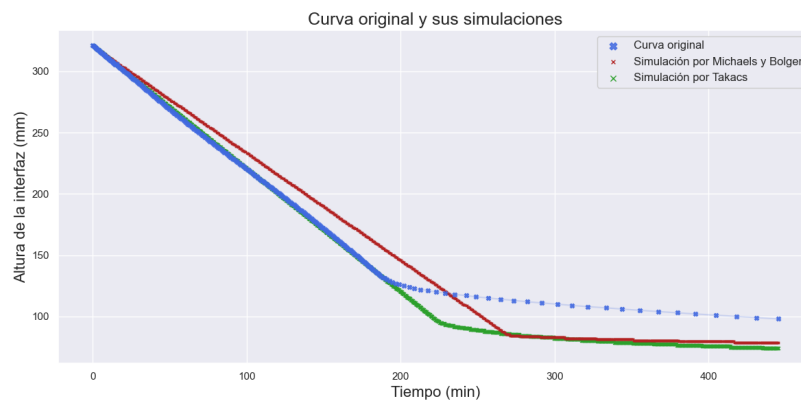
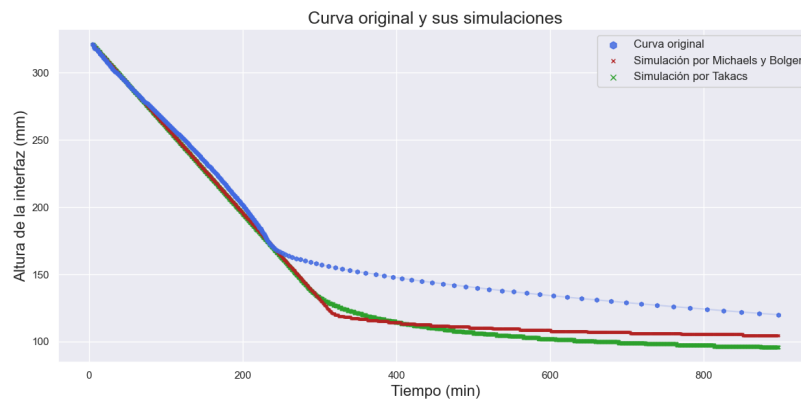


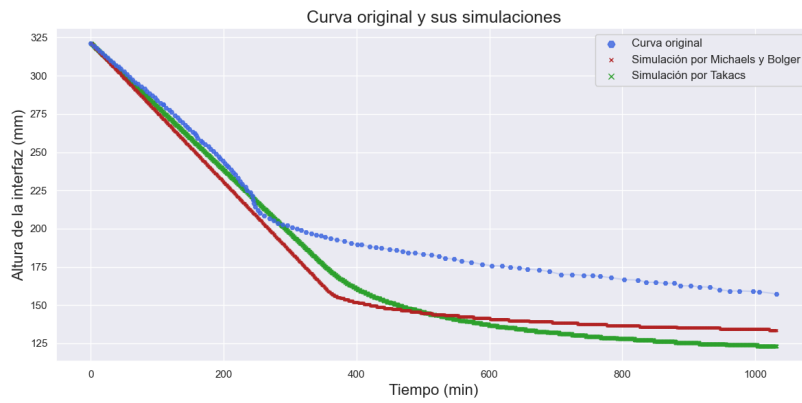
Figura 4.48: Comparación de ambos modelos de f_{bk} del conjunto [12].



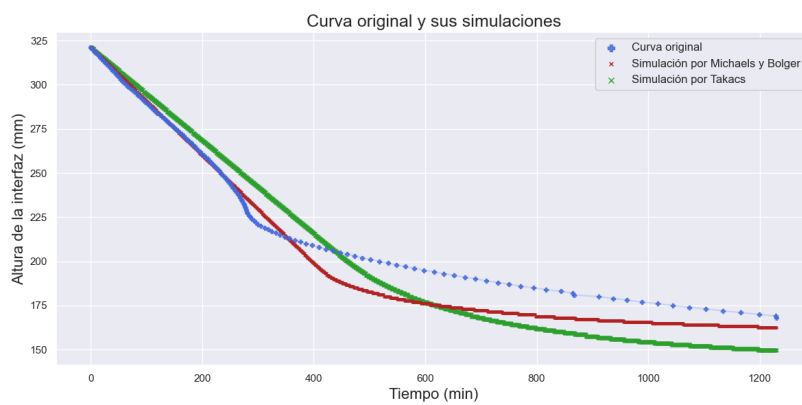
(a) $\phi_0 = 8\%$



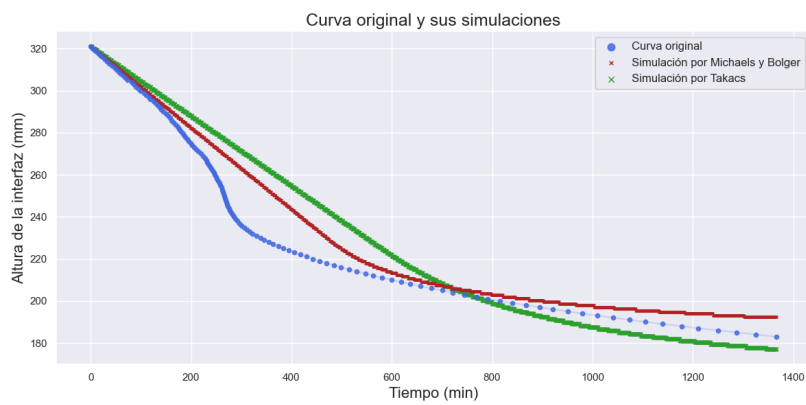
(b) $\phi_0 = 11\%$



(c) $\phi_0 = 14\%$



(d) $\phi_0 = 17\%$

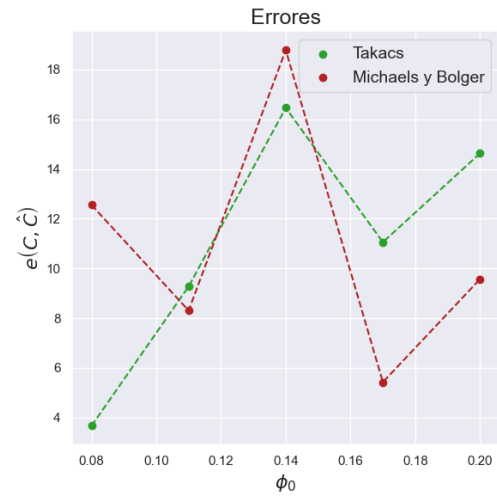


(e) $\phi_0 = 20\%$

Figura 4.48: Curvas simuladas de cada ensayo del conjunto [12].

ϕ_0	$e(C, \hat{C})$	
	Takacs	Michaels
0.08	3.6699	12.553
0.11	9.2747	8.3063
0.14	16.4584	18.7850
0.17	11.0568	5.4263
0.2	14.6264	9.5695
e_T	11.0173	10.9280

(a) Tabla de errores



(b) Gráfica de errores

Figura 4.49: El método seleccionado para el conjunto [12] por el Selector es el de Takács

Referencia	Modelo			
	Takács		Michaels y Bolger	
	k	n	k	n
[1]	4.3055	0.7087	3.6304	13.2812
[2]	0.9067	5.6657	0.8571	4.6612
[3]	63.677	17.569	21.327	11.267
[4]	0.040838	12.924	0.023504	8.3623
[5]	3.0311	0.313	3.1354	4.688
[6]	4.0003	0.63621	2.4891	13.474
[7]	3.0361	0.53355	2.2002	4.2559
[8]	2.781	0.36669	1.8861	2.6658
[9]	5.353	5.7628	4.4394	4.2766
[10]	3.3656	0.34803	2.5888	3.9548
[11]	4.0988	0.25316	2.599	8.8956
[12]	0.05387	14.45861	0.02919	2.92101

Cuadro 4.5: Resultados del ajuste de parámetros de los modelos (3.4) y (3.5) para cada conjunto del Cuadro 4.1.

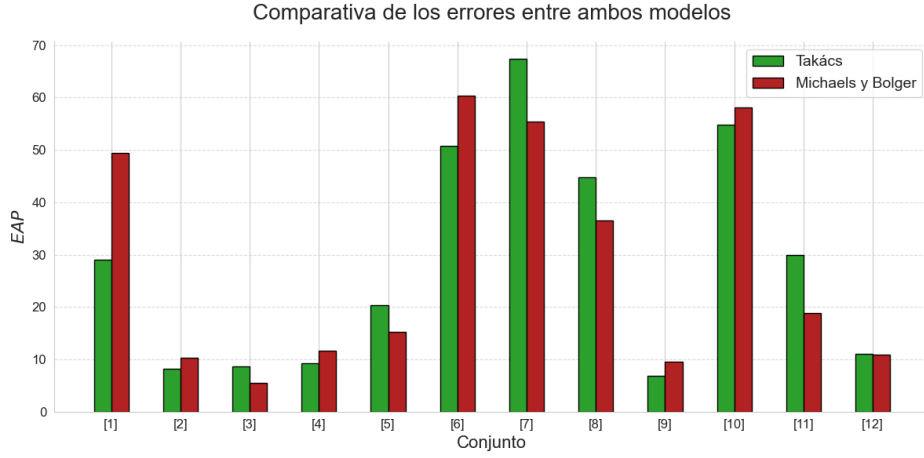


Figura 4.50: Gráfico comparativo de los errores de ajuste promedio EAP para los modelos propuestos por Takács, y Michaels y Bolger. En la mitad de los 12 conjuntos analizados el modelo de Takács presentó un valor de EAP menor que el modelo de Michaels y Bolger.

4.3. Sensibilidad de los resultados

Un aspecto relevante a considerar en el análisis de los resultados obtenidos con el Selector de funciones de flujo es la sensibilidad en relación al número de capas N utilizados en el esquema numérico. Para evaluar este aspecto, se realizaron simulaciones con $N = 100, 200, 400, 800$ y 3200 en los conjuntos [5] y [9]. La comparación de las gráficas de error puede apreciarse en la Figura 4.51.

En las Tablas 4.6 y 4.7 se presentan los resultados obtenidos para los conjuntos de curvas de sedimentación [5] y [11] respectivamente. En cada tabla se muestran los valores del Error Absoluto Promedio resultante con N capas $(EAP)_N$ y su diferencia con $(EAP)_{3200}$ (considerado como la solución exacta) por medio de

$$(EAP)_N^* := |(EAP)_N - (EAP)_{3200}|. \quad (4.3)$$

Además, se calculó el orden de convergencia en función de N como

$$r = \log_2 \left(\frac{(EAP)_N}{(EAP)_{2N}} \right). \quad (4.4)$$

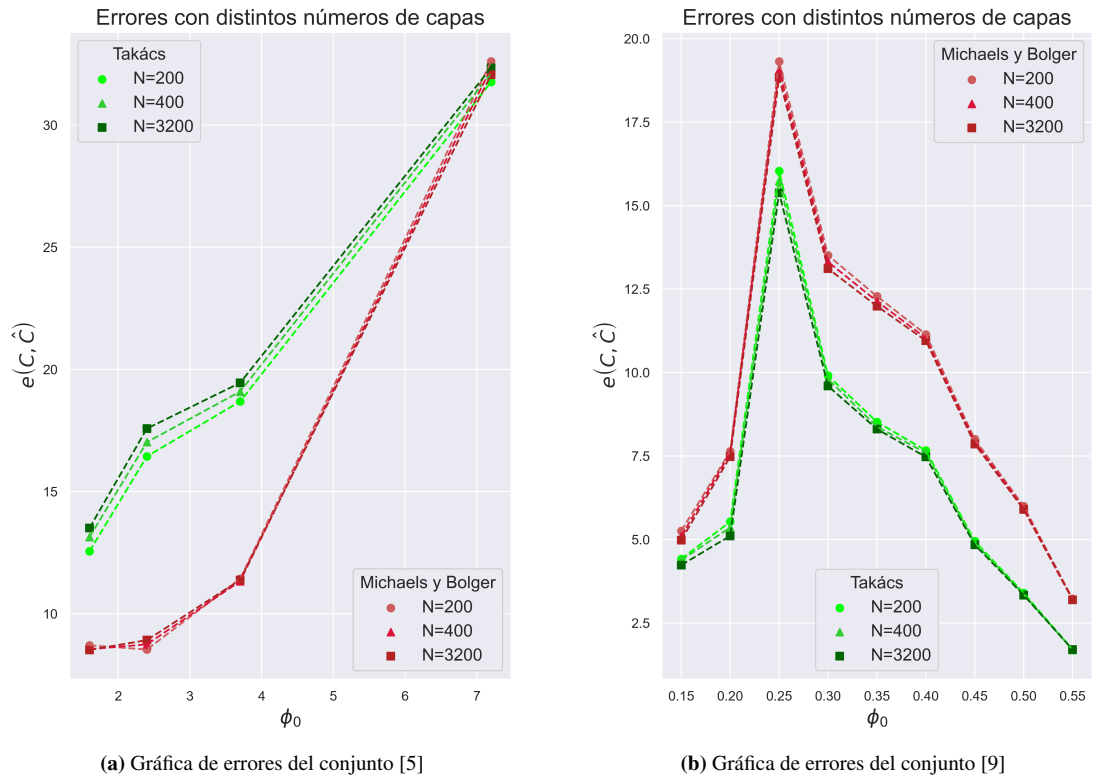


Figura 4.51: Comparación de gráficas de error con $N = 200, 400, 3200$.

De acuerdo con los resultados obtenidos, se puede afirmar que $(EAP)_N$ exhibe una convergencia, en su mayoría con un orden r superior a 1, indicando una convergencia al menos lineal conforme N se incrementa. Adicionalmente, se ha observado una consistencia en la elección del modelo de función de flujo por parte del Selector, independiente del valor de N elegido, al menos en los conjuntos [5] y [9]. Este comportamiento sugiere que un valor de $N = 400$ podría ser adecuado para obtener una elección precisa del mejor modelo de función de flujo. Esta suposición se ve respaldada por el hecho de que las diferencias en las curvas de error en la Figura 4.51 entre $N = 400$ y $N = 3200$ resultan en su mayoría mínimas, y también por valores de $(EAP)_N^* < 1$, con lo cual es poco probable que afecten la decisión del Selector. Por lo tanto, a pesar de que un valor de N más grande puede proporcionar una precisión marginalmente mayor, su inclusión solo aumentaría el costo computacional sin proporcionar cambios significativos en los resultados.

N	Takács			Michaels y Bolger		
	$(EAP)_N$	$(EAP)_N^*$	r	$(EAP)_N$	$(EAP)_N^*$	r
100	19.151	1.567	-	15.460	0.239	-
200	19.860	0.857	0.87	15.318	0.0974	1.30
400	20.341	0.377	1.19	15.242	0.0214	2.18
800	20.509	0.208	0.86	15.229	0.00799	1.42

Cuadro 4.6: Orden de convergencia r en función del número de capas N del conjunto [5]. Aquí $(EAP)_{3200}$ del modelo de Takács es 20.718 y del modelo Michaels y Bolger es 15.221.

N	Takács			Michaels y Bolger		
	$(EAP)_N$	$(EAP)_N^*$	r	$(EAP)_N$	$(EAP)_N^*$	r
100	7.198	0.534	-	9.846	0.477	-
200	6.904	0.240	1.16	9.598	0.229	1.06
400	6.801	0.136	0.82	9.478	0.110	1.06
800	6.730	0.0654	1.06	9.421	0.0529	1.06

Cuadro 4.7: Orden de convergencia r en función del número de capas N del conjunto [11]. Aquí $(EAP)_{3200}$ del modelo de Takács es 6.664 y del modelo Michaels y Bolger es 9.368.

4.4. Análisis de los resultados

Al comparar las curvas preprocesadas con sus simulaciones en las gráficas de los diferentes conjuntos se observan diferencias significativas en las zonas de transición y compresión. Una posible explicación de esto podría ser que no se consideraron efectos de compresión en las simulaciones numéricas. Esto es especialmente relevante para las curvas simuladas \hat{C} cuya cola[†] está por debajo de la interfaz real de la curva C .

A partir de los gráficos de error obtenidos para cada conjunto de datos, se pueden extraer conclusiones generales y específicas sobre el desempeño de los modelos de Takács, y Michaels y Bolger en la predicción del comportamiento de sedimentación. A continuación, se presenta un resumen organizado de estas conclusiones:

- ◇ En general, se observan patrones similares en los gráficos de error para los conjuntos [1], [3], [4], [5], [7], [8], [9] y [10] (Figuras 4.16b, 4.22b, 4.25b, 4.27b, 4.33b, 4.37b, 4.41b y 4.44b). En estos casos, se puede afirmar que el modelo que presenta un menor valor de EAP tiene una mayor capacidad de predicción.

[†]Parte final de la interfaz sólido-líquido de una curva de sedimentación correspondiente a la zona de compresión.

- ◇ Por otro lado, para los conjuntos [2], [6], [11] y [12], los comportamientos de los gráficos de error son diferentes, lo que indica que los modelos tienen diferencias significativas en sus predicciones (Figuras 4.19b, 4.30b, 4.47b, 4.49b). En estos casos, no es posible afirmar que uno de los modelos sea más preciso que el otro, sino que existen rangos de concentración donde uno de los modelos tiene un menor $e(C, \hat{C})$. Un claro ejemplo de esto es la Figura 4.30b donde Takács sobresale en el rango de concentración 1.5% a 4%, en cambio Michaels y Bolger en 4.6% a 5.6%. En estas situaciones considerar el promedio de los errores *EAP* parece insuficiente para elegir el más adecuado.
- ◇ Una desventaja que tiene el Selector es que este no toma en cuenta la definición de los modelos de f_{bk} por debajo de la concentración mínima del conjunto de experimentos considerados. La Figura 4.20 es un ejemplo claro de esto. En ella ambos modelos tienen un comportamiento similar para valores mayores que 0.2 g/l resultando en simulaciones que pueden ser comparables por medio del criterio del Selector; no obstante, estas distan en concentraciones menores. Y dado que el modelo de simulación no interactúa con los valores de f_{bk} en este dominio, el Selector no considera esta información. Por esta razón, el Selector solo debe ser utilizado en situaciones donde se asegure que la concentración mínima de la mezcla de interés sea superior a la mínima concentración con que se ajustaron los modelos.
- ◇ En cuanto a los resultados específicos de cada conjunto, en las tablas y gráficas de errores se pueden destacar los siguientes patrones:
 - En los conjuntos [1], [2] y [5], ambos modelos tienen un error $e(C, \hat{C})$ menor en concentraciones bajas y mayor en concentraciones altas.
 - Por otro lado, en los conjuntos [3] y [4], sucede lo opuesto: el error $e(C, \hat{C})$ es menor en concentraciones altas que en concentraciones bajas para los dos modelos.
 - El conjunto [11] muestra un comportamiento diferente, donde los modelos presentan un $e(C, \hat{C})$ similar en concentraciones bajas, pero en concentra-

ciones altas, el modelo de Michaels y Bolger tiene un $e(C, \hat{C})$ menor que el de Takács.

- Finalmente, en el conjunto [12] el modelo de Takács tiene un $e(C, \hat{C})$ menor que el de Michaels y Bolger en concentraciones bajas, mientras que ocurre lo contrario en concentraciones altas.

En la Figura 4.50, se compararon los errores de ajuste promedio *EAP* de los resultados de cada conjunto. Tanto Takács como Michaels y Bolger obtuvieron un mejor desempeño en los resultados de 6 de los 12 conjuntos, con lo cual no se puede concluir que uno sea inequívocamente mejor que el otro. Es más, se investigó si alguno de estos modelos era superior al considerar solamente materiales de lodos activados de diferentes plantas (conjuntos [1], [5], [6], [7], [10] y [11]). No obstante, en dos de estos conjuntos el modelo con mejor desempeño fue Michaels y Bolger. Por lo tanto, se puede concluir que ninguno de los modelos es indiscutiblemente superior al otro y que la elección del modelo dependerá del comportamiento de sedimentación de las curvas del conjunto específico.

CAPÍTULO 5

Conclusiones

Esta Tesis se enfoca en el estudio de los modelos de funciones de flujo f_{bk} y en su capacidad predictiva en los procesos de sedimentación. El problema que se aborda es cómo seleccionar el modelo más adecuado para describir el comportamiento de sedimentación para un conjunto de ensayos de columna, considerando la simulación y comparación de las curvas experimentales mediante la modelación numérica. A diferencia de la literatura previa, el aporte de este trabajo radica en que no sólo se mide la bondad de ajuste de los datos a los modelos de funciones de flujo, sino que también se evalúa su capacidad de predecir los fenómenos físicos de la sedimentación. De esta manera, se verifica que los modelos seleccionados puedan representar fielmente lo que ocurre en la realidad.

Dentro de la literatura revisada, el estudio más relacionado con la presente investigación es el artículo Torfs et al., [2017](#). Este trabajo también explora la capacidad predictiva de los modelos de funciones de flujo a través de simulaciones numéricas; sin embargo, a diferencia de la investigación aquí presentada, la evaluación se realiza

únicamente de manera cualitativa, mediante comparaciones visuales, lo que contrasta con el enfoque cuantitativo adoptado en este estudio.

Para solucionar esta limitación de la literatura, se propuso el *Selector de funciones de flujo*, un mecanismo que compara distintos modelos de f_{bk} mediante simulaciones numéricas y evalúa su capacidad predictiva. El *Selector de funciones de flujo* consta de varias etapas: primero, se ajustan los parámetros de cada modelo a los datos experimentales; después, se realizan simulaciones numéricas de las curvas de sedimentación; seguidamente, se comparan las curvas experimentales y simuladas por medio de un error que mide la capacidad de predicción del modelo sobre el conjunto de ensayos de columna en consideración. Este error es denominado Error de Ajuste Promedio (EAP). El Selector escoge el mejor modelo como aquel que tenga el valor más bajo de EAP.

Las etapas del Selector son detalladas en el Capítulo 3, el cual se enfoca en crear un procedimiento estándar que abarca desde explicar cómo preprocesar los datos de entrada hasta determinar el mejor modelo. El método numérico utilizado para realizar las simulaciones fue la Metodología de Modelamiento Consistente (MMC). Se escogió este método debido a la flexibilidad que otorga permitiendo activar o desactivar efectos de compresión y dispersión a voluntad. Lo cual, a su vez, facilita la escalabilidad de esta primera versión del Selector a futuros trabajos.

El Capítulo 4 presenta la aplicación del mecanismo a casos de estudio con datos de sedimentación de lodos activados y relaves mineros, provenientes de diferentes partes del mundo. Esto representa una mayor diversidad de condiciones que la abordada en la literatura previa en contextos donde se contrastan modelos de funciones de flujo. En este trabajo se utilizaron datos, tanto de fuentes propias como ajenas, y se comprobó que el Selector funciona en instancias muy diversas, mostrando su generalidad y versatilidad. Asimismo, se verifica la convergencia numérica del EAP mediante pruebas empíricas, y se valida que 400 capas es un valor adecuado para asegurar la consistencia del método sin incrementar el costo computacional. Así, se evidencia su robustez y eficiencia frente a diferentes escenarios. Finalmente, se ilustra el proceso

paso a paso en las etapas más importantes de este mecanismo, mostrando gráficamente las curvas experimentales y simuladas, así como el error a distintas concentraciones. Esto permite una mejor comprensión y análisis de las capacidades del Selector y de los modelos seleccionados.

Con el Selector de funciones de flujo se logró cumplir el objetivo general de esta memoria, que era desarrollar un método para seleccionar el modelo de f_{bk} más preciso para un conjunto de ensayos de sedimentación con una métrica que logre cuantificar la capacidad de explicación que esta aporta sobre el comportamiento de la sedimentación del material a través de la modelación numérica. Al aplicar el Selector sobre 12 conjuntos de curvas de sedimentación, se encontró que la elección del modelo más adecuado depende del comportamiento específico de sedimentación del conjunto y que no hay un modelo inequívocamente superior al otro en todos los casos. Estos resultados revelan la importancia del Selector como herramienta para estudiar y optimizar los procesos de sedimentación en tanques de sedimentación continua, tanto en las plantas de tratamiento de aguas servidas como en los procesos mineros, contribuyendo así al ahorro y la conservación del agua.

Sin embargo, este trabajo también presenta algunas limitaciones que deben ser considerados. Una de las principales limitaciones fue que no se consideraron efectos de compresión dentro de los modelos numéricos. Esto se debió a que los modelos de compresión también son funciones constitutivas, y que por tanto tienen parámetros que dependen del comportamiento de sedimentación de las partículas. No obstante, no había información suficiente para poder estimar estos parámetros, por lo que se decidió no considerarlos en esta primera versión del Selector. Esto puede implicar que se esté ignorando un efecto importante en el proceso de sedimentación, especialmente en las etapas finales donde la concentración es alta y la compresión es significativa. Por lo tanto, se sugiere incorporar los efectos de compresión en futuras versiones del Selector, utilizando modelos adecuados y datos confiables.

Otra de las limitaciones fue la falta de información sobre el valor de la concentración máxima de sólidos $\phi_{m\acute{a}x}$ para los modelos de f_{bk} utilizados. Este parámetro

no fue encontrado explícitamente en la mayoría de las fuentes de donde se obtuvieron los datos, por lo que se tuvo que hacer algunos supuestos para poder continuar. Por ejemplo, en los casos en que la concentración estaba registrada en unidades adimensionales (m/m o V/V) se consideró $\phi_{\text{máx}} = 100\%$. Sin embargo, este supuesto puede no ser válido para algunos casos, ya que el valor de $\phi_{\text{máx}}$ depende de las propiedades y el comportamiento de los sedimentos. Por lo tanto, se recomienda verificar la consistencia de este supuesto con datos experimentales o teóricos.

Otro aspecto que se debe reconocer es la heterogeneidad de las alturas iniciales de los conjuntos de curvas de sedimentación utilizados. Esto impidió definir el EAP como se quiso hacerlo, dividiendo por la altura inicial, como se propone en la ecuación (5.1). Esta forma de definir el EAP tiene el potencial de convertir la métrica utilizada en este trabajo, en una más relevante y útil en evaluar la calidad de los modelos de f_{bk} , ya que sería un valor adimensional e independiente del conjunto de datos. Así, se podría establecer un rango de valores de EAP que indicaran si el modelo es bueno, regular o malo para predecir el comportamiento de sedimentación. Además, en la Figura 4.50 no se puede hacer una comparación justa entre los valores de EAP de los diferentes conjuntos, porque las alturas iniciales son distintas. Por lo tanto, se sugiere que en futuros protocolos en laboratorios de obtención de datos en experimentos de sedimentación se tenga en cuenta que estos inicien a la misma altura.

$$EAP = \frac{1}{h_0 p} \cdot \sum_{k=1}^p e(C_k, \hat{C}_k). \quad (5.1)$$

Además de la heterogeneidad de las alturas iniciales, una observación que se puede hacer a este trabajo es la forma en que se obtuvo la interfaz de sedimentación a partir de las simulaciones numéricas. Para extraer esta interfaz, se creó un procedimiento que funcionó adecuadamente, como se puede ver en la Figura 4.14. Sin embargo, este procedimiento podría funcionar de manera más eficiente. Una posible mejora sería obtener la interfaz de forma exacta o numérica, resolviendo las ecuaciones que gobiernan su evolución, o aplicando el método de front tracking.

Otro aspecto que se puede explorar es el uso de otras métricas de error para

definir el EAP. Esta proporciona una medida útil del error entre las curvas experimentales y simuladas, pero no captura la variabilidad y las características específicas de los errores como se discutió en la sección 4.4. Esto quiere decir que, en ocasiones, el EAP podría no ser un indicador representativo del ajuste del modelo. En el futuro, se podrían probar otras métricas de error, como la mediana o la norma 2, para proporcionar una visión más completa y robusta.

La última observación que se puede hacer es la forma en que se estimaron los parámetros del modelo de Takács. Este modelo no es linealizable, por lo que se aplicó el *Algoritmo de Levenberg Marquardt* para ajustar sus parámetros. Se usaron condiciones iniciales de $k=n=1$ basándose en pruebas computacionales. Sin embargo, esta elección fue heurística y no garantiza que se haya encontrado el mínimo global del error. A pesar de estas limitaciones, este método fue adecuado, ya que permitió obtener resultados con sentido físico que se ajustaron a los datos experimentales. En el futuro, se podrían explorar otros métodos de estimación de parámetros, que podrían ofrecer ventajas adicionales.

El Selector presentado en este trabajo constituye una primera versión en el camino de la creación de un Mecanismo automatizado que determine el modelo más adecuado de función de densidad de flujo f_{bk} . Sin embargo, este Selector se puede mejorar y optimizar en diversos aspectos. A continuación, se plantean varias líneas de trabajo futuro para lograr este objetivo.

En lo que respecta a la eficiencia del Selector, esta no fue un foco principal en esta primera etapa de desarrollo. Aunque ha demostrado ser útil para seleccionar el modelo más adecuado, su operación puede ser optimizada para mejorar su rendimiento y eficacia. Para lograr esto, se pueden implementar diversas mejoras, como la automatización de la etapa de preprocesamiento, el desarrollo de un algoritmo para calcular la velocidad de sedimentación inicial y la reducción del costo computacional de las simulaciones numéricas.

En cuanto a la capacidad predictiva del Selector, esta puede ser aumentada mediante el uso de más tipos de funciones de flujo que se ajusten mejor a las carac-

terísticas de las curvas de sedimentación. Por ejemplo, se pueden utilizar funciones definidas por partes, que permitan modelar las zonas de transición y compresión con mayor complejidad y flexibilidad. Además, probar alguna otra técnica de ajuste que pueda tener como consecuencia una mayor precisión y robustez a los modelos utilizados.

En resumen, esta Tesis ha logrado avanzar en el estudio y la optimización de los procesos de sedimentación en tanques de sedimentación continua mediante el desarrollo y la aplicación del Selector de funciones de flujo. Los resultados obtenidos exhiben la generalidad y versatilidad del Selector al aplicarse a casos de estudio con datos de sedimentación de lodos activados y relaves mineros. Además, se han identificado posibles mejoras en cuanto a eficiencia y capacidad predictiva que podrían abordarse en futuras versiones. En conjunto, esta contribución al conocimiento científico tiene el potencial de impactar positivamente en el cuidado del medio ambiente y en la sociedad, al mejorar la eficiencia y sostenibilidad de los procesos de sedimentación en diversos sectores industriales.

Bibliografía

- Apostol, T. M. (1991). *Calculus, Volume 1*. John Wiley & Sons.
- Araya, F. et al., (2014). «Las aguas servidas en las zonas rurales». En: *Las aguas servidas y su depuración en zonas rurales: situación actual y desafíos*. Ed. por G. Vidal y F. Araya. Ediciones Universidad de Concepción, pág. 121. ISBN: 978-956-227-378-7.
- Báez, J. (2004). «Sistemas de recolección y evacuación de aguas residuales y pluviales». En: *Barranquilla: Ediciones Uninorte*.
- Betancourt, F. et al., (jun. de 2020). «Modelamiento matemático de operaciones unitarias en la minería y plantas de tratamiento de aguas servidas. Un aporte al uso eficiente del agua y la recuperación de recursos hídricos.» En: *CRHIAM*. URL: <https://www.crhiam.cl/publicaciones/series-comunicacionales/>.
- Bürger, R. et al., (2000). «Applications of the phenomenological theory to several published experimental cases of sedimentation processes». En: *Chemical Engineering Journal* 80.1-3, págs. 105-117.
- Bürger, R. et al., (2011). «A consistent modelling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment». En: *Water research* 45.6, págs. 2247-2260.

- Bürger, R. et al., (2013). «A consistent modelling methodology for secondary settling tanks: a reliable numerical method». En: *Water Science and Technology* 68.1, págs. 192-208.
- Burnham, K. P. y Anderson, D. R. (2004). «Multimodel inference: understanding AIC and BIC in model selection». En: *Sociological methods & research* 33.2, págs. 261-304.
- Bustos, M. C. (1984). «On the existence and determination of discontinuous solutions to hyperbolic conservation laws in the theory of sedimentation». Tesis doct. Technische Hochschule Darmstadt.
- Bustos, M. C. y Concha, F. (1988a). «On the construction of global weak solutions in the Kynch theory of sedimentation». En: *Mathematical methods in the applied sciences* 10.3, págs. 245-264.
- Bustos, M. C. et al., (1999). *Sedimentation and thickening: Phenomenological foundation and mathematical theory*. Vol. 8. Springer Science & Business Media.
- Bustos, M. y Concha, F. (1988b). «Simulation of batch sedimentation with compression». En: *AIChE journal* 34.5, págs. 859-861.
- Cacossa, K. F. y Vaccari, D. A. (1994). «Calibration of a compressive gravity thickening model from a single batch settling curve». En: *Water science and technology* 30.8, pág. 107.
- Casas, Y. et al., (sep. de 2022). «Sustentabilidad de los sistemas de tratamiento de aguas servidas. Una mirada desde el análisis de ciclo de vida.» En: *CRHIAM*. URL: <https://www.crhiam.cl/publicaciones/series-comunicacionales/>.
- Cho, S. et al., (1993). «Settling velocity model of activated sludge». En: *Water research* 27.7, págs. 1237-1242.
- Cole, R. F. (1968). «Experimental evaluation of the Kynch theory». Tesis doct. University of North Carolina at Chapel Hill.
- Concha, F. y Bürger, R. (2002). «A century of research in sedimentation and thickening». En: *KONA powder and particle Journal* 20, págs. 38-70.

- Concha, F. y Bustos, M. C. (1991). «Settling velocities of particulate systems, 6. Kynch sedimentation processes: batch settling». En: *International journal of mineral processing* 32.3-4, págs. 193-212.
- Concha, F. et al., (abr. de 2020). «Minería, energía y agua. Situación actual». En: *CRHIAM*. URL: <https://www.crhiam.cl/publicaciones/series-comunicacionales/>.
- Concha, F. A. (2014). *Solid-liquid separation in the mining industry*. Springer.
- Courant, R. et al., (1967). «On the partial difference equations of mathematical physics». En: *IBM journal of Research and Development* 11.2, págs. 215-234.
- De Clercq, J. et al., (2005). «Detailed spatio-temporal solids concentration profiling during batch settling of activated sludge using a radiotracer». En: *Water research* 39.10, págs. 2125-2135.
- Diehl, S. (2015). «Numerical identification of constitutive functions in scalar nonlinear convection–diffusion equations with application to batch sedimentation». En: *Applied Numerical Mathematics* 95, págs. 154-172.
- Diehl, S. y Farås, S. (2013). «Control of an ideal activated sludge process in wastewater treatment via an ODE–PDE model». En: *Journal of Process Control* 23.3, págs. 359-381.
- Ekama, G. et al., (1997). «Secondary settling tanks». En: *London: International Association on Water Quality*.
- Engquist, B. (2015). *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*. Springer Berlin.
- Fitch, B. (1983). «Kynch theory and compression zones». En: *AIChE Journal* 29.6, págs. 940-947.
- Font, R. (1988). «Compression zone effect in batch sedimentation». En: *AIChE Journal* 34.2, págs. 229-238.
- Godunov, S. y Bohachevsky, I. (1959). «Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics». En: *Matematičeskij sbornik* 47.3, págs. 271-306.

- Grieves, C. y Stenstrom, M. (1976). *Evaluation of performance of the Texas City refinery wastewater treatment facilities*.
- Guo, Y. et al., (2010). «Application analysis of one-dimensional sedimentation model». En: *2010 4th International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering*. IEEE, págs. 1-5.
- Gupta, A. y Yan, D. S. (2016). *Mineral processing design and operations: an introduction*. Elsevier.
- Hassett, N. (1964). «Mechanism of thickening and thickener design». En: *Trans. Inst. Min. Met* 74, págs. 627-656.
- Henze, M. et al., (2008). *Biological wastewater treatment*. IWA publishing.
- Iritani, E. et al., (2009). «Gravity consolidation–sedimentation behaviors of concentrated TiO₂ suspension». En: *Chemical Engineering Science* 64.21, págs. 4414-4423.
- Karamisheva, R. D. e Islam, M. (2005). «Development of a new model for batch sedimentation and application to secondary settling tanks design». En: *Water environment research* 77.7, págs. 3066-3073.
- Kinnear, D. J. (2002). *Biological solids sedimentation: A model incorporating fundamental settling and compression properties*. The University of Utah.
- Knobel, R. (2000). *An introduction to the mathematical theory of waves*. Vol. 3. American Mathematical Soc.
- Kružkov, S. N. (1970). «First order quasilinear equations in several independent variables». En: *Mathematics of the USSR-Sbornik* 10.2, pág. 217.
- Kynch, G. J. (1952). «A theory of sedimentation». En: *Transactions of the Faraday society* 48, págs. 166-176.
- Lax, P. D. (1957). «Hyperbolic systems of conservation laws II». En: *Communications on pure and applied mathematics* 10.4, págs. 537-566.
- LeVeque, R. J. (1992). *Numerical methods for conservation laws*. Vol. 132. Springer.
- LeVeque, R. J. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Vol. 31. Cambridge university press.

- Li, B. y Stenstrom, M. (2014). «Research advances and challenges in one-dimensional modeling of secondary settling tanks—a critical review». En: *Water research* 65, págs. 40-63.
- Locatelli, F. et al., (2015). «Detailed velocity and concentration profiles measurement during activated sludge batch settling using an ultrasonic transducer». En: *Separation Science and Technology* 50.7, págs. 1059-1065.
- Metcalf, E. A. et al., (2014). *Wastewater engineering: treatment and resource recovery*. 5.^a ed. McGraw-Hill Education.
- Michaels, A. S. y Bolger, J. C. (1962). «Settling rates and sediment volumes of flocculated kaolin suspensions». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 1.1, págs. 24-33.
- Montes, C. y Ramirez, V. (dic. de 2021). «Proyección del consumo de agua en la minería del cobre.» En: *Comisión Chilena del Cobre*. URL: <https://www.cochilco.cl>.
- Montgomery, D. C. et al., (1992). *Introduction to linear regression analysis*. 2nd. Wiley.
- Moré, J. J. (2006). «The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory». En: *Numerical Analysis: Proceedings of the Biennial Conference Held at Dundee, June 28–July 1, 1977*. Springer, págs. 105-116.
- Nopens, I. (2005). «Modelling the activated sludge flocculation process: a population balance approach». En: *PhDThesis, Ghent University, Belgium*.
- Oleinik, O. (1963). «Discontinuous solutions of nonlinear differential equations». En: *Amer. Math. Soc. Transl* 26.2, págs. 95-172.
- ONU (2022). *Goal 6: Ensure access to water and sanitation for all*. Recuperado de la ONU. United Nations Organization. URL: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/water-and-sanitation/>.
- Ramin, E. et al., (2014). «A new settling velocity model to describe secondary sedimentation». En: *Water Research* 66, págs. 447-458.

- Ramírez, A. et al., (ene. de 2020). «Calidad del agua y su uso en la minería.» En: *CRHIAM*. URL: <https://www.crhiam.cl/publicaciones/series-comunicacionales/>.
- Richardson, J. y Zaki, W. (1954). «The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow». En: *Chemical Engineering Science* 3.2, págs. 65-73.
- Scott, K. J. (1966). «Mathematical models of mechanism of thickening». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 5.1, págs. 109-113.
- Scott, K. J. (1968a). «Experimental study of continuous thickening of a flocculated silica slurry». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 7.4, págs. 582-595.
- Scott, K. J. (1968b). «Theory of thickening: factors affecting settling rate of solids in flocculated pulps». En: *Trans. Inst. Min. Met* 77, págs. C85-C97.
- Shannon, P. T. et al., (1964). «Batch and continuous thickening. Prediction of batch settling behavior from initial rate data with results for rigid spheres». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 3.3, págs. 250-260.
- Shannon, P. y Tory, E. (1965). «Settling of slurries—new light on an old operation». En: *Industrial & Engineering Chemistry* 57.2, págs. 18-25.
- Shannon, P. y Tory, E. (1966). «The analysis of continuous thickening. Soc». En: *Min. Eng. AIME* 66B72, pág. 1.
- Shannon, P. et al., (1963). «Batch and continuous thickening. Basic theory. Solids flux for rigid spheres». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 2.3, págs. 203-211.
- Steinour, H. H. (1944). *Rate of sedimentation: I. nonflocculated suspensions of uniform spheres; II. Suspensions of uniform-size angular particles; III. Concentrates flocculated suspensions of powders*. Inf. téc.
- Stenstrom, M. K. (1976). «A DYNAMIC MODEL AND COMPUTER COMPATIBLE». Tesis doct. Clemson University.
- Strauss, W. A. (2007). *Partial differential equations: An introduction*. John Wiley & Sons.

- Stricker, A.-E. et al., (2007). «Hindered and compression settling: parameter measurement and modelling». En: *Water Science and technology* 56.12, págs. 101-110.
- Takács, I. et al., (1991). «A dynamic model of the clarification-thickening process». En: *Water research* 25.10, págs. 1263-1271.
- Torfs, E. et al., (2017). «On constitutive functions for hindered settling velocity in 1-D settler models: Selection of appropriate model structure». En: *Water research* 110, págs. 38-47.
- Tory, E. M. y Shannon, P. T. (1965). «Reappraisal of Concept of Settling in Compression. Settling Behavior and Concentration Profiles for Initially Concentrated Calcium Carbonate Slurries». En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 4.2, págs. 194-204.
- Vaerenbergh, E. (1980). «Numerical computation of secondary settler area using batch settling data». En: *Trib. Ceb* 33, págs. 369-374, 441.
- Valencia, C. et al., (2017). «Recuperación de agua en relaves mineros mediante el uso de drenaje electro osmótico». En: URL: https://i3.investigacion.ing.uc.cl/wp-content/uploads/2017/12/05_valencia.pdf.
- Vanderhasselt, A. y Vanrolleghem, P. A. (2000). «Estimation of sludge sedimentation parameters from single batch settling curves». En: *Water Research* 34.2, págs. 395-406.
- Vesilind, P. A. (1968). «Discussion of evaluation of activated sludge thickening theories». En: *J. Sanit. Eng. Div., Proc. Am. Soc. Civ. Eng.* 93, pág. 185.
- Vesilind, P. A. y Jones, G. N. (1990). «A reexamination of the batch-thickening curve». En: *Research journal of the water pollution control federation*, págs. 887-893.
- Yepsen, R. et al., (jun. de 2021). «Procesamiento de minerales de cobre y el recurso del agua: conceptos, desafíos y soluciones.» En: *CRHIAM*. URL: <https://www.crhiam.cl/publicaciones/series-comunicacionales/>.
- Yoshioka, N. (1957). «Continuous thickening of homogeneous flocculated slurries». En: *Kagaku Kogaku* 21, págs. 66-74.