



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

Memoria para optar al título
de Ingeniero Civil Matemático

**Modelamiento matemático y simulación numérica de
sedimentadores con área variable en plantas de
tratamiento de aguas servidas (PTAS)**

Autor

Julio César Careaga Solís

Director de memoria

Raimund Klaus Bürger
Departamento de Ingeniería Matemática & CI²MA
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Concepción
Casilla 160-C

Enero, 2016
CONCEPCION, CHILE

Comisión evaluadora

Dr. Raimund Bürger
Departamento de Ingeniería Matemática & CI²MA
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Concepción, Chile

Dr. Pep Mulet
Departamento de Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias Matemáticas
Universitat de Valencia, España

Dr. Freddy Paiva
Departamento de Ingeniería Matemática
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Concepción, Chile

Dr. Luis Miguel Villada
Departamento de Matemática
Facultad de Ciencias
Universidad del Bío-Bío, Chile

Agradecimientos

Comienzo expresando un especial agradecimiento a mi profesor guía, al profesor Raimund Bürger por aceptar dirigir esta memoria e incluirme en su área de trabajo, al profesor Freddy Paiva del Departamento de Ingeniería Matemática por su constante apoyo, buena voluntad, y amistad brindada, al profesor Stefan Diehl por su buena voluntad y la colaboración en el trabajo realizado en conjunto, al profesor Gabriel Gatica como director del CI²MA.

A todos los profesores y personal administrativo presentes en mi transcurso como estudiante de ésta carrera, con mencion especial al profesor Luis Sanchez Q.E.P.D.

A mis padres y mis hermanos Felipe y Adelaida. A mis amigos Luis, Gerardo, Rodrigo, Claudio y ex-compañeros de banda. También a toda la gente que me ha brindado colaboración en este periodo de estudio.

Al proyecto Fondecyt regular 1130154 que financio parcialmente mi memoria, al DIM y CI²MA en su totalidad. Gracias.

Resumen

En la primera parte de este trabajo se presenta la comparación de dos métodos numéricos para la resolución de un problema de sedimentación no reactiva para plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS) con área de sección transversal variable. La comparación es motivada por la diferencia en la eficiencia de ambos métodos. Se presentan simulaciones para tanques con diferentes tipos de geometría y se comparan además las soluciones aproximadas obtenidas por ambos métodos y un estudio sobre la convergencia de ambos métodos.

En la segunda parte, se presenta un modelo reducido para el proceso de sedimentación reactiva tipo batch, se muestra un método numérico para la aproximación de la solución el cual involucra ingredientes desarrollados para el caso no reactivo. Se presentan simulaciones obtenidas a partir del método numérico propuesto bajo diferentes condiciones iniciales; test de Kynch, test de Diehl y test de lodos sobrecomprimidos. Y se muestra una breve comparación del comportamiento de la degradación del nitrato para las simulaciones obtenidas del test de Kynch y test de Diehl.

Índice general

Agradecimientos	IV
Resumen	v
Índice de figuras	ix
Índice de cuadros	1
1. Introducción	2
1.1. Motivación	2
1.2. Estado del arte	4
1.3. Conceptos importantes	6
2. Modelo matemático	9
2.1. Descripción del proceso	9
2.2. Suposiciones y ecuación del problema	10
2.3. Funciones constitutivas	14
2.4. Propiedad de la ecuación gobernante	15
2.5. Solución de entropía	15
3. Esquema numérico	17
3.1. Método 1	17
3.2. Método 2	19
3.3. Aproximación derivada temporal	20
4. Condición CFL	22
4.1. Condición CFL método 1	22

4.2.	Condición CFL método 2	25
4.3.	Comparación de las condiciones CFL del método 1 y 2	27
5.	Simulaciones	30
5.1.	Geometría del sedimentador	32
5.2.	Comparación de los métodos 1 y 2 bajo distintas geometrías.	36
5.2.1.	Simulación 1 (Tanque 1).	36
5.2.2.	Simulación 2 (Tanque 2).	38
5.2.3.	Simulación 3 (Tanque 3).	40
5.2.4.	Simulación 4 (Tanque 4).	42
5.2.5.	Simulación 5 (Tanque 5).	44
5.2.6.	Simulación 6 (Tanque 6).	46
5.3.	Comparación por tanques:	48
5.4.	Precisión y eficiencia	51
5.4.1.	Error relativo	55
5.4.2.	Comparación de la eficiencia	57
6.	Condiciones CFL casos específicos	61
7.	Sedimentación reactiva	65
7.1.	Preliminar	65
7.2.	Modelo gobernante	66
7.3.	Método Numérico	68
7.3.1.	Discretización espacial	68
7.3.2.	Esquema discreto totalmente explícito	70
7.3.3.	Método de líneas	71
7.4.	Simulaciones	72
7.5.	Ejemplos 1 a 3: Kynch test	72
7.6.	Ejemplos 4 y 5: Diehl test (sedimentación batch de una suspensión inicial situado por encima de líquido transparente)	75
7.7.	Ejemplos 6 y 7: test de lodo sobrecompresión (expansión de lodo comprimido)	80
8.	Conclusiones y trabajo futuro	83
8.1.	Conclusión	83

8.2. Trabajo futuro	84
Referencias	85

Índice de figuras

1.1.	Diagrama de una planta de tratamiento de aguas servidas.	3
2.1.	Esquema de un sedimentador con área variable. A la izquierda se aprecia el sedimentador junto con sus niveles y los caudales de alimentación Q_f , desborde Q_e y de descarga Q_u , H representa el alto de la zona de clarificación y B el alto de la zona de espesamiento. A la derecha un diagrama con el área del corte transversal horizontal. El área A depende de la profundidad z	10
4.1.	Diagrama de la sección transversal vertical del sedimentador definido por la función de área dada en (4.4). Ejemplo de un sedimentador que no satisface la condición (4.3).	28
5.1.	Gráfica de las funciones constitutivas v_{hs} , σ_e y d_{disp} junto con las funciones f_{bk} y d_{comp} utilizadas en las siguientes simulaciones.	31
5.2.	Gráfica de la concentración inicial C_0 con respecto a la profundidad z	32
5.3.	Diagrama de la sección transversal vertical del tanque 6 (izquierda) y de otro tanque con igual función de área de sección transversal (derecha) pero con distinta geometría.	34
5.4.	Diagramas de los tanques 1 al 6, considerando el corte transversal vertical.	35
5.5.	Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 1 hasta un tiempo final de 600 horas.	36
5.6.	Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 1.	37
5.7.	Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 1.	37
5.8.	Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 2 hasta un tiempo final de 600 horas.	38
5.9.	Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 2.	39

5.10. Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 2. . . .	39
5.11. Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 3 hasta un tiempo final de 600 horas.	40
5.12. Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 3.	41
5.13. Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 3. . . .	41
5.14. Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 4 hasta un tiempo final de 600 horas.	42
5.15. Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 4.	43
5.16. Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 4. . . .	43
5.17. Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 5 hasta un tiempo final de 600 horas.	44
5.18. Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 5.	45
5.19. Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 5. . . .	45
5.20. Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 6 hasta un tiempo final de 600 horas.	46
5.21. Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 6.	47
5.22. Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 6. . . .	47
5.23. Comparación de la soluciones aproximadas por el Método 1 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) dadas en las simulaciones 1 a la 5.	48
5.24. Comparación de la soluciones aproximadas por el Método 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) dadas en las simulaciones 1 a la 5.	49
5.25. Concentración de descarga C_u en función del tiempo de la simulación 1 a la 6. Imágen superior (a) corresponde a la concentraciones de descarga obtenidas por el Método 1 y la imágen inferior (b) corresponde a las obtenidas por el Método 2.	52
5.26. Solución aproximada para $N = 25, 75, 100, 200$ y solución de referencia con $N = 3000$ del Método 1 para el tiempo $t = 10$ h.	53

5.27. Solución aproximada para $N = 25, 75, 100, 200$ y solución de referencia con $N = 3000$ del Método 2 para el tiempo $t = 10$ h.	54
5.28. Error relativo e_N^{rel} cometido considerando los tanques 1 a 6 en función de N para los métodos 1 y 2 respectivamente.	58
5.29. Error relativo e_N^{rel} cometido por el Método 1 (arriba) y Método 2 (abajo) en función de N para los tanques 1 al 6.	59
5.30. Error relativo e_N^{rel} cometido considerando los tanques 1 a 6 versus el tiempo CPU para los métodos 1 y 2 respectivamente.	60
6.1. Paso temporal Δt en función de N para la condición CFL del Método 1 (CFL 1), condición CFL del Método 2 (CFL 2) y condición CFL específica (6.6) (CFL 3) obtenida para los tanques 1, 2, 3 y 5.	63
6.2. Diagrama de un sedimentador con función de área dada por la función (6.7). Donde $H = 1$ m y $B = 3$ m.	64
7.1. Ejemplo 1 (test de Kynch, $d_S = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$). Aquí y en las Figuras 7.2 a 7.6, la cuadrícula visual usada para mostrar la solución numérica es más gruesa que la cuadrícula computacional, y las gráficas de las soluciones se han girado para cada cantidad tal que casi todas las partes sean visibles. .	73
7.2. Ejemplo 1 (test de Kynch, $d_S = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$): largo tiempo de simulación ($T = 100$ h).	74
7.3. Ejemplo 2 (test de Kynch, $d_S = 9 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$).	76
7.4. Ejemplo 3 (test de Kynch, $d_S = 1.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$).	77
7.5. Ejemplo 4 (test de Diehl, $X(z, 0) = 7 \text{ kg m}^{-3}$ sobre $z = 0.5$ m).	78
7.6. Ejemplo 5 (test de Diehl, $X(z, 0) = 14 \text{ kg m}^{-3}$ sobre $z = 0.25$ m).	79
7.7. Ejemplo 1 a 5: evolución de la aproximación del inventario de nitrato aproximado $I_{\text{NO}_3}^{\Delta}(t)$. Ejemplos 1–3 muestra los resultados de los tres KT incrementando el coeficiente de difusión d_S , mientras que los Ejemplos 4–5 muestran los resultados de los dos DT con el mismo valor de d_S con en Ej. 1.	80
7.8. Ejemplo 6 (test sobrecomprimido, $X(z, 0) = 20 \text{ kg m}^{-3}$ por debajo de $z = 0.7$ m)	81
7.9. Ejemplo 7 (test sobrecomprimido, $X(z, 0) = 25 \text{ kg m}^{-3}$ por debajo de $z = 0.9$ m)	82

Índice de cuadros

5.1.	Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 50$ h.	50
5.2.	Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 150$ h.	50
5.3.	Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 500$ h.	51
5.4.	Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 1 y 2 en $t_0 = 10$ h.	55
5.5.	Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 3 y 4 en $t_0 = 10$ h.	56
5.6.	Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 5 y 6 en $t_0 = 10$ h.	57
7.1.	Parámetros empleados para la simulación de sedimentación reactiva. . . .	68

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

El agua es uno de los recursos naturales más importantes para el ser humano, el cual juega un rol imprescindible tanto en la vida cotidiana como en procesos industriales. La utilización de éste recurso genera grandes volúmenes de agua contaminada, que en el caso específico de las aguas servidas provenientes de pueblos o municipios (ciudades), deben ser enviadas hacia aguas receptoras (ríos, lagos o el mar), a la tierra o bien reutilizadas.

Las plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS) son empleadas para la purificación y consecuente reutilización del agua, como también son utilizadas para disminuir el impacto ambiental que causaría vertir éstas aguas sin un proceso previo al medio ambiente. En general las PTAS se componen por diferentes niveles de tratamiento (niveles operacionales), una distribución común por niveles se compone por el *nivel preliminar* que corresponde a la remoción de grasa y materiales sólidos de mayor tamaño como harapos, palos, elementos flotantes que pueden causar problemas operacionales durante el proceso, el *nivel primario* en el cual se elimina una porción de los sólidos en suspensión y materia orgánica de las aguas residuales, seguido de éste, el *nivel primario avanzado* mejora la remoción de sólidos en suspensión y la materia orgánica de las aguas residuales, normalmente logrado mediante la adición de químicos o de filtros. El *nivel secundario* que corresponde al nivel de eliminación de la materia orgánica biodegradable y de los sólidos suspendidos, se incluye normalmente la desinfección en este nivel. El *nivel secundario con eliminación de nutrientes* en el cual se eliminan compuestos orgánicos biodegradables, sólidos en suspensión y nutrientes (nitrógeno, fósforo, o ambos). El *nivel terciario* en que se remueven los residuos sólidos suspendidos, después del nivel secundario. Y por último el *nivel avanzado* en el cual se eliminan los materiales disueltos y suspendidos restantes después del tratamiento biológico normal cuando sea necesario para diversas aplicaciones de reutilización del agua (Tchobanoglous et al., 2003). En la Figura 1.1 se muestra un diagrama de una planta de tratamiento de aguas servidas estándar.

Para la separación de los sólidos en el nivel secundario se utiliza generalmente un tanque sedimentador secundario (TSS), en el cual se produce la separación sólido/líquido de

activated-sludge method

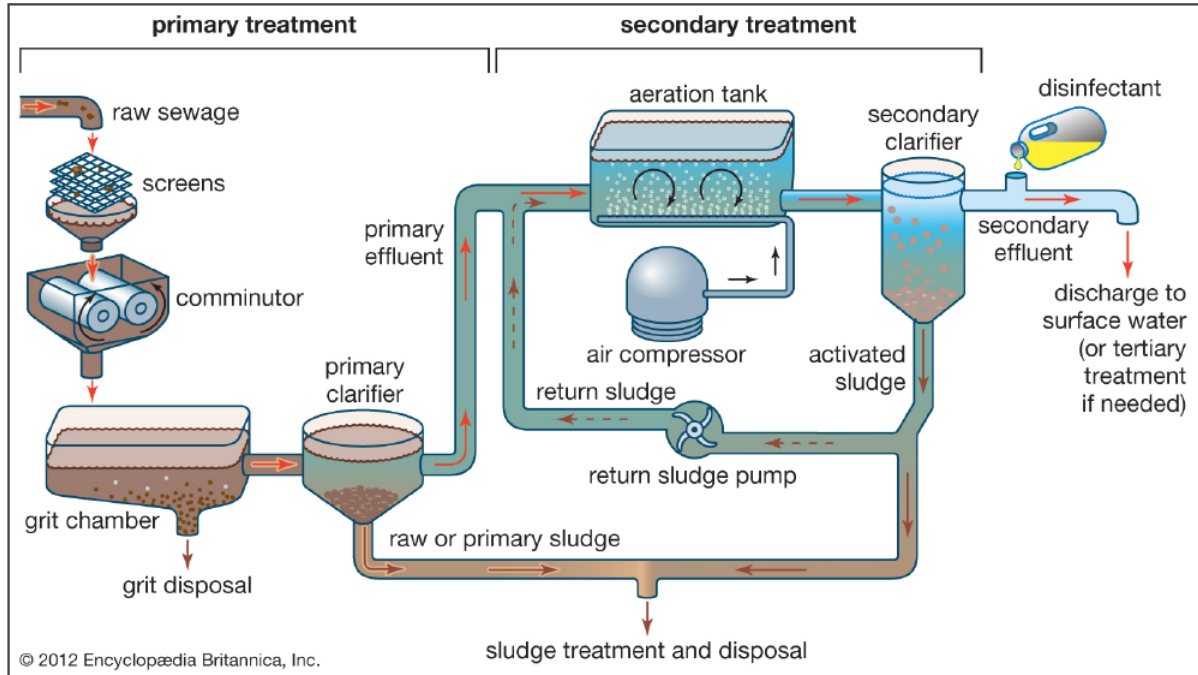


Figura 1.1: Diagrama de una planta de tratamiento de aguas servidas.

la suspensión mediante el proceso de sedimentación por efecto de la fuerza de gravedad, produciendo así un flujo constante de agua clarificada y otro de lodo ya sedimentado. La simulación numérica del proceso de sedimentación que se lleva a cabo en el TSS sirve para estudiar la evolución con respecto al tiempo del comportamiento de la sedimentación en el tanque bajo distintas condiciones operacionales. Los modelos para la simulación numérica del proceso pueden ser en una o más dimensiones espaciales, no obstante muchos de los software computacionales utilizados para simular este proceso son basados en modelos unidimensionales, que en algunos casos tienen limitaciones considerables como es el caso del método de Takács et al. (1991). Por otro lado se buscan modelos derivados de ecuaciones diferenciales e implementaciones de esquemas numéricos que permitan agilizar los tiempos de simulación del proceso, y a su vez reproduzcan los fenómenos que ocurren durante el proceso. El modelo unidimensional de Bürger-Diehl junto con una “metodología consistente de modelamiento” (o CMM por sus siglas en inglés) se presenta en Bürger et al. (2011), sentando las bases de una serie de trabajos multidisciplinarios en el tema. El estudio del proceso de sedimentación mediante el modelo de Bürger-Diehl hasta ahora se ha concentrado en modelos uni-dimensionales definidos para recipientes cilíndricos. Este trabajo se concentrará en modelos aproximados cuasi-unidimensionales, para los cuales la descripción de la geometría del recipiente es dada por una función de área transversal variable con respecto a la profundidad del sedimentador. El modelo extendido es entonces un modelo que permite simular geometrías distintas a la dada por el clásico sedimentador cilíndrico (área transversal constante), como por ejemplo recipientes cónicos o con geometrías más complejas.

La matemática subyacente bajo un modelo de sedimentación tanto unidimensional como multidimensional en ecuaciones en derivadas parciales para el TSS representa un problema matemático que involucra aspectos del análisis matemático y numérico de leyes de conservación y de ecuaciones parabólicas fuertemente degeneradas, además de leyes de conservación con flujo discontinuo respecto de la coordenada espacial, abarcando así un amplio campo de estudio.

1.2. Estado del arte

La teoría desarrollada por Kynch (1952) muestra que bajo la imposición de que la velocidad de las partículas en el proceso de sedimentación tipo batch dependa únicamente de la concentración local de las partículas, el proceso se puede modelar a partir de una ecuación de conservación, además se muestra la resolución mediante el método de las características y se realiza un estudio sobre los supuestos necesarios para la correcta implementación de un modelo.

Un modelo y método numérico comúnmente usado en simulación de plantas de tratamiento de aguas servidas es el provisto por Takács, Patry y Nolasco (1991), el cual se basa en balances de masa por capas, además de considerar hipótesis heurísticas para ajustar datos o solucionar problemas dentro del desarrollo del modelo. Este modelo pasa a ser objeto de comparación en los trabajos realizados por Bürger et al. (2011, 2012) y que se presentan en un breve resumen más adelante.

El trabajo realizado por Diehl en 1996 presenta un estudio teórico sobre ecuaciones de leyes de conservación no lineales con flujo discontinuo y término singular. Se estudia la unicidad de este tipo de ecuaciones introduciendo la denominada *Condición Γ* , que representa una generalización de la clásica condición de entropía para leyes de conservación escalares, se muestra además la aplicación de este tipo de ecuaciones al caso de sedimentación continua (sin considerar los efectos de compresión ni dispersión) y la solución aproximada mediante un método que satisface la *Condición Γ* . Por otro lado el trabajo de Jeppsson y Diehl (1996) muestra la comparación de dos métodos numéricos en la simulación del proceso de sedimentación en PTAS, el primero se denomina método de Diehl que considera una aproximación de la función de flujo (que incluye la función de densidad de flujo batch de Kynch) dada por el flujo de Godunov, y el segundo es el conocido método de Takács definido en Takács et al. (1991). Se comparan las aproximaciones dadas por ambos métodos y se concluye que las soluciones obtenidas por el método de Diehl son realistas, además se comenta que el método de Diehl converge a la solución de entropía cuando el número de capas aumenta, no así el método de Takács que considera sólo 10 capas y el cual contempla el mismo número de capas como parámetro de ajuste. En el trabajo de Diehl (2000) se muestra el impacto que un área transversal convergente (con respecto a la profundidad) tiene en el aumento de la concentración de descarga.

Un modelo matemático unidimensional para sedimentación batch y continua que considera el área de la sección transversal del sedimentador variable con respecto a la profundidad es propuesto por Bürger, Damasceno y Karlsen (2004). El modelo considera el

efecto de la compresión y el método numérico propuesto utiliza una aproximación de la función de flujo dada por el flujo numérico de Engquist-Osher (1981). Se utiliza el método de las características para determinar la solución en ausencia de compresión considerando sedimentadores cilíndricos y cónicos, se comparan las soluciones para estados estáticos con diferentes valores de concentración en el fondo del sedimentador y se muestran algunas soluciones obtenidas con el método numérico para el caso no estacionario.

En el trabajo realizado por Bürger, Karlsen, Risebro y Towers (2004) se considera un modelo de sedimentación continua basado en la ecuación de conservación de masa escalar considerando sedimentadores ideales con sección transversal constante. Se presenta una noción de condición de entropía basada en la condición de entropía de Kružkov, junto con una serie de lemas técnicos y resultados esenciales para finalmente demostrar la unicidad de la solución de entropía en la clase de funciones BV_t (la condición de entropía a menudo es denominada “condición de entropía BV_t ”). Se define un esquema numérico basado en el flujo numérico de Engquist-Osher y se demuestra la convergencia del método numérico a la solución de entropía BV_t . Por otro lado el trabajo realizado por Bürger, Karlsen y Towers (2005) muestra la extensión de la condición de entropía dada en Bürger et al. (2004) ahora considerando el caso de un sedimentador en cuyo interior el área transversal es constante y que en el exterior cambia de definición. Se define el Modelo 1 el cual considera la sección transversal interior constante con respecto a la profundidad, y el denominado Modelo 2 que considera la sección transversal interior variable. Se define un esquema numérico (basado en diferencias finitas) para la resolución del Modelo 1 y se demuestra la convergencia a la solución de entropía BV_t . Además se estudia el caso estacionario y se obtienen algunas soluciones estacionarias del problema bajo diferentes condiciones de alimentación.

Un esquema de tipo “upwind” es utilizado por Bürger, Coronel y Sepúlveda (2006) para la resolución numérica de un problema de valores iniciales y de frontera de una ecuación diferencial parabólica fuertemente degenerada que modela distintos tipos de sedimentación; sedimentación por gravedad, sedimentación centrífuga en un tubo giratorio y sedimentación por rotación de una canasta. La ecuación diferencial presentada en este trabajo posee una función de flujo más general que la dada por Kynch para sedimentación batch. Se realiza un cambio de variable espacial para simplificar el análisis y se determinan una serie de cotas que permiten mostrar la convergencia del método a la solución de entropía (condición de entropía definida en Bürger et al., 2005). Además se muestran algunos resultados numéricos para diferentes funciones de área de sección transversal. El cambio de variables utilizado en este trabajo es definido en el Capítulo 3 de este trabajo y la resolución utilizando este cambio de variables se denomina *Método 2*.

El modelo para sedimentación continua denominado *modelo de Bürger-Diehl*, el cual considera una función de flujo que depende discontinuamente de la posición espacial y de la función de flujo batch propuesta por Kynch (1952), también incorpora un término singular el cual describe el mecanismo de alimentación, un término degenerado para la compresión y un término de dispersión para la turbulencia producida por el mecanismo de alimentación. Este modelo es propuesto por Bürger, Diehl y Nopens (2011). En este trabajo se presenta la metodología a seguir para un modelamiento consistente en plantas de tratamiento de aguas servidas (PTAS) y se presenta un método numérico basado en diferencias finitas

para la obtención de la solución aproximada. Se presentan además simulaciones obtenidas con el método numérico propuesto, analizando los cambios producidos al ir incorporando los efectos de compresión y dispersión respectivamente, se muestra también la ventaja de utilizar este modelo y resolución numérica comparado con el propuesto en Takács et al. (1991) el cual produce soluciones físicamente incorrectas al considerar el denominado *Test de Diehl* (concentración inicial localizada por sobre un bloque de agua). En Torfs et al. (2012) se utiliza el *modelo de Bürger-Diehl* considerando funciones de compresión y dispersión dadas por De Clercq et al. (2008), en este trabajo se presenta una generalización a la función de flujo dada en Takács et al. (1991), además se muestra que el número de capas propuesto por el método de Takács es insuficiente para aproximar una correcta solución y se comenta que el supuesto de que la concentración de desborde y de descarga sean iguales a las concentraciones en el tope y fondo del sedimentador es errónea dado que la masa aún fuera del sedimentador se conserva. En Bürger et al, (2012) se utiliza el *modelo de Bürger-Diehl* planteado en Bürger et al. (2011) y se comparan dos aproximaciones distintas para el flujo numérico, una denominada método G que utiliza una aproximación basada en el flujo de Godunov para la función de densidad de flujo batch de Kynch, y la otra denominada método EO que considera una aproximación del flujo utilizando el método de Engquist-Osher. También se presenta en este trabajo una demostración de que la aproximación del flujo numérico propuesta en Takács et al. (1991) en general no es monótona, además se muestra que la aproximación de flujo dada por Lax-Friedrichs pese a ser monótona no garantiza la monotonía del esquema numérico general y se mencionan otras aproximaciones al flujo compresivo que no son conservativas. Se comparan además las soluciones obtenidas por el método G versus el método de Takács.

El trabajo de Bürger et al. (2013b) representa una continuación a los antes mencionados (Bürger et al., 2011, 2012), en este trabajo se presenta detalladamente la implementación computacional del método numérico empleado para la resolución del *modelo de Bürger-Diehl*, se presentan los pseudocódigos utilizados para la aproximación de la función de densidad de flujo batch de Kynch mediante el método de Godunov, junto con el pseudocódigo de la primitiva de la función de compresión. Se comparan las soluciones aproximadas para diferentes intervalos de acción de la función de dispersión, además se muestra que la concentraciones de efluente y descarga cumplen con la conservación de masa. Los trabajos realizados por Bürger et al. (2011, 2012, 2013b) sólo consideran el caso de sección transversal constante.

Otros modelos han sido propuestos por diferentes autores, entre ellos se destacan los trabajos de De Clercq et al. (2008), Diehl & Jeppsson (1998), Dupont et al. (1995), Ekama et al. (1997) Henze et al. (1987), Plósz et al. (2007) y Queinnec et al. (2001).

1.3. Conceptos importantes

Se define el sistema de leyes de conservación unidimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial f}{\partial x}(u(x, t)) = 0, \quad (1.1)$$

con $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ el vector de variables conservadas (o variables de estado), y $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ el vector de flujos. A la ecuación anterior en general se incluyen condiciones iniciales y de frontera. La ecuación así definida será denominada hiperbólica si la matriz funcional $\partial_u f$ es diagonalizable (valores propios reales) y se dira que es estrictamente hiperbólica si además de ser diagonalizable los valores propios de $\partial_u f$ son todos distintos. Un método clásico de resolución de ecuaciones hiperbólicas es el método de las características. Se sabe que las soluciones a la ecuación (1.2) dado un dato inicial $u(x, 0) = u_0(x)$ (que puede ser discontinuo) en general no son suaves, por lo cual es necesario buscar soluciones en el sentido débil. En adelante nos referiremos a (1.2) sólo para el caso $m = 1$. La formulación débil de (1.2) queda dada por

$$\forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty)) : \int_{\mathbb{R}} \int_0^\infty \left(u \frac{\partial \phi}{\partial t} + f(u) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt dx + \int_{\mathbb{R}} u_0(x) \phi(x, 0) dx = 0. \quad (1.2)$$

Las discontinuidades de la solución u que son compatibles con la formulación débil de (1.2) deben cumplir con la condición de Rankine-Hugoniot.

Definición 1.3.1 (Condición de Rankine-Hugoniot). Suponemos una discontinuidad aislada que se desplaza a lo largo de una curva suave $\Gamma : x = x(t)$, esto significa que $u(x, t)$ es diferenciable en una vecindad suficientemente pequeña de $x(t)$, donde u satisface la ley de conservación en el sentido clásico (1.2). Sea $s = x'(t)$, entonces la condición de Rankine-Hugoniot esta definida por

$$s = \frac{f(u_l) - f(u_r)}{u_l - u_r}$$

donde

$$u_{l,r} = \lim_{x \rightarrow x(t)^\mp} u(x, t).$$

La solución débil en general no es única, por lo cual es necesario introducir un concepto de admisibilidad, la denominada condición de entropía (solución físicamente relevante).

Definición 1.3.2 (Condición de entropía de Kružkov). Una solución u de (1.2) se denomina solución débil en el sentido de Kružkov o solución débil de Kružkov si cumple la desigualdad

$$\frac{\partial}{\partial t} |u - k| + \frac{\partial}{\partial x} (\text{sgn}(u - k) (f(u) - f(k))) \leq 0 \quad \forall k \in \mathbb{R},$$

en el sentido distribucional, es decir $\forall k \in \mathbb{R}, \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times [0, T]), \phi \geq 0$:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left(|u - k| \frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{sgn}(u - k) (f(u) - f(k)) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt \geq 0,$$

para algún $T \in \mathbb{R}$.

Se dice además que la ecuación (1.2) es de flujo discontinuo si la función f es discontinua con respecto a la variable espacial. Las ecuaciones con flujo discontinuo revisten mayor

complejidad que aquellas en que el flujo es diferenciable o continuo. Este tipo de ecuaciones introduciendo un término forzante singular ha sido estudiada por Diehl (1995), junto con su aplicación a sedimentación continua (Diehl, 1996).

En el transcurso de este trabajo el término ecuación parabólica fuertemente degenerada, será utilizado para referirse a una ecuación parabólica (de segundo orden) cuyo comportamiento varía dependiendo de la función incógnita. Un ejemplo de esto es la ecuación diferencial de segundo orden del tipo

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial f}{\partial x}(u(x, t)) = \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}(u(x, t)), \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T], \quad (1.3)$$

con S función no negativa tal que

$$S(u) \begin{cases} = 0 & \text{si } 0 \leq u \leq u_c, \\ > 0 & \text{si } u > u_c \end{cases}$$

donde $u_c \in \mathbb{R}^+$. Notar que la ecuación (1.3) es de tipo hiperbólica de primer orden para $u \in [0, u_c]$ y parabólica de segundo orden cuando $u > u_c$.

En adelante se considera el conjunto $\Pi_T := \mathbb{R} \times (0, T)$ para algún $T \in \mathbb{R}^+$. Se define $\mathcal{M}(\Pi_T)$ como el espacio de medidas de Radon finitas en Π_T .

Definición 1.3.3 (Espacios BV y BV_t). Se define el espacio de variación acotada $BV(\Pi_T)$ como el espacio de las funciones localmente integrables $W : \Pi_T \rightarrow \mathbb{R}$ tales que $\partial_z W, \partial_t W \in \mathcal{M}(\Pi_T)$. Además se define el espacio $BV_t(\Pi_T)$ como el espacio de las funciones localmente integrables $W : \Pi_T \rightarrow \mathbb{R}$ tales que $\partial_t W \in \mathcal{M}(\Pi_T)$. Observar que $BV(\Pi_T) \subset BV_t(\Pi_T)$.

El espacio BV_t juega un rol fundamental en el estudio de las soluciones de entropía para la ecuación parabólica fuertemente degenerada en trabajos relacionados (Bürger et al, 2005).

Capítulo 2

Modelo matemático

2.1. Descripción del proceso

El proceso de sedimentación, espesamiento o clarificación, consiste en la operación de separar parte del líquido de una suspensión para obtener un flujo de agua clara o líquido más puro y por otro lado materia más densa obtenida de la suspensión. En nuestro caso para el tratamiento de aguas servidas el término clarificación es el más indicado, dado que se desea recuperar agua lo más clara (pura) posible. El mecanismo que se considera en este trabajo es el de clarificación producido por fuerza de gravedad, es decir, la fuerza de gravedad hace gran parte del trabajo al provocar el movimiento de las partículas más densas en dirección hacia abajo (hacia el suelo o centro de la tierra). Se denomina sedimentador o tanque al recipiente que contiene la suspensión y en donde se lleva a cabo la separación sólido-líquido, éste último está compuesto por un mecanismo de alimentación, uno de descarga y otro de desborde, de los cuales en el de alimentación se introduce suspensión al interior del tanque, y las otras dos se extrae materia densa y agua clara respectivamente. El tanque se considera con sección transversal horizontal circular, cuyo radio varía con respecto a la profundidad con respecto a un eje vertical.

En la Figura 2.1 se aprecia el diagrama de un sedimentador, en ella se pueden identificar tres niveles importantes, el nivel de desborde, dado en $z = -H$, que corresponde a la parte superior del sedimentador, el nivel de alimentación, dado en $z = 0$ que corresponde donde al nivel en donde se introduce la suspensión de alimentación y el nivel de descarga en $z = B$, es decir en la parte inferior del sedimentador y en el cual se extrae la materia más densa. Además se definen zonas importantes dentro y fuera del sedimentador, la *zona de desborde* que corresponde a la zona en la cual se extrae el flujo de desborde, en general se encuentra el agua pura o con una baja concentración de partículas, la *zona de clarificación* dada para profundidades comprendidas entre $-H$ y B , la *zona de espesamiento* dada entre $z = 0$ y $z = B$ en la cual la concentración suele ser elevada hacia el fondo, y por último la *zona de descarga* dada para profundidades superiores a $z = B$ y es en esta zona donde se extrae el flujo de descarga.

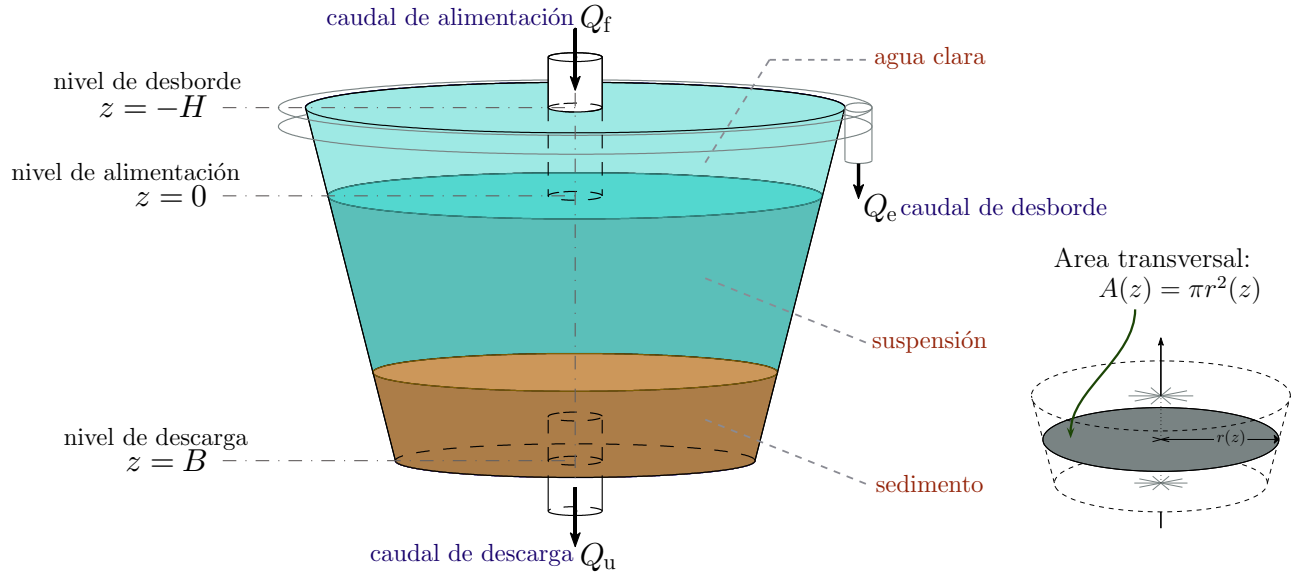


Figura 2.1: Esquema de un sedimentador con área variable. A la izquierda se aprecia el sedimentador junto con sus niveles y los caudales de alimentación Q_f , desborde Q_e y de descarga Q_u , H representa el alto de la zona de clarificación y B el alto de la zona de espesamiento. A la derecha un diagrama con el área del corte transversal horizontal. El área A depende de la profundidad z .

2.2. Suposiciones y ecuación del problema

La deducción de las ecuaciones del modelo ya fueron estudiadas en Bürger et al. (2004), Bürger et al. (2005) y Bürger et al. (2011), en estos trabajos la ecuación gobernante o ecuación principal, se desprende de la ecuación de conservación de masa (o de continuidad) considerando la función de flujo dada por Kynch (1952), el efecto de compresión y el de dispersión, además de los efectos producidos por la alimentación en $z = 0$. A continuación se muestra la deducción de las ecuaciones extraída de los trabajos antes mencionados.

Para desarrollar el modelo a partir de las ecuaciones que rigen el comportamiento físico del proceso de separación se tienen en cuenta los siguientes supuestos:

1. La concentración de partículas es uniforme en una capa horizontal. La concentración varía con respecto a la profundidad.
2. Los efectos producidos por la pared son despreciables.
3. La velocidad de sedimentación en la zona de no compresión depende únicamente de la concentración de los sólidos
4. La velocidad de sedimentación tiende hacia cero cuando la concentración se aproxima a la concentración máxima denotada por C_{\max} .

La primera suposición implica que el problema es en una dimensión espacial, es decir, sólo hay dependencia con respecto a la profundidad (eje vertical) denotada por z y medida

en metros. La incógnita de nuestro problema es la concentración con respecto a la profundidad y al tiempo t medido en segundos, denotada por $C := C(z, t)$ medida en kilogramos por metro cúbico (kg/m^3). Como se vio en la sección anterior el tanque esta comprendido entre $z = -H$ y $z = B$, siendo $z < -H$ la parte exterior superior y $z > B$ la parte exterior inferior al tanque. Se considera la ecuación de conservación de masa unidimensional para la concentración de sólido en un fluido

$$A(z) \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (A(z) C v_s) = 0, \quad (2.1)$$

donde $-H \leq z \leq B$ para $t > 0$ y v_s representa la velocidad del sólido. Eventualmente se considera $t < T$ con T el tiempo final del proceso. Reemplazando en la ecuación de continuidad $1 - C$ en lugar de C y la velocidad del fluido v_f en vez de v_s , la ecuación de conservación de masa para el fluido queda dada por

$$-A(z) \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (A(z) (1 - C) v_f) = 0, \quad -H \leq z \leq B, \quad t > 0. \quad (2.2)$$

Definiendo el flujo

$$Q := A(z) (C v_s + (1 - C) v_f), \quad (2.3)$$

y sumando las ecuaciones (2.1) y (2.2) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial z} (Q(z, t)) = 0, \quad -H \leq z \leq B, \quad t > 0.$$

Esto implica que $Q(\cdot, t)$ es constante como función de z , es decir: $Q(z, t) = Q_D(t)$ para $-H \leq z \leq B$, y $t > 0$ con Q_D una función que sólo depende del tiempo. Por otro lado definiendo la velocidad relativa $v_r := v_s - v_f$, la cual es una cantidad objetiva y por lo tanto se pueden introducir ecuaciones constitutivas en términos de ella. Utilizando la ecuación (2.3) se determina la relación

$$C v_s = \frac{Q_D(t)}{A(z)} C + C(1 - C) v_r,$$

la cual al ser reemplazada en (2.1) se encuentra la ecuación

$$\frac{\partial (A(z) C)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(Q_D(t) C + A(z) C(1 - C) v_r \right) = 0. \quad (2.4)$$

A partir de la teoría de Kynch se supone que $v_r = v_r(C)$ y además v_r se representa en términos de la función densidad de flujo de sedimentación batch f_{bk} , la cual es usualmente diferenciable a trozos y satisface $f_{bk}(C) = 0$ para $C \leq 0$ o $C \geq C_{\max}$. La función densidad de flujo batch de Kynch satisface

$$\begin{aligned} f_{bk}(C) &> 0, & 0 < C < C_{\max}, \\ f'_{bk}(0) &> 0, \\ f'_{bk}(C_{\max}) &\leq 0. \end{aligned}$$

Se considera que el sedimentador es alimentado con una suspensión a una concentración $C_f := C_f(t)$ con flujo volumetrico $Q_f := Q_f(t)$ en $z = 0$. Este término es incorporado a la ecuación (2.4) a través de la distribución delta de Dirac como un término fuente singular. Por otro lado el modelo provisto por la teoria fenomenológica de sedimentación en Bürger et al. (2011; 2012; 2013b) denominado modelo Bürger-Diehl incluye en la velocidad v_r los efectos de convección dados por la función f_{bk} descrita por Kynch, de compresión y de difusión (debido a la alimentación en $z = 0$), esto es

$$v_r(C; z, t) = \frac{1}{C(1 - C)} \left(f_{bk}(C) - (d_{comp}(C) + d_{disp}(z, Q_f(t))) \frac{\partial C}{\partial z} \right),$$

donde d_{comp} incluye como factor la derivada del esfuerzo unidimensional del sólido $\sigma'_e(C) := d(\sigma_e(C))/dC$, el cual satisface

$$\sigma'_e(C) \begin{cases} = 0 & \text{si } C < C_c, \\ > 0 & \text{si } C \geq C_c, \end{cases} \quad (2.5)$$

donde C_c es una concentración crítica que depende del material en el que las partículas sólidas comienzan a tocarse. El término d_{disp} involucra los efectos de dispersión producidos por la alimentación en $z = 0$ y actúa sobre un intervalo reducido (de longitud menor que H y B) centrado en $z = 0$. Reemplazando v_r en (2.4) obtenemos la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial (A(z)C)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (Q_D(t)C + A(z)f_{bk}(C)) &= \frac{\partial}{\partial z} \left(A(z) \{d_{comp}(C) + d_{disp}(z, Q_f(t))\} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ Q_f(t) C_f(t) \delta(z). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Se supone que el flujo volumétrico o caudal volumétrico Q_D se compone de dos funciones dependiendo de z , el caudal de desborde $Q_e := Q_e(t) \geq 0$ para $z < 0$ y el caudal de descarga $Q_u := Q_u(t) \geq 0$ para $z > 0$ ambos caudales de salida del sedimentador, cumpliendo ambos la relación $Q_f(t) = Q_e(t) + Q_u(t)$, así

$$Q_D(t) = \begin{cases} -Q_e(t) & \text{si } z < 0, \\ Q_u(t) & \text{si } z > 0. \end{cases}$$

Además se supone que ambas fases se mueven con la misma velocidad en la tubería, con lo cual $v_r = 0$ fuera del equipo. Lo anterior permite extender el dominio espacial para $z < -H$ y $z > B$, así la ecuación (2.6) se escribe en su forma general como

$$\begin{aligned} \frac{\partial (A(z)C)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (F(C, z, t)) &= \frac{\partial}{\partial z} \left(A(z) \{ \gamma(z) d_{comp}(C) + d_{disp}(z, Q_f(t)) \} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ Q_f(t) C_f(t) \delta(z), \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde la función de flujo F queda dada por

$$F(C, z, t) := \begin{cases} -Q_e(t)C & \text{para } z < -H, \\ -Q_e(t)C + A(z)f_{bk}(C) & \text{para } -H \leq z < 0, \\ Q_u(t)C + A(z)f_{bk}(C) & \text{para } 0 < z \leq B, \\ Q_u(t)C & \text{para } z > B \end{cases}$$

y la función indicador del interior

$$\gamma(z) = \begin{cases} 1, & \text{si } -H \leq z \leq B, \\ 0, & \text{si } z < -H \text{ o } z > B. \end{cases}$$

Se supone conocido el perfil inicial de concentración a lo largo del sedimentador, esto es

$$C(z, 0) = C_0(z), \quad -H \leq z \leq B$$

y en la frontera sólo se requiere que se conserve la transferencia de masa hacia $z < -H$ y $z > B$ respectivamente, lo cual queda dado al escribir la ecuación gobernante en su forma extendida, para la correcta implementación de un método numérico se deberán incluir celdas extras en la discretización.

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{z_1}^{z_2} A(z)C(z, t) dz = \{\Phi|_{z=z_1} - \Phi|_{z=z_2}\} + \int_{z_1}^{z_2} Q_f(t) C_f(t) \delta(z) dt, \quad (2.8)$$

donde el flujo total Φ está dado por

$$\Phi \left(C, \frac{\partial C}{\partial z}, z, t \right) = F(C, z, t) - (\gamma(z)A(z)d_{\text{comp}}(C) + A(z)d_{\text{disp}}(z, Q_f(t))) \frac{\partial C}{\partial z}.$$

La ecuación (2.8) es la forma integral de la ecuación principal. Aquí la función de flujo convectivo, que envuelve la función de densidad de flujo batch dada por Kynch es

$$f_{\text{bk}}(C) := C v_{\text{hs}}(C),$$

donde v_{hs} es la velocidad de sedimentación obstaculizada (Kynch (1952)). La función $d_{\text{comp}} = d_{\text{comp}}(C)$ representa la compresibilidad del sedimento, y la función de dispersión $d_{\text{disp}} = d_{\text{disp}}(z, Q_f)$ incorpora la mezcla de concentraciones de lodo inferior y superior, ésta función agrupa varios mecanismos relacionados con la densidad y corrientes turbulentas producidos por la alimentación cerca de $z = 0$.

Bajo el supuesto de que las partículas siguen las corrientes de agua en los tubos de salida, las concentraciones en el exterior del tanque son independientes de las áreas de los tubos (Diehl, 2000). Esto nos permite suponer que la función de área en el exterior del sedimentador queda dada por

$$A(z) = \begin{cases} A(-H) & \text{si } z < -H, \\ A(B) & \text{si } z > B. \end{cases}$$

La función de compresión d_{comp} es dada en Bürger et al. (2005)

$$d_{\text{comp}}(C) = \frac{\rho_s}{(\rho_s - \rho_f)g} v_{\text{hs}}(C) \sigma'_e(C), \quad (2.9)$$

donde ρ_s y $\rho_f < \rho_s$ son las (constante) densidades de masa de sólido y fluido, g es la aceleración de gravedad, y $\sigma_e = \sigma_e(C)$ es la función esfuerzo efectivo del sólido, cuya derivada satisface (2.5). La función de dispersión d_{disp} es a menudo obtenida como el producto de la velocidad del fluido y alguna escala de longitud característica (Anderson y Edwards, 1981; Lee et al., 2006). Para capturar la mezcla de fenómenos causados por la entrada de alimentación, establecemos

$$d_{\text{disp}}(z, Q_f(t)) = \frac{Q_f}{A(z)} L(z, Q_f(t)), \quad (2.10)$$

donde L es una función continua, que es cero a cierta distancia de la entrada. El modelo captura que una vez que una porción de barro en suspensión abandona el sedimentador a través de una de las salidas, este no retorna, si restringimos al interior

$$d_{\text{disp}}(z, Q_f(t)) \begin{cases} = 0 & \text{si } z \leq -H \text{ y } z \geq B, \\ > 0 & \text{si } -H < z < B. \end{cases}$$

Los ingredientes d_{disp} y d_{comp} son independientes el uno del otro, pudiendo asumir que no hay compresión $d_{\text{comp}} \equiv 0$ o que no hay dispersión $d_{\text{disp}} \equiv 0$ o ambas.

2.3. Funciones constitutivas

Las funciones constitutivas en el modelo están dadas por $v_{\text{hs}}(C)$, $\sigma_e(C)$ y $d_{\text{disp}}(z, Q_f)$. Para la velocidad de sedimentación obstaculizada una opción es utilizar

$$v_{\text{hs}}(C) = v_0 e^{-r_v C}, \quad (2.11)$$

donde v_0 es la velocidad de sedimentación máxima teórica y r_v es un parámetro. Otra expresión común es la función doble exponencial propuesta por Takács:

$$v_{\text{hs}}(C) = \max \left\{ 0, \min \left\{ \tilde{v}_0, v_0 \left(e^{-r_h(C-C_{\text{mín}})} - e^{-r_p(C-C_{\text{mín}})} \right) \right\} \right\},$$

donde \tilde{v}_0 y v_0 son las velocidades de sedimentación máxima práctica y teórica respectivamente, r_h y r_p son parámetros de sedimentación, y $C_{\text{mín}}$ es la concentración cuando $v_{\text{hs}} = 0$. Existen otras expresiones para v_{hs} las cuales no han sido calibradas en el CMM, pero que no serían difíciles de implementar dada la estructura del CMM.

Para el esfuerzo sólido efectivo $\sigma_e(C)$, De Clercq et al. (2008) propone la siguiente formula semi-empírica basada en modelación a la inversa utilizando datos experimentales:

$$\sigma_e(C) = \begin{cases} 0 & \text{si } C \leq C_c, \\ \alpha \ln \left(1 + \frac{C - C_c}{\beta} \right) & \text{si } C \geq C_c, \end{cases} \quad (2.12)$$

con parámetros empíricos $\alpha, \beta > 0$. Funciones empíricas han sido sugeridas para d_{comp} directamente (Vaccari y Uchrin, (1989); Cacossa y Vaccari, (1994)). Para definir la función

d_{comp} se utiliza la ecuación (2.9) junto con (2.11) y (2.12), además de la propiedad 2.5, esto es

$$d_{\text{comp}}(C) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq C \leq C_c, \\ \frac{\rho_s \alpha v_0 e^{-rvC}}{g(\rho_s - \rho_f)(\beta + C - C_c)} & \text{si } C \leq C_c \end{cases}$$

Para la función de dispersión d_{disp} , utilizamos una función que cumpla con la ecuación (2.10), escogemos

$$d_{\text{disp}}(z, Q_f(t)) = \begin{cases} \alpha_1 Q_f \exp\left(\frac{-z^2 / (\alpha_2 Q_f)^2}{1 - |z| / (\alpha_2 Q_f)}\right) & \text{si } |z| < \alpha_2 Q_f, \\ 0 & \text{si } |z| \geq \alpha_2 Q_f \end{cases} \quad (2.13)$$

donde α_1 y α_2 son parámetros positivos (α_1 contiene A). En particular, $\alpha_2 Q_f$ determinan el tamaño de la región de dispersión. En (2.10) se requiere que

$$\alpha_2 < \frac{\min(H, B)}{\max_{t \geq 0} Q_f(t)}.$$

2.4. Propiedad de la ecuación gobernante

Se observa que la ecuación gobernante (2.7) tiene distintos comportamientos dependiendo de la profundidad y de la concentración, así la ecuación es:

$$\begin{aligned} &\textit{hiperbólica} \text{ de primer orden para } C \leq C_c \text{ o } z \notin [-\alpha_2 Q_f, \alpha_2 Q_f], \\ &\textit{parabólica} \text{ de segundo orden para } C_c < C < C_{\text{max}} \text{ o } z \in (-\alpha_2 Q_f, \alpha_2 Q_f). \end{aligned}$$

Por lo tanto la ecuación diferencial es del tipo parabólica fuertemente degenerada. Esta ecuación posee ingredientes que hacen que su análisis sea particularmente complejo, entre ellos se destaca que la función de flujo F es discontinua con respecto a la variable espacial y no lineal, que posee un término singular introducido mediante la distribución de dirac, el término degenerado (no lineal) que involucra las funciones d_{comp} y d_{disp} que implica un cambio en el orden de la ecuación y que además produce una degeneración de la ley de conservación no lineal de primer orden.

Las soluciones para ecuaciones de leyes de conservación no lineales son en general discontinuas y deben ser definidas como soluciones débiles, en nuestro caso dada la naturaleza de la ecuación (2.7) se debe introducir una condición de entropía adecuada para este tipo de ecuaciones.

2.5. Solución de entropía

Para el caso de una ecuación diferencial hiperbólica algunos ejemplos de condiciones de entropía son las dadas por Lax (1957), Oleinik (1963) o Kružkov (1970). La condición

de entropía considerada para el problema de valores iniciales definido por la ecuación (2.7), más la condición inicial para el caso de un sedimentador cuya función de área es constante en el interior con cambio de definición hacia el exterior del tanque en ausencia de dispersión ($d_{\text{disp}} \equiv 0$) es presentada en Bürger et al. (2005), En trabajo realizado por Bürger et al. (2006) se utiliza una función de área variable que no admite discontinuidades y que tampoco considera el efecto de la dispersión para la definición de la condición de Entropía. En ambos trabajos para definir la condición de entropía se utiliza un cambio de variables que permite transformar la ecuación diferencial a una forma conservativa, la condición es denominada *solución débil entrópica* BV_t y considera la regularidad de la función en el subespacio $L^1(\Pi_T) \cap BV_t(\Pi_T)$, que a su vez sea solución débil de la ecuación diferencial, que la función cumpla la condición inicial en el sentido de la topología fuerte de L^1 , junto con la continuidad de la primitiva de la función de compresión en la frontera del tanque y un tipo de desigualdad de Kružkov que considera la discontinuidades en el flujo.

El problema de la definición de una condición de entropía más general que considere el caso de una función de área discontinua y el efecto de dispersión representa un problema cuyo alcance no es el de este trabajo de memoria, esto se deja como un problema abierto y representa un posible trabajo a futuro.

Capítulo 3

Esquema numérico

3.1. Método 1

El tanque es dividido en N capas equiespaciadas, es decir, cada capa tiene el tamaño $\Delta z = (H + B) / N$. Se define además $z_j := j\Delta z - H$ y $z_{j+1/2} := (j + 1/2)\Delta z - H$ para $j = 0, \dots, N - 1$ las posiciones en las cuales se localiza la frontera de cada una de las N capas. La frontera del tanque está localizada en $z_0 = -H$ y $z_N = B$. La j -ésima capa corresponde al intervalo $[z_{j-1}, z_j]$, $j = 1, \dots, N$. La solución aproximada en cada una de las capas la definimos por $C_j := C_j(t)$, y representa el promedio de la solución exacta en dicho intervalo, esto es

$$C_j \approx \frac{1}{\Delta z} \int_{z_{j-1}}^{z_j} C(z, t) dz.$$

La alimentación del tanque se posiciona en la posición $z = 0$ y dado que el valor de N es un natural arbitrario, puede no coincidir con uno de los nodos z_j , por lo cual se toma el nodo $j = j_f$ más cercano a $z = 0$,

$$z_{j_f} = \left\lceil \frac{H}{\Delta z} \right\rceil.$$

Entonces la alimentación se encuentra en algún punto de $(z_{j_f-1}, z_{j_f}]$. Este intervalo es denominado capa de alimentación. Para la correcta aproximación de las derivadas espaciales presentes en la ecuación general, es necesario extender el dominio e introducir cuatro capas extra, dos en la zona de efluente y dos en la zona de descarga, las cuales además permiten obtener la concentración en la zona de descarga. Considerando las capas extra de la misma longitud Δz , los puntos que conforman el dominio espacial son z_j para $j = -2, \dots, N + 2$. Definimos además las concentraciones en la zona de efluente y de descarga por $C_e(t) = C_{-1}$ y $C_u(t) = C_{N+2}$.

Se introducen las siguientes funciones:

$$D(C) := \int_{C_c}^C d_{\text{comp}}(s) ds$$

con lo cual $\frac{\partial D(C)}{\partial z} = d_{\text{comp}}(C) \frac{\partial C}{\partial z}$. Además se definen

$$J_{\text{comp}}(z, t) := \gamma(z) \frac{\partial D(C)}{\partial z} \quad \text{y} \quad J_{\text{disp}}(z, t) := d_{\text{disp}}(z, Q_f(t)) \frac{\partial C}{\partial z}.$$

Con la introducción de estas variables, la ecuación gobernante se reescribe como

$$\frac{\partial (A(z) C)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} (F(C, z, t)) + \frac{\partial}{\partial z} (A(z) (J_{\text{comp}}(z, t) + J_{\text{disp}}(z, t))) + Q_f(t) C_f(t) \delta(z). \quad (3.1)$$

Aproximación del flujo convectivo

El flujo convectivo para la interfaz entre dos celdas, en este caso, la celda j y la celda $j + 1$ puede ser aproximado de la forma siguiente:

$$F_j^{\text{num}}(C_j, C_{j+1}; z_{j+1/2}, t) := \begin{cases} -Q_e(t)C_{j+1} & \text{para } j = -2, -1, \\ -Q_e(t)C_{j+1} + A(z_{j+1/2})f_{\text{bk},j}^* & \text{para } j = 0, \dots, j_f - 1, \\ Q_u(t)C_j + A(z_{j+1/2})f_{\text{bk},j}^* & \text{para } j = j_f, \dots, N, \\ Q_u(t)C_j & \text{para } j = N + 1, N + 2 \end{cases}$$

donde el símbolo $*$ denota que para toda celda j -ésima $f_{\text{bk},j}^* := f_{\text{bk},j}^*(C_j, C_{j+1})$ puede ser dado por el flujo de Godunov ($*$ = G)

$$f_{\text{bk},j}^G = \begin{cases} \min_{C_j \leq C \leq C_{j+1}} f_{\text{bk}}(C), & \text{si } C_j \leq C_{j+1}, \\ \max_{C_j \geq C \geq C_{j+1}} f_{\text{bk}}(C), & \text{si } C_j > C_{j+1}. \end{cases}$$

o bien para cada celda por el flujo de Engquist-Osher ($*$ = EO)

$$f_{\text{bk},j}^{\text{EO}} = f_{\text{bk}}(0) + \int_0^{C_j} \max\{f'_{\text{bk}}(s), 0\} ds + \int_0^{C_{j+1}} \min\{f'_{\text{bk}}(s), 0\} ds.$$

Se han elegido estos dos flujos numéricos en particular dado que son flujos numéricos monótonos, propiedad que se utiliza para probar la monotonía del esquema total. Notar que el flujo numérico de Lax-Friedrichs también es monótono, no obstante al considerar este flujo numérico el esquema global no es monótono.

Aproximación del flujo compresivo y difusivo

Para cada celda j -ésima la aproximación de los flujos compresivo y difusivo utilizando diferencias finitas entre las celdas j y $j + 1$ quedan dadas por

$$J_{\text{comp},j}^{\text{num}} := \gamma(z_j) \frac{D_{j+1}^{\text{num}} - D_j^{\text{num}}}{\Delta z}$$

y

$$J_{\text{disp},j}^{\text{num}} := d_{\text{disp}}(z_j, Q_f(t)) \frac{C_{j+1} - C_j}{\Delta z}.$$

La idea de este método es discretizar la ecuación (3.1) utilizando un método de líneas similar al expuesto en Bürger et al. (2013b) con la debida generalización al caso de área variable

$$\begin{aligned} \frac{dC_j}{dt} = & - \frac{F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}}}{A(z_j)\Delta z} + \frac{A(z_{j+1/2})J_{\text{comp},j}^{\text{num}} - A(z_{j-1/2})J_{\text{comp},j-1}^{\text{num}}}{A(z_j)\Delta z} \\ & + \frac{A(z_{j+1/2})J_{\text{disp},j}^{\text{num}} - A(z_{j-1/2})J_{\text{disp},j-1}^{\text{num}}}{A(z_j)\Delta z} + \frac{Q_f(t)C_f(t)}{A(z_j)\Delta z} \int_{z_{j-1}}^{z_j} \delta(s) ds. \end{aligned} \quad (3.2)$$

3.2. Método 2

La idea de este método es realizar un cambio de variables espacial donde la profundidad es reemplazada por el volumen acumulado. Este método fue propuesto en Bürger et al. (2006) con la diferencia que en nuestro caso se aplica a sedimentación continua que considera efectos de difusión. Se realiza el cambio de variables

$$x(z) = \int_{-H}^z A(\eta) d\eta, \quad \text{con} \quad \frac{dx}{dz}(z) = A(z). \quad (3.3)$$

Utilizando regla de la cadena la ecuación (3.1) se reescribe como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{F}(\mathcal{C}, x, t)) + \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{A}^2(x) (\mathcal{J}_{\text{comp}}(x, t) + \mathcal{J}_{\text{disp}}(x, t))) \\ & + \frac{Q_f(t)C_f(t)}{\mathcal{A}(x)} \delta(z(x)) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Aquí la incógnita esta dada por $\mathcal{C} := C(z(x), t)$, el área en la nueva variable $\mathcal{A}(x) := A(z(x))$ y los flujos convectivo, compresivo y difusivo son

$$\mathcal{F}(\mathcal{C}, x, t) := F(\mathcal{C}, z(x), t), \quad \mathcal{J}_{\text{comp}}(x, t) := J_{\text{comp}}(z(x), t), \quad \mathcal{J}_{\text{disp}}(x, t) := J_{\text{disp}}(z(x), t).$$

Observamos que la nueva ecuación puede ser tratada de forma similar a la anterior (ecuación (3.1)) llevando a cabo los cambios de variables en cada uno de los términos que intervienen en la ecuación. La nueva variable x se encuentra entre 0 y $\mathcal{B} = \int_{-H}^B A(s) ds$, el volumen total del sedimentador. Se subdivide el nuevo intervalo en N celdas donde $x_j = j\Delta x$, $j = 0, \dots, N$ representan los extremos de cada celda y $x_{j+1/2} = (j + 1/2)\Delta x$, $j = 0, \dots, N-1$ sus centros. Para la correcta implementación de las condiciones de frontera al igual que antes se introducen cuatro celdas adicionales, las celdas -1 , 0 , $N+1$ y $N+2$ de longitud Δx . Entonces el método de líneas con el cambio de variables queda dado para cada $j = -1, \dots, N+2$ por

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{C}_j}{dt} = & -\frac{\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}}}{\Delta x} + \frac{\mathcal{A}^2(x_{j+1/2})\mathcal{J}_{\text{comp},j}^{\text{num}} - \mathcal{A}^2(x_{j-1/2})\mathcal{J}_{\text{comp},j-1}^{\text{num}}}{\Delta x} \\ & + \frac{\mathcal{A}^2(x_{j+1/2})\mathcal{J}_{\text{disp},j}^{\text{num}} - \mathcal{A}^2(x_{j-1/2})\mathcal{J}_{\text{disp},j-1}^{\text{num}}}{\Delta x} + \frac{Q_f(t)C_f(t)}{\Delta x} \int_{z(x_{j-1})}^{z(x_j)} \delta(s) ds, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde para cada $j = -1, \dots, N+2$ los operadores y funciones que aparecen en el nuevo esquema se definen por

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_j &= C(z(x_j), t), & \mathcal{F}_j^{\text{num}} &= F_j^{\text{num}}(\mathcal{C}_j, \mathcal{C}_{j+1}, z(x_j), t), \\ \mathcal{D}_j &= D(\mathcal{C}_j), & \mathcal{J}_{\text{comp},j}^{\text{num}} &= \gamma(z(x_j)) \frac{\mathcal{D}_{j+1} - \mathcal{D}_j}{\Delta x}, \\ \mathcal{A}(x_j) &= A(z(x_j)), & \mathcal{J}_{\text{disp},j}^{\text{num}} &= d_{\text{disp}}(z(x_j), Q_f(t)) \frac{\mathcal{C}_{j+1} - \mathcal{C}_j}{\Delta x}. \\ \mathcal{A}(x_{j+1/2}) &= A(z(x_{j+1/2})), \end{aligned}$$

Con nivel de alimentación en la nueva variable dado por

$$x_{j_f} = \left\lceil \frac{1}{\Delta z} \int_{-H}^0 A(\eta) d\eta \right\rceil.$$

Notar que una vez encontrada la solución mediante el método 2, al volver el cambio de variables de x a z mediante la inversa de la transformación dada en (3.3), la distancia entre cada uno de los nodos en z depende de la forma que tenga la función A , con lo cual no necesariamente tienen la misma longitud, y en consecuencia, la malla en general no será equiespaciada con respecto a la variable espacial.

3.3. Aproximación derivada temporal

Ambas formulaciones dan origen a un método completamente discretizado utilizando una aproximación de la derivada temporal. Para este trabajo utilizamos el método de Euler Explícito. Sea t^n con $n = 0, 1, 2, \dots$ los puntos de tiempo discreto y Δt tal que $t^n = n\Delta t$ para cada $n \in \mathbb{N}$, utilizando el método de Euler explícito, los esquemas dados en (3.2) y (3.5) quedan dados por

$$\begin{aligned} C_j^{n+1} = & C_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{(F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{A(z_j)} + \frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{(A(z_{j+1/2})J_{\text{comp},j}^{\text{num}} - A(z_{j-1/2})J_{\text{comp},j-1}^{\text{num}})}{A(z_j)} \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{(A(z_{j+1/2})J_{\text{disp},j}^{\text{num}} - A(z_{j-1/2})J_{\text{disp},j-1}^{\text{num}})}{A(z_j)} + \frac{\Delta t Q_f(t) C_f(t)}{A(z_j) \Delta z} \int_{z_{j-1}}^{z_j} \delta(s) ds. \end{aligned} \quad (3.6)$$

y

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_j^{n+1} = & \mathcal{C}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^2(x_{j+1/2}) \mathcal{J}_{\text{comp},j}^{\text{num}} - \mathcal{A}^2(x_{j-1/2}) \mathcal{J}_{\text{comp},j-1}^{\text{num}}) \\
& + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^2(x_{j+1/2}) \mathcal{J}_{\text{disp},j}^{\text{num}} - \mathcal{A}^2(x_{j-1/2}) \mathcal{J}_{\text{disp},j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} Q_f(t) C_f(t) \int_{z(x_{j-1})}^{z(x_j)} \delta(s) ds.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Definiendo $G := G(C_{j+1}^n, C_j^n, C_{j-1}^n; z_{j+1/2}, z_{j-1/2}, z_j, z_{j-1})$ como el operador dado por el lado derecho de (3.6) y el operador $\mathcal{G} := \mathcal{G}(\mathcal{C}_{j+1}^n, \mathcal{C}_j^n, \mathcal{C}_{j-1}^n; x_{j+1/2}, x_{j-1/2}, x_j, x_{j-1})$ definido por el lado derecho de (3.7), ambos métodos quedan escritos de forma compacta como:

$$C_j^{m+1} = G(C_{j+1}^m, C_j^m, C_{j-1}^m; z_{j+1/2}, z_{j-1/2}, z_j, z_{j-1}) \tag{3.8}$$

y

$$\mathcal{C}_j^{n+1} = \mathcal{G}(\mathcal{C}_{j+1}^n, \mathcal{C}_j^n, \mathcal{C}_{j-1}^n; x_{j+1/2}, x_{j-1/2}). \tag{3.9}$$

El valor de Δt depende en cada método del valor de Δz y Δx respectivamente, la relación en ambos métodos se busca de forma que el método sea estable y convergente mediante una condición CFL, esto se estudia en siguiente capítulo. Notar que el esquema numérico definido por (3.8) es no conservativo, pues la ecuación escrita sin realizar el cambio de variables es no conservativa, por otro lado el método definido por (3.9) es conservativo.

Capítulo 4

Condición CFL

4.1. Condición CFL método 1

La condición CFL es obtenida de tal manera que el esquema numérico sea monótono, es decir que se cumpla:

$$\frac{\partial G}{\partial C_{j-1}^n} \geq 0, \quad \frac{\partial G}{\partial C_j^n} \geq 0 \text{ y } \frac{\partial G}{\partial C_{j+1}^n} \geq 0 \quad \forall j.$$

Para realizar los cálculos de las derivadas de cada uno de los términos que componen G de forma ordenada definimos para cada $j = -1, \dots, N+2$ el operador $J_{\text{tot},j}^{\text{num}} := J_{\text{tot},j}^{\text{num}}(C_{j+1}^n, C_j^n, C_{j-1}^n; z_{j+1/2}, z_{j-1/2}, z_j, z_{j-1})$ dado por

$$J_{\text{tot},j}^{\text{num}} = A(z_{j+1/2})J_{\text{comp},j}^{\text{num}} + A(z_{j+1/2})J_{\text{disp},j}^{\text{num}},$$

con esta definición el operador G queda dado por

$$\begin{aligned} G = & C_j^n - \frac{\Delta t}{A(z_j)\Delta z} (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{A(z_j)\Delta z} (J_{\text{tot},j}^{\text{num}} - J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}}) \\ & + \frac{\Delta t Q_f(t) C_f(t)}{A(z_j)\Delta z} \int_{z_{j-1}}^{z_j} \delta(s) ds. \end{aligned}$$

Las dos funciones que se han propuesto para la aproximación del flujo f_{bk} (Godunov y Engquist-Osher) son monótonas y por lo tanto sirven para poder realizar el análisis de monotonía del esquema general, sin embargo para hacer los cálculos utilizaremos la aproximación dada por Engquist-Osher $f_{\text{bk}}^{\text{EO}}$ dado que se define a partir de una integral. Definimos para cada celda j -ésima:

$$\begin{aligned} f_{\text{bk},j}^{\prime,+} &:= \max \{f_{\text{bk}}'(C_j), 0\} \geq 0, \\ f_{\text{bk},j}^{\prime,-} &:= \min \{f_{\text{bk}}'(C_j), 0\} \leq 0. \end{aligned}$$

Luego se observa

$$\frac{\partial f_{\text{bk},j}^{\text{EO}}}{\partial C_{j+1}} = f_{\text{bk},j+1}^{\prime,-}, \quad \frac{\partial f_{\text{bk},j-1}^{\text{EO}}}{\partial C_{j-1}} = f_{\text{bk},j-1}^{\prime,+}, \quad \frac{\partial f_{\text{bk},j}^{\text{EO}}}{\partial C_j} = f_{\text{bk},j}^{\prime,+} \text{ y } \frac{\partial f_{\text{bk},j-1}^{\text{EO}}}{\partial C_j} = f_{\text{bk},j}^{\prime,-}.$$

Utilizando las definiciones de $J_{\text{comp},j}^{\text{num}}$ y $J_{\text{disp},j}^{\text{num}}$, junto con las notaciones $d_{\text{comp},j} := d_{\text{disp}}(z_j, Q_f(t))$, $d_{\text{disp},j} = d_{\text{comp}}(C_j)$, $A_j := A(z_j)$ y $A_{j+1/2} = A(z_{j+1/2})$, calculando la derivada en cada uno de los casos se tiene que

$$\frac{\partial (J_{\text{tot},j}^{\text{num}} - J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}})}{\partial C_{j-1}^n} = \begin{cases} \frac{A_{1/2}}{\Delta z} d_{\text{comp},0} & \text{si } j = 1, \\ \frac{A_{j-1/2}}{\Delta z} (d_{\text{comp},j-1} + d_{\text{disp},j-1}) & \text{si } j = 2, \dots, N, \\ \frac{A_{N+1/2}}{\Delta z} d_{\text{comp},N} & \text{si } j = N+1, \\ 0 & \text{si } j \leq 0 \text{ o } j = N+2, \end{cases}$$

la cual es no negativa, dado que todos los términos involucrados son mayores o iguales a cero, además

$$-\frac{\partial (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{\partial C_{j-1}^n} = \begin{cases} 0 & \text{si } j \leq 0, \\ A_{j-1/2} f_{\text{bk},j-1}'^+ & \text{si } j = 1, \dots, j_f, \\ Q_u(t) - A_{j-1/2} f_{\text{bk},j-1}'^+ & \text{si } j = j_f + 1, \dots, N+1, \\ Q_u(t) & \text{si } j = N+2, \end{cases}$$

también es mayor o igual a cero, luego $\partial G / \partial C_{j-1}^n \geq 0$ para todo j . De similar forma vemos que

$$\frac{\partial (J_{\text{tot},j}^{\text{num}} - J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}})}{\partial C_{j+1}^n} = \begin{cases} \frac{A_{1/2}}{\Delta z} d_{\text{comp},1} & \text{si } j = 0, \\ \frac{A_{j+1/2}}{\Delta z} (d_{\text{comp},j+1} + d_{\text{disp},j}) & \text{si } j = 1, \dots, N-1, \\ \frac{A_{N+1/2}}{\Delta z} d_{\text{comp},N+1} & \text{si } j = N, \\ 0 & \text{si } j = -1 \text{ o } j \geq N+1, \end{cases}$$

es positiva, y que

$$-\frac{\partial (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{\partial C_{j+1}^n} = \begin{cases} Q_e(t) & \text{si } j \leq 0, \\ Q_e(t) - A_{j+1/2} f_{\text{bk},j}'^- & \text{si } j = 1, \dots, j_f, \\ -A_{j+1/2} f_{\text{bk},j}'^- & \text{si } j = j_f + 1, \dots, N+1, \\ Q_u(t) & \text{si } j = N+2, \end{cases}$$

también lo es, por lo tanto $\partial G / \partial C_{j+1}^n \geq 0$ para todo j . Luego sólo se requiere analizar los casos en los cuales $\partial G / \partial C_j^n \geq 0$, dado que estas derivadas involucran una gran cantidad de términos las escribimos en cada uno de los niveles por separado

zona de desborde $j = -1$:

$$\frac{\partial G}{\partial C_{-1}^n} = 1 - \frac{1}{A_{-1}} \frac{\Delta t}{\Delta z} Q_e(t),$$

zona de desborde $j = 0$:

$$\frac{\partial G}{\partial C_0^n} = 1 - \frac{1}{A_0} \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{1/2} f_{\text{bk},0}'^+ + Q_e(t)) + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} (A_{1/2} d_{\text{comp},0}) \right),$$

zona de clarificación $j = 1$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial C_1^n} = 1 - \frac{1}{A_1} & \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{3/2} f'_{\text{bk},1}{}^+ - A_{1/2} f'_{\text{bk},1}{}^- + Q_e(t)) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{3/2} + A_{1/2}) d_{\text{comp},1} + A_{3/2} d_{\text{disp},1}) \right), \end{aligned}$$

zona de clarificación $j = 2, \dots, j_f - 1$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial C_j^n} = 1 - \frac{1}{A_j} & \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{j+1/2} f'_{\text{bk},j}{}^+ - A_{j-1/2} f'_{\text{bk},j}{}^- + Q_e(t)) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{j-1/2} + A_{j+1/2}) d_{\text{comp},j} + A_{j+1/2} d_{\text{disp},j} + A_{j-1/2} d_{\text{disp},j-1}) \right), \end{aligned}$$

nivel de alimentación $j = j_f$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial C_{j_f}^n} = 1 - \frac{1}{A_{j_f}} & \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{j_f+1/2} f'_{\text{bk},j_f}{}^+ - A_{j_f-1/2} f'_{\text{bk},j_f}{}^- + Q_e(t) + Q_u(t)) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{j_f+1/2} + A_{j_f-1/2}) d_{\text{comp},j_f} + A_{j_f+1/2} d_{\text{disp},j_f} + A_{j_f-1/2} d_{\text{disp},j_f-1}) \right), \end{aligned}$$

zona de espesamiento $j = j_f + 1, \dots, N - 1$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial C_j^n} = 1 - \frac{1}{A_j} & \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{j+1/2} f'_{\text{bk},j}{}^+ - A_{j-1/2} f'_{\text{bk},j}{}^- + Q_u(t_n)) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{j-1/2} + A_{j+1/2}) d_{\text{comp},j} + A_{j+1/2} d_{\text{disp},j} + A_{j-1/2} d_{\text{disp},j-1}) \right), \end{aligned}$$

nivel de descarga $j = N$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial C_N^n} = 1 - \frac{1}{A_N} & \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{N+1/2} f'_{\text{bk},N}{}^+ - A_{N-1/2} f'_{\text{bk},N}{}^- + Q_u(t_n)) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{N+1/2} + A_{N-1/2}) d_{\text{comp},N} + A_{N-1/2} d_{\text{disp},N-1}) \right), \end{aligned}$$

zona de descarga $j = N + 1$:

$$\frac{\partial G}{\partial C_{N+1}^n} = 1 - \frac{1}{A_{N+1}} \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (-A_{N+1/2} f'_{\text{bk},N+1}{}^- + Q_u(t_n)) + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} (A_{N+1/2} d_{\text{comp},N+1}) \right),$$

zona de descarga $j = N + 2$:

$$\frac{\partial G}{\partial C_{N+2}^n} = 1 - \frac{1}{A_{N+2}} \frac{\Delta t}{\Delta z} Q_u(t_n).$$

Donde se observa que $\partial G / \partial C_j^n$ será mayor o igual a cero siempre y cuando se cumpla que para cada celda j -ésima

$$1 \geq \frac{1}{A_j} \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (A_{j+1/2} f'_{\text{bk},j}{}^+ - A_{j-1/2} f'_{\text{bk},j}{}^- + Q_e(t) + Q_u(t)) \right. \\ \left. + \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} ((A_{j+1/2} + A_{j-1/2}) d_{\text{comp},j} + A_{j+1/2} d_{\text{disp},j} + A_{j-1/2} d_{\text{disp},j-1}) \right),$$

Lo cual dado que en el lado derecho todos los términos presentes son no negativos, es posible concluir

$$\frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{\max\{Q_f(t)\}}{\min\{A(z)\}} + \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}} \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} (f'_{\text{bk},j}{}^+ - f'_{\text{bk},j}{}^-) + \frac{2\Delta t}{(\Delta z)^2} (\|d_{\text{comp}}\|_\infty + \|d_{\text{disp}}\|_\infty) \right) \leq 1,$$

en donde se tiene que

$$f'_{\text{bk},j}{}^+ - f'_{\text{bk},j}{}^- = \max\{f'_{\text{bk}}(C_j), 0\} - \min\{f'_{\text{bk}}(C_j), 0\} = |f'_{\text{bk}}(C_j)|,$$

por lo tanto

$$\frac{\partial f_{\text{bk},j}^G}{\partial C_j} - \frac{\partial f_{\text{bk},j-1}^G}{\partial C_j} = |f'_{\text{bk}}(C_j)|, \quad \forall j.$$

Entonces para verificar la desigualdad (4.1) basta con que se cumpla

$$\frac{\Delta t}{\Delta z} \frac{\max\{Q_f(t)\}}{\min\{A(z)\}} + \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}} \left(\frac{\Delta t}{\Delta z} \|f'_{\text{bk}}\|_\infty + \frac{2\Delta t}{(\Delta z)^2} (\|d_{\text{comp}}\|_\infty + \|d_{\text{disp}}\|_\infty) \right) \leq 1,$$

la cual implica una restricción para Δt dependiendo de Δz del tipo

$$\Delta t \leq \left(\frac{1}{\Delta z} \frac{\max\{Q_f(t)\}}{\min\{A(z)\}} + \frac{1}{\Delta z} \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}} \|f'_{\text{bk}}\|_\infty \right. \\ \left. + \frac{2}{\Delta z^2} \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}} (\|d_{\text{comp}}\|_\infty + \|d_{\text{disp}}\|_\infty) \right)^{-1} \quad (4.1)$$

4.2. Condición CFL método 2

Para obtener la condición CFL del método 2, similar al caso anterior definimos para cada $j = 1, \dots, N+2$, el operador $\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} = \mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}}(\mathcal{C}_{j+1}^n, \mathcal{C}_j^n; x_{j+1/2}, x_j,)$ dado por

$$\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} := \mathcal{A}^2(x_{j+1/2}) \mathcal{J}_{\text{comp},j}^{\text{num}} + \mathcal{A}^2(x_{j+1/2}) \mathcal{J}_{\text{disp},j}^{\text{num}},$$

con el cual el operador \mathcal{G} se puede reescribir como

$$\mathcal{G} = \mathcal{C}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} - \mathcal{J}_{\text{tot},j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} Q_f(t) C_f(t) \int_{z(x_{j-1})}^{z(x_j)} \delta(s) ds.$$

Para determinar la propiedad de monotonicida, notamos que

$$\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}}(\mathcal{C}_{j+1}^n, \mathcal{C}_j^n; x_{j+1/2}, x_j) = J_{\text{tot},j}^{\text{num}}(\mathcal{C}_{j+1}^n, \mathcal{C}_j^n; z(x_{j+1/2}), z(x_j))\mathcal{A}(x_{j+1/2}),$$

y además dado que

$$\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}} = F_j^{\text{num}}(\mathcal{C}_j, \mathcal{C}_{j+1}, z(x_j), t) - F_j^{\text{num}}(\mathcal{C}_{j-1}, \mathcal{C}_j, z(x_{j-1}), t),$$

se puede deducir (obviando los argumentos) que

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} - \mathcal{J}_{\text{tot},j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j-1}^n} &= -\frac{\partial J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}}}{\partial \mathcal{C}_{j-1}^n} \mathcal{A}(x_{j-1/2}) \geq 0, \\ -\frac{\partial (\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j-1}^n} &= -\frac{\partial (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j-1}^n} \geq 0, \end{aligned}$$

y además

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} - \mathcal{J}_{\text{tot},j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j+1}^n} &= \frac{\partial J_{\text{tot},j}^{\text{num}}}{\partial \mathcal{C}_{j+1}^n} \mathcal{A}(x_{j+1/2}) \geq 0, \\ -\frac{\partial (\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j+1}^n} &= -\frac{\partial (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_{j+1}^n} \geq 0. \end{aligned}$$

Esto nos permite concluir que $\partial d\mathcal{G}/\partial \mathcal{C}_{j-1}^n \geq 0$ y $\partial d\mathcal{G}/\partial \mathcal{C}_{j+1}^n \geq 0$. Sólo queda mostrar en que casos la derivada con respecto a \mathcal{C}_j^n es no negativa. Esto al igual que antes podemos determinarlo a partir del método 1, dado que

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathcal{J}_{\text{tot},j}^{\text{num}} - \mathcal{J}_{\text{tot},j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_j^n} &= \frac{\partial (J_{\text{tot},j}^{\text{num}} \mathcal{A}(x_{j+1/2}) - J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}} \mathcal{A}(x_{j-1/2}))}{\partial \mathcal{C}_j^n} \text{ y} \\ -\frac{\partial (\mathcal{F}_j^{\text{num}} - \mathcal{F}_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_j^n} &= -\frac{\partial (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}})}{\partial \mathcal{C}_j^n}. \end{aligned}$$

Entonces

$$\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{C}_j^n} = 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\partial}{\partial \mathcal{C}_j^n} (F_j^{\text{num}} - F_{j-1}^{\text{num}}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{\partial J_{\text{tot},j}^{\text{num}}}{\partial \mathcal{C}_j^n} \mathcal{A}(x_{j+1/2}) - \frac{\partial J_{\text{tot},j-1}^{\text{num}}}{\partial \mathcal{C}_j^n} \mathcal{A}(x_{j-1/2}) \right).$$

Con lo cual utilizando los cálculos dados para el método 1, se puede concluir que el método 2 será monótono siempre y cuando para cada celda j -ésima se cumpla la desigualdad

$$\begin{aligned} 1 &\geq \frac{\Delta t}{\Delta z} (\mathcal{A}_{j+1/2} f_{\text{bk},j}^{\prime,+} - \mathcal{A}_{j-1/2} f_{\text{bk},j}^{\prime,-} + Q_e(t_n) + Q_u(t_n)) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} ((\mathcal{A}_{j+1/2}^2 + \mathcal{A}_{j-1/2}^2) d_{\text{comp},j} + \mathcal{A}_{j+1/2}^2 d_{\text{disp},j} + \mathcal{A}_{j-1/2}^2 d_{\text{disp},j-1}), \end{aligned}$$

considerando $f'_{\text{bk},j}{}^- = \min \{f'_{\text{bk}}(\mathcal{C}_j^n), 0\}$, $f'_{\text{bk},j}{}^+ = \max \{f'_{\text{bk}}(\mathcal{C}_j^n), 0\}$, $d_{\text{disp},j} = d_{\text{disp}}(z(x_j), Q_f(t_n))$, $d_{\text{comp},j} = d_{\text{comp}}(\mathcal{C}_j^n)$, $\mathcal{A}_j = \mathcal{A}(x_j)$ y $\mathcal{A}_{j+1/2} = \mathcal{A}(x_{j+1/2})$. En consecuencia, la desigualdad anterior se cumple si

$$1 \geq \frac{\Delta t}{\Delta x} (2 \max \{\mathcal{A}(x)\} \|f'_{\text{bk}}\|_{\infty} + \max \{Q_f(t)\}) \\ + 2 \max \{\mathcal{A}^2(x)\} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (\|d_{\text{comp}}\|_{\infty} + \|d_{\text{disp}}\|_{\infty}),$$

lo cual nos permite encontrar la restricción para Δt dada por la condición

$$\Delta t \leq \left(\frac{1}{\Delta x} (\max \{\mathcal{A}(x)\} \|f'_{\text{bk}}\|_{\infty} + \max \{Q_f(t)\}) \right. \\ \left. + \max \{\mathcal{A}^2(x)\} \frac{2}{(\Delta x)^2} (\|d_{\text{comp}}\|_{\infty} + \|d_{\text{disp}}\|_{\infty}) \right)^{-1}. \quad (4.2)$$

4.3. Comparación de las condiciones CFL del método 1 y 2

De las condiciones CFL obtenidas para ambos métodos (4.1) y (4.2) se observa que

$$\min \{A(z)\} (H + B) \leq \int_{-H}^B A(z) dz \Rightarrow \min \{A(z)\} \Delta z \leq \Delta x \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\Delta x} \leq \frac{1}{\min \{A(z)\} \Delta z}$$

de donde utilizando el hecho de que $\min \{A(z)\} = \min \{\mathcal{A}(x)\}$ y que $\max \{A(z)\} = \max \{\mathcal{A}(x)\}$ se tiene la desigualdad

$$\frac{\max \{Q_f(t)\}}{\Delta x} + \frac{\max \{\mathcal{A}(x)\}}{\Delta x} \|f'_{\text{bk}}\|_{\infty} \leq \frac{\max \{Q_f(t)\}}{\min \{A(z)\} \Delta z} + \frac{\max \{A(z)\}}{\min \{A(z)\} \Delta z} \|f'_{\text{bk}}\|_{\infty}.$$

luego es posible afirmar que cuando se verifique

$$\frac{\max \{A^2(x)\}}{\Delta x^2} \leq \frac{\max \{A(z)\}}{\min \{A(z)\} \Delta z^2}$$

o equivalentemente

$$\left(\frac{1}{H + B} \int_{-H}^B A(z) dz \right)^2 \geq \max \{A(z)\} \min \{A(z)\} \quad (4.3)$$

la condición CFL del método 2 entregará una cota mayor que la del método 1 para cualquier valor de N y por lo tanto un valor de Δz más grande. Para funciones que no cumplan con la desigualdad (4.3) la dependencia de cual condición entrega una mayor cota recae

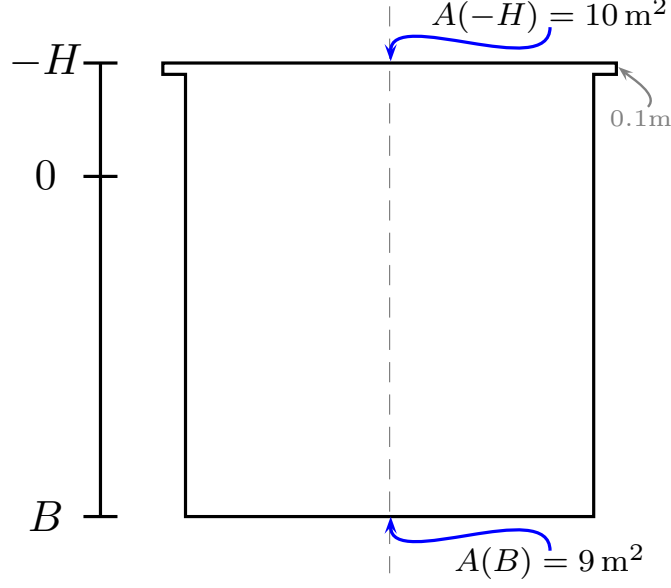


Figura 4.1: Diagrama de la sección transversal vertical del sedimentador definido por la función de área dada en (4.4). Ejemplo de un sedimentador que no satisface la condición (4.3).

en los valores (ordenes de magnitud) de $\max\{Q_f(t)\}$, $\|f'_{bk}\|_\infty$, $\|d_{\text{comp}}\|_\infty$, $\|d_{\text{disp}}\|_\infty$ y N en consecuencia no se puede concluir una ventaja del método 2 sobre el método 1 en cuanto a condición CFL a priori. Un ejemplo de función de área que no satisface la desigualdad (4.3) es la función

$$A(z) := \begin{cases} 10 \text{ m}^2 & \text{si } z \leq 0.1 \text{ m}, \\ 9 \text{ m}^2 & \text{si } z > 0.1 \text{ m} \end{cases} \quad (4.4)$$

para $H = 1 \text{ m}$ y $B = 3 \text{ m}$, ya que

$$\int_{-H}^B A(z) dz = 0.1 \times 10 + 3.9 \times 9 \text{ m}^3 = 36.1 \text{ m}^3$$

luego

$$\left(\frac{1}{H+B} \int_{-H}^B A(z) dz \right)^2 \approx 81.45 < 90 = \max\{A(z)\} \min\{A(z)\}$$

Considerando $\|d_{\text{comp}}\|_\infty$, $\|d_{\text{disp}}\|_\infty$, $\|f'_{bk}\|_\infty$ y N con los valores

$$\begin{aligned} \max\{Q_f(t)\} &= 6.944 \times 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}, \\ \|f'_{bk}\|_\infty &= 9.639 \times 10^{-4} \text{ m/s}, \\ \|d_{\text{comp}}\|_\infty &= 2.155 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}, \\ \|d_{\text{disp}}\|_\infty &= 6.944 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}, \\ N &= 100 \end{aligned}$$

y reemplazando en ambas condiciones CFL se obtienen los valores

$$\begin{aligned}\Delta t^1 &\leq (0.61541)^{-1} \text{ s} \approx 1.6249 \text{ s}, \\ \Delta t^2 &\leq (0.65634)^{-1} \text{ s} \approx 1.5236 \text{ s}.\end{aligned}$$

Es decir, bajo estos valores la condición CFL del método 1 entrega una cota mayor a la del método 2. No obstante existe una amplia gamma de sedimentadores cuya geometría y consecuente función de área transversal satisfacen la condición (4.3), además de ser considerablemente más ventajosa en casos en que el área de sección transversal tiene una gran diferencia entre el área de sección transversal máxima y el área de sección transversal mínima. Los valores considerados para evaluar ambas condiciones CFL son determinados a partir de las funciones elementales utilizadas para las simulaciones realizadas en el próximo capítulo (los valores de los parámetros). En el capítulo siguiente además se muestran algunas simulaciones en las cuales el método 2 es efectivamente más ventajoso que el método 1, lo cual tiene una importante repercusión en los tiempos de simulación para valores elevados de N .

Capítulo 5

Simulaciones

En trabajos previos se han realizado simulaciones bajo distintas condiciones del modelo Bürger-Diehl. En Bürger et al. (2011) se pueden ver el comportamiento del modelo y método numérico dado por Bürger-Diehl sin los efectos de la compresión y dispersión ($d_{\text{comp}} \equiv 0$ y $d_{\text{disp}} \equiv 0$), considerando solamente el efecto de la compresión ($d_{\text{disp}} \equiv 0$) y considerando ambos efectos ($d_{\text{comp}} \neq 0$ y $d_{\text{disp}} \neq 0$) con d_{disp} del tipo $a \cos(\pi z/2b)$ en un intervalo $|z| < b$ con a y b parámetros, para el caso de la sección transversal constante, también se muestran simulaciones del método dado por Stenström-Vitasovic-Takács (Stenström 1976; Vitasovic 1989; Takács 1991) para el modelo dado en Takács et al. (1991), mostrando los errores que se producen en el método-modelo de Takács al simular el Diehl-Test y la falta de generalidad de este último en comparación con el método Bürger-Diehl. En Bürger et al. (2012) se realizaron simulaciones comparando dos métodos distintos para la aproximación del flujo F , la diferencia entre una aproximación que utiliza el flujo numérico dado por Engquist-Osher a la totalidad de la función F denominado “Método EO” y el otro en el que se aplica una aproximación dada por el flujo de Godunov sólo a la función f_{bk} aplicando una aproximación de tipo upwind al otro sumando presente en F denominado “Método G”, se muestran además las simulaciones comparando el método de Takács versus el Método G. El comportamiento del método numérico variando el intervalo en el cual actúa la función de dispersión se puede ver en Bürger et al. (2013b), además del comportamiento bajo condiciones de flujo de alimentación altas (Q_f grande) con y sin dispersión, mostrando que en dichos casos también se satisface el principio de conservación de masa para los flujos de desborde y descarga.

El interés de estas simulaciones es investigar el comportamiento del modelo de Bürger-Diehl bajo la extensión al caso de sedimentadores con área variable, mostrar las diferencias entre dos formas de resolución distintas, denominados en los capítulos anteriores por Método 1 y 2 respectivamente. El primer método es una extensión natural a los trabajos realizados anteriormente en el modelo de Bürger-Diehl (Bürger et al., 2011, 2012, 2013b), mientras que el segundo método posee una condición CFL más ventajosa que el primero para sedimentadores cuya diferencia entre el área máxima y área mínima es grande.

Las funciones constitutivas v_{hs} , σ_e y d_{disp} , (2.11), (2.12) y (2.13), fueron establecidas en Bürger et al. (2012, 2013b). Los parámetros presentes en estas funciones que se consideran

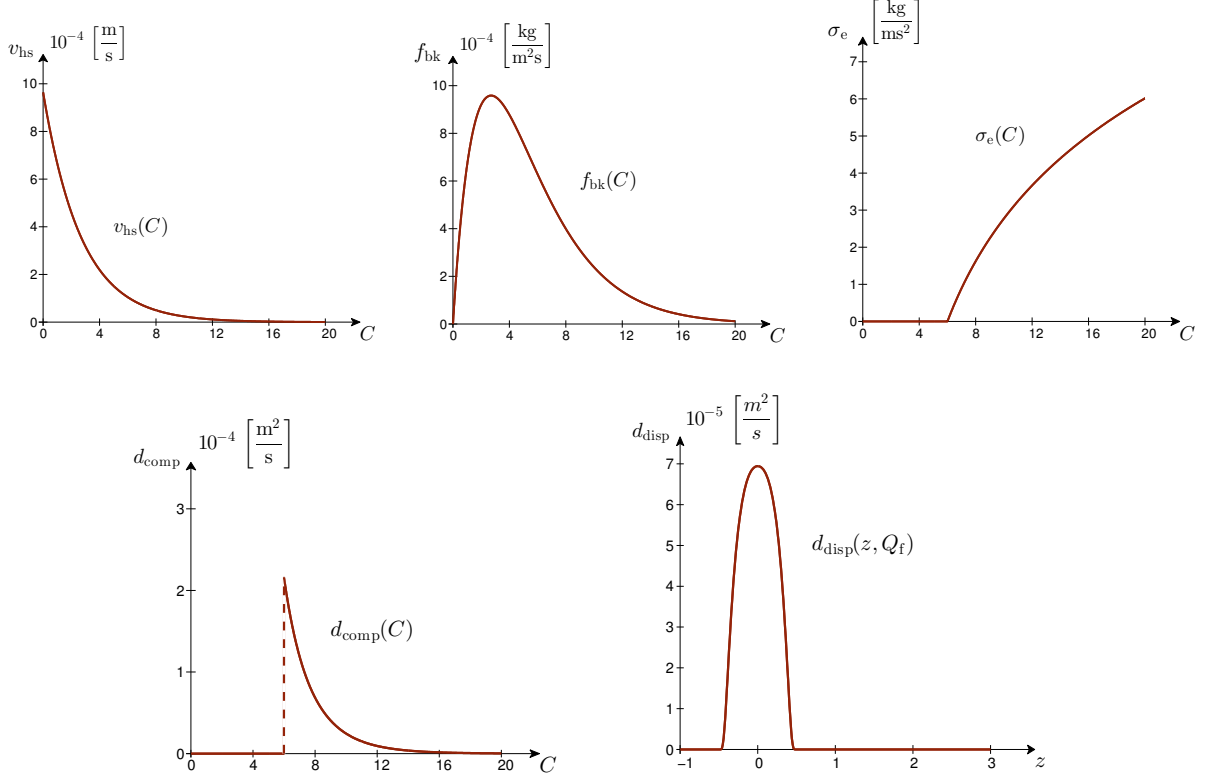


Figura 5.1: Gráfica de las funciones constitutivas v_{hs} , σ_e y d_{disp} junto con las funciones f_{bk} y d_{comp} utilizadas en las siguientes simulaciones.

en este trabajo fueron dados en Bürger et al. (2013b) y son $v_0 = 3.47 \text{ m/h}$, $r_V = 0.37 \text{ m}^3/\text{kg}$, $\alpha = 4.00 \text{ Pa}$, $\beta = 4.00 \text{ kg/m}^3$, $\rho_s = 1050 \text{ kg/m}^3$, $\Delta\rho = 52 \text{ kg/m}^3$, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ y $C_c = 6.00 \text{ kg/m}^3$. Además para la función de dispersión d_{disp} se considera $\alpha_1 = 0.001 \text{ m}^{-1}$, $\alpha_2 = 7.2 \text{ s/m}^2$ y un caudal volumétrico de alimentación $Q_f(t)$ constante en el tiempo dado por $Q_f = 0.0694 \text{ m}^3/\text{s}$ junto con $Q_e(t) = 0.0472 \text{ m}^3/\text{s}$, $Q_u(t) = 0.02 \text{ m}^3/\text{s}$ ($Q_f = Q_e + Q_u$) y una concentración de alimentación que varía en el tiempo dada por

$$C_f(t) = \begin{cases} 4.0 \text{ kg/m}^3 & \text{si } t < 100 \text{ h}, \\ 3.7 \text{ kg/m}^3 & \text{si } 100 \text{ h} \leq t < 250 \text{ h}, \\ 4.1 \text{ kg/m}^3 & \text{si } t \geq 250 \text{ h}. \end{cases}$$

Se considera un perfil inicial $C(z, 0)$ con una concentración elevada hacia el fondo del sedimentador, una concentración inferior a la crítica en el centro y concentración nula (agua clara) en la zona de clarificación, dato lineal a trozos con respecto a la profundidad dado por

$$C(z, 0) := C_0(z) = \begin{cases} 0, & \text{si } z < 0 \text{ m}, \\ 0.7, & \text{si } 0 \text{ m} \leq z < 1 \text{ m}, \\ 2(z - 1) + 6 & \text{si } z \geq 1 \text{ m}. \end{cases}$$

Este perfil de concentración inicial es similar al utilizado en las simulaciones 1,2 y 3 dadas

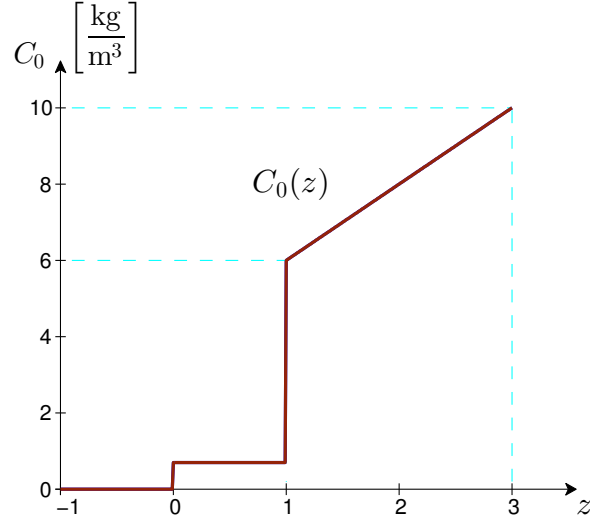


Figura 5.2: Gráfica de la concentración inicial C_0 con respecto a la profundidad z .

en Bürger et al. (2013b), permite ver el comportamiento de la solución bajo un dato inicial que no es diferenciable ni continuo.

5.1. Geometría del sedimentador

Para las simulaciones se considera $H = 1$ y $B = 3$ y un volumen constante para cada tanque dado por $V_0 = 576\pi \text{ m}^3 \approx 1809.5574 \text{ m}^3$, con el cual al aplicar el cambio de variables en cada caso obtendremos $\mathcal{B} = V_0$. Los tres primeros los consideramos con una geometría cónica, dados por un cono truncado, convergente o divergente con respecto a la profundidad z . El radio de la sección transversal de éste tipo de tanques es una recta en función de la profundidad z , y el área puede ser representada por

$$A(z) = A_{-H} (a(z + 1) + 1)^2, \quad (5.1)$$

donde A_{-H} es el área de la sección transversal en $z = -H$ y a es un parámetro que determina la pendiente del cono. Los valores utilizados para los tres primeros tanque de modo que posean el volumen V_0 son

$$\textbf{Tanque 1 : } \quad A_{-H} = 196\pi \text{ m}^2 \text{ y } a = -0.073536732.$$

$$\textbf{Tanque 2 : } \quad A_{-H} = 361\pi \text{ m}^2 \text{ y } a = -0.207915459.$$

$$\textbf{Tanque 3 : } \quad A_{-H} = 25\pi \text{ m}^2 \text{ y } a = 0.641427568.$$

El cambio de variables para éste tipo de sección transversal queda dado por

$$x(z) = A_{-H} \int_{-1}^z (a(s + 1) + 1)^2 \, ds = \frac{A_{-H}}{3a} ((a(z + 1) + 1)^3 - 1),$$

donde la inversa de dicho cambio es

$$z(x) = \frac{1}{a\sqrt[3]{A_{-H}}} \sqrt[3]{3ax + A_{-H}} - \frac{a+1}{a}, \quad 0 \text{ m}^3 \leq x \leq 576\pi \text{ m}^3.$$

El cuarto tanque para $z \leq z_c$ lo consideramos con una geometría cilíndrica, y para $z > z_c$ como un cono truncado invertido (convergente con respecto a z), donde $z_c \in (-1, 3)$. Considerando $z_c = 1$ el área de la sección transversal en este caso es constante hasta el punto $z = 1$ y luego varía de acuerdo con la ecuación (5.1), es decir

$$\textbf{Tanque 4 : } A(z) = \begin{cases} A_{-H}, & \text{si } -1 \text{ m} \leq z \leq 1 \text{ m}, \\ A_{-H}(a(z-1)+1)^2, & \text{si } 1 \text{ m} < z \leq 3 \text{ m}. \end{cases}$$

Aquí el área en $z = -H$ está dada por $A_{-H} = 196\pi \text{ m}^2$ y al igual que antes el valor de a es escogido de tal manera que el volumen sea V_0 , el cual es $a = -0.344363690$. El cambio de variables para este tipo de tanques queda dado por

$$x(z) = \begin{cases} A_{-H}(z+1), & \text{si } -1 \text{ m} \leq z \leq 1 \text{ m}, \\ \frac{A_{-H}}{3a}((a(z-1)+1)^3 - 1) + 2A_{-H}, & \text{si } 1 \text{ m} < z \leq 3 \text{ m}. \end{cases}$$

y la inversa de dicho cambio

$$z(x) = \begin{cases} (1/A_{-H})x - H, & \text{si } 0 \text{ m}^3 \leq x \leq 2A_{-H}, \\ \frac{1}{a\sqrt[3]{A_{-H}}} \sqrt[3]{3a(x - 2A_{-H}) + A_{-H}} - \frac{1-a}{a}, & \text{si } 2A_{-H} < x \leq 576\pi \text{ m}^3. \end{cases}$$

Para el quinto tanque consideramos una relación entre z y el radio dada por una función cuadrática del tipo $z(r) := r^2/a - b/a$, con a, b constantes ($a \neq 0$) y r el radio del tanque. Con la relación anterior podemos determinar el área en función de la profundidad z dada por

$$\textbf{Tanque 5 : } A(z) = A_{-H}(a(3-z)+b),$$

considerando el área en $-H$ dada por $A_{-H} = 272.25\pi \text{ m}^2$ y las constantes $a = 0.235537315$ y $b = 0.057850738$ de tal modo que el tanque posea volumen V_0 . Para este tanque el cambio de variables queda determinado por

$$x(z) = A_{-H} \left(-\frac{a}{2}z^2 + (3a+b)z + \frac{7a+2b}{2} \right), \quad (5.2)$$

y la inversa a dicho cambio la obtenemos de las raíces del polinomio dado en (5.2) considerando x constante, esto es

$$z(x) = 3 + \frac{b}{a} \pm \sqrt{\left(3 + \frac{b}{a}\right)^2 + \left(7 + 2\frac{b}{a} - \frac{2x}{aA_{-H}}\right)},$$

de las cuales se descarta el signo positivo pues $z - (3 + \frac{b}{a}) < 0$ para todo z ya que $z \leq 3 \text{ m}$, en consecuencia

$$z(x) = 3 + \frac{b}{a} - \sqrt{\left(3 + \frac{b}{a}\right)^2 + \left(7 + 2\frac{b}{a} - \frac{2x}{aA_{-H}}\right)}, \quad 0 \text{ m}^3 \leq x \leq 576\pi \text{ m}^3.$$

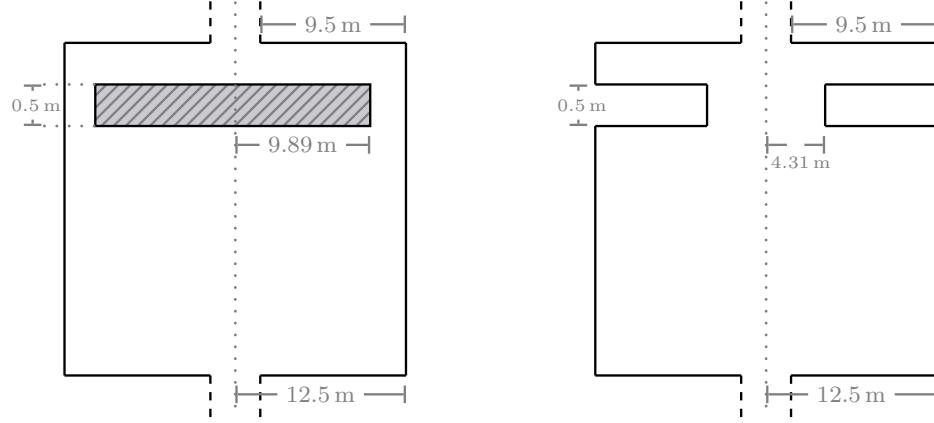


Figura 5.3: Diagrama de la sección transversal vertical del tanque 6 (izquierda) y de otro tanque con igual función de área de sección transversal (derecha) pero con distinta geometría.

Por último, consideramos un tanque cilíndrico de radio 12.5 m con un obstáculo localizado en el interior, cerca del nivel de alimentación $z = 0$ m, además de una menor área de sección transversal del tanque en $z = -1$ y $z = 3$. El obstáculo se considera cilíndrico con eje radial dado por el del tanque, de radio $r_{\text{int}} = 9.8994949$ m y altura 0.5 m, posicionado entre $z = 0$ m y $z = -0.5$ m. El radio en $z = -1$ m y $z = 3$ m queda dado por 3 m. Este tipo de tanque posee una función de área de sección transversal discontinua con respecto a la profundidad z . La función de área con respecto a la profundidad está dada por

$$\textbf{Tanque 6} : A(z) := \begin{cases} 156.25\pi \text{ m}^2 & \text{si } -1 \text{ m} < z < -0.5 \text{ m o } 0 \text{ m} < z < 3 \text{ m}, \\ 58.25\pi \text{ m}^2 & \text{si } -0.5 \text{ m} < z < 0 \text{ m}, \\ 9\pi \text{ m}^2 & \text{si } z \leq -1 \text{ m o } z \geq 3 \text{ m}. \end{cases}$$

Es importante recalcar que al ser el modelo en una dimensión espacial, se capta sólo parcialmente la geometría del sedimentador, pues pese a que el tanque 6 representa un cilindro obstaculizado, el modelo es indiferente entre éste tanque y uno compuesto por cilindros centrados y posicionados uno sobre el otro con secciones transversales iguales a las dadas en cada tramo de la definición de la función de área del tanque 6, siendo estas dos geometrías completamente distintas, ver Figura 5.3. El cambio de variable para esta función de área discontinua (constante a trozos) está dado por

$$x(z) = \begin{cases} 9\pi(z+1) & \text{si } z = -1 \text{ m}, \\ 156.25\pi(z+1) & \text{si } -1 \text{ m} < z < -0.5 \text{ m}, \\ 58.25\pi z + 107.25\pi & \text{si } -0.5 \text{ m} \leq z \leq 0 \text{ m}, \\ 156.25\pi z + 107.25\pi & \text{si } 0 \text{ m} < z < 3 \text{ m}, \\ 9\pi(z-3) + 576\pi & \text{si } z = 3 \text{ m}. \end{cases}$$

La transformación inversa $z = z(x)$ se determina despejando en cada tramo z en función

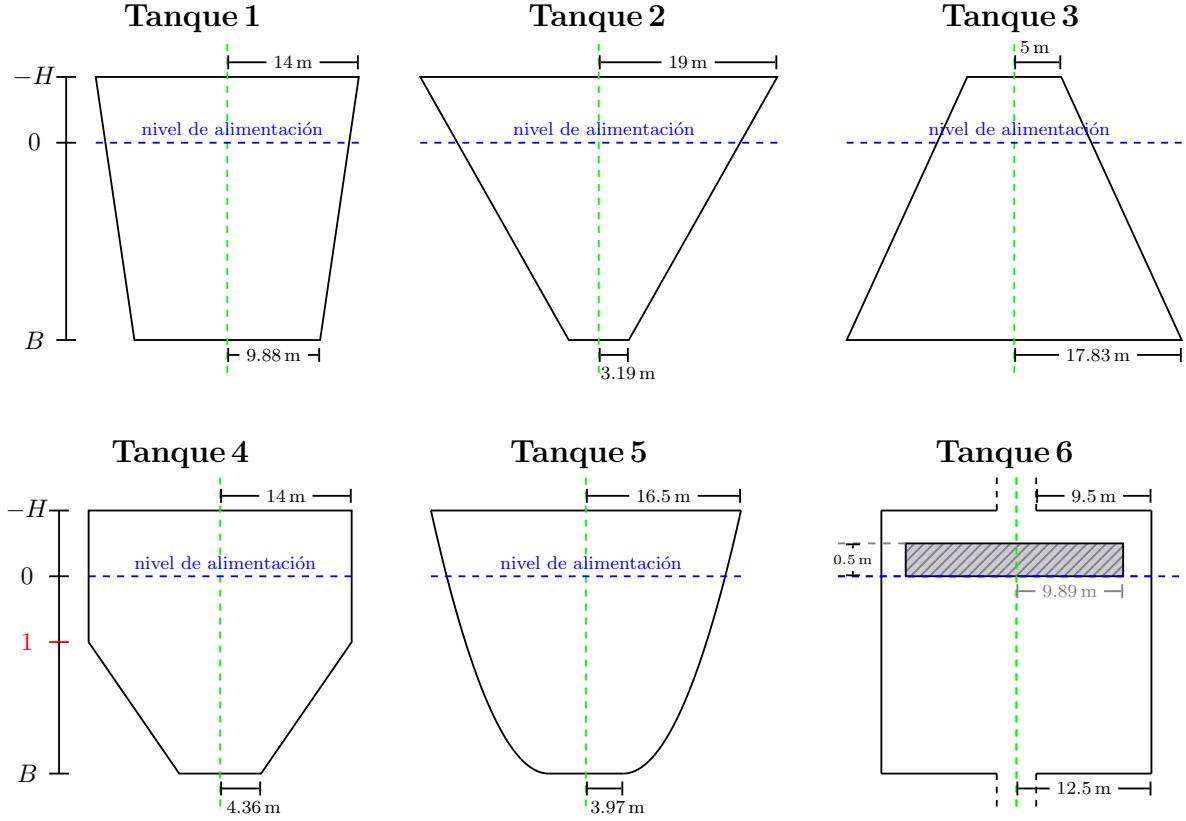


Figura 5.4: Diagramas de los tanques 1 al 6, considerando el corte transversal vertical.

de x , esto es

$$z(x) = \begin{cases} (1/(9\pi))x - 1 & \text{si } x = 0 \text{ m}^3, \\ (1/(156.25\pi))x - 1 & \text{si } 0 \text{ m}^3 < x < 78.125\pi \text{ m}^3, \\ (1/(58.25\pi))x - (107.25/58.25) & \text{si } 78.125\pi \text{ m}^3 \leq x \leq 107.25\pi \text{ m}^3, \\ (1/(156.25\pi))x - (107.25/156.25) & \text{si } 107.25\pi \text{ m}^3 < x < 576\pi \text{ m}^3, \\ (1/(9\pi))x - 61 & \text{si } x = 576\pi \text{ m}^3. \end{cases}$$

Recordar que la función de área es extendida hacia los exteriores del sedimentador replicando los valores en los respectivos extremos $z = -H$ y $z = B$. No obstante, dado que el área fuera del sedimentador no es considerada al realizar el cálculo Δx , el mapeo de los valores de las concentraciones obtenidas por el Método 2 en las celdas fantasmas es realizado en la posición espacial correspondiente a la dada por el Método 1, esto último no implica una pérdida de generalidad, y sirve para realizar una mejor comparación entre los valores obtenidos por ambos métodos.

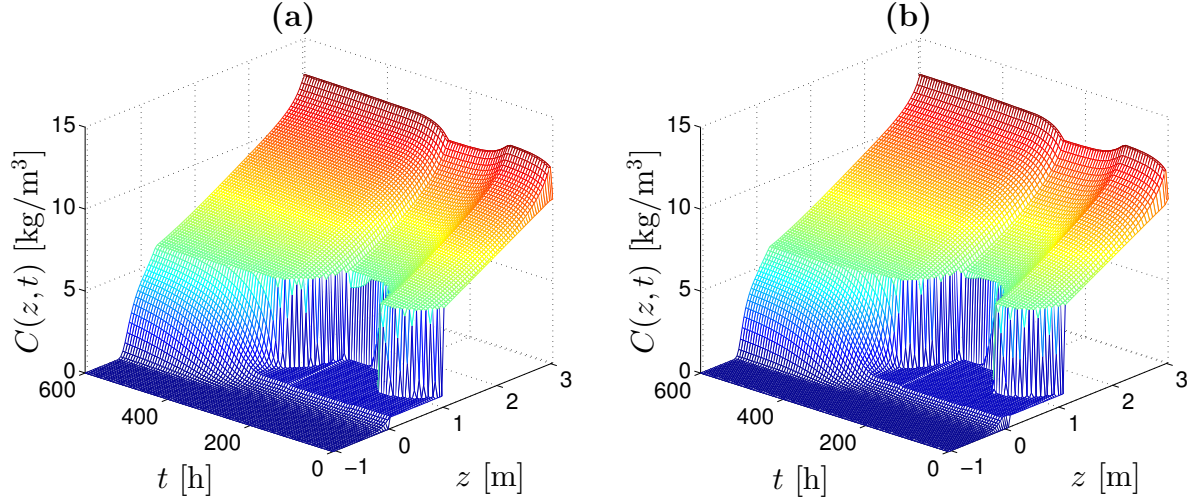


Figura 5.5: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 1 hasta un tiempo final de 600 horas.

5.2. Comparación de los métodos 1 y 2 bajo distintas geometrías.

A continuación se presentan seis simulaciones de las soluciones aproximadas a las ecuaciones (3.1) y (3.4), utilizando los métodos 1 y 2 dados en (3.2) y 2 (3.5) respectivamente para los seis tanques mostrados en la sección 5.1. Para las simulaciones se considera $N = 100$, con lo cual $\Delta z = 4/100 \text{ m} = 0.04 \text{ m}$ para el Método 1 en todas las simulaciones y la condición CFL para el Método 1 y 2 están dadas en (4.1) y (4.2) respectivamente. Las imágenes para de las soluciones en cada una de las simulaciones fueron construidas utilizando 101 capas temporales equiespaciadas, con lo cual representan un total de 104×101 nodos.

5.2.1. Simulación 1 (Tanque 1).

Dado que la variación del área en la sección transversal con respecto a la profundidad z en el tanque 1 es reducida ($A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} \approx 2$), la simulación como era de esperar es similar a la dada por un sedimentador con sección transversal constante, lo cual se puede ver en Bürger et al. (2013b).

Como se aprecia en la Figura 5.5 (b) con el Método 2 hacia el fondo ($z = 3 \text{ m}$) se obtienen pasos espaciales (Δz) cada vez más grandes, esto es debido a que el área de la sección transversal disminuye con respecto a la profundidad (menor número de nodos hacia el fondo). La diferencia entre las divisiones espaciales para ambos métodos en el interior del tanque se pueden apreciar en la Figura 5.6. El paso temporal y el debido tiempo CPU

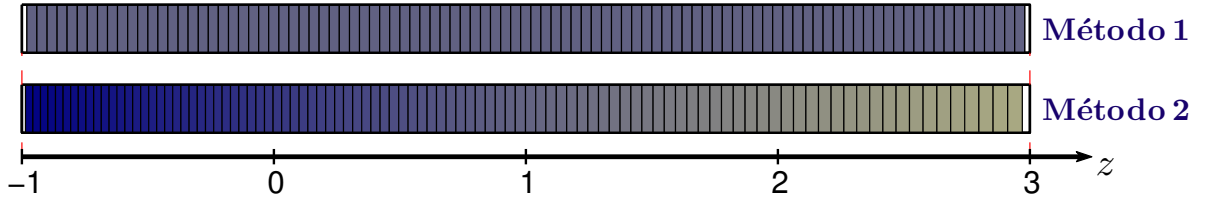


Figura 5.6: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 1.

bajo iguales condiciones de cómputo son

Método 1 : $\Delta t = 1.30061 \text{ s}$ & tiempo-CPU = 17.084899 s,

Método 2 : $\Delta t = 1.43583 \text{ s}$ & tiempo-CPU = 13.848419 s.

En este caso ambos valores de Δt no difieren notablemente, no obstante la diferencia en el tiempo CPU entre el Método 1 y el 2 es de aproximadamente 3 segundos, siendo levemente más rápido el Método 2 sobre el Método 1. La diferencia entre ambas soluciones para tres tiempos determinados (50, 150 y 500 horas) se pueden ver de la Figura 5.7. Para

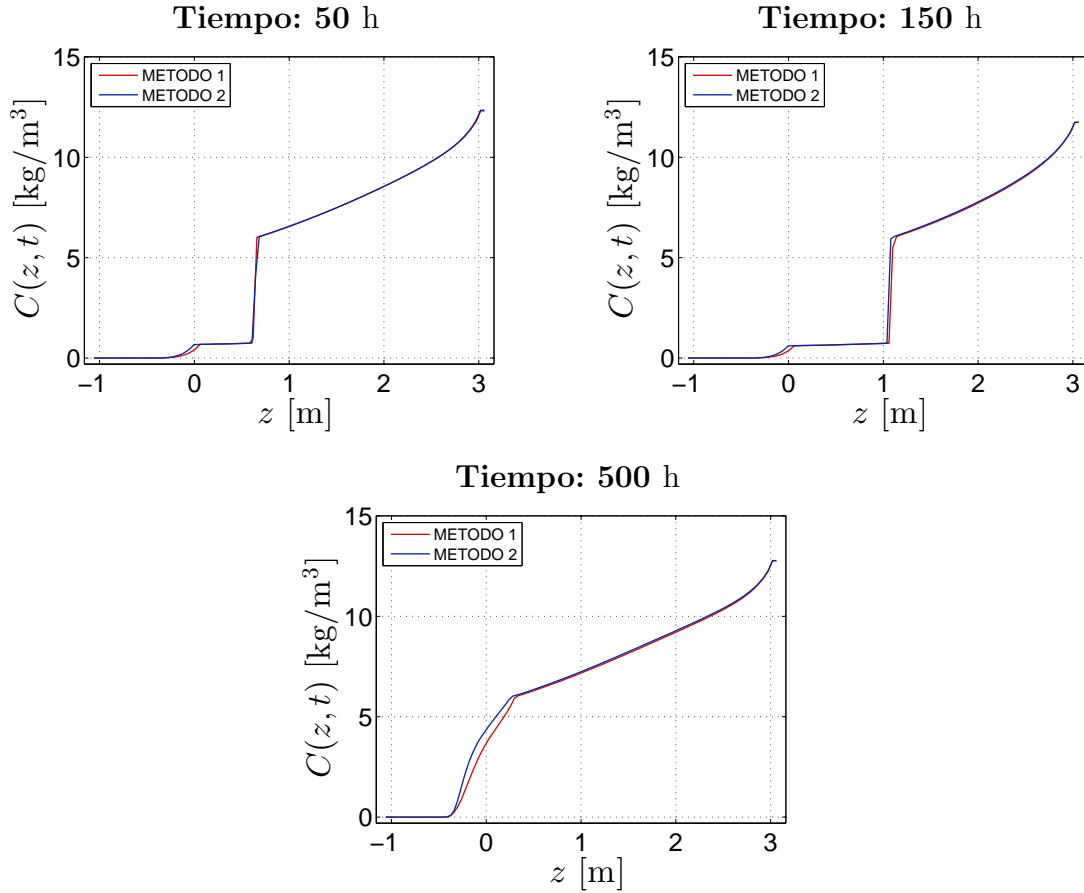


Figura 5.7: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50 \text{ h}$ (izquierda), $t = 150 \text{ h}$ (centro) y $t = 500 \text{ h}$ (derecha) para el tanque 1.

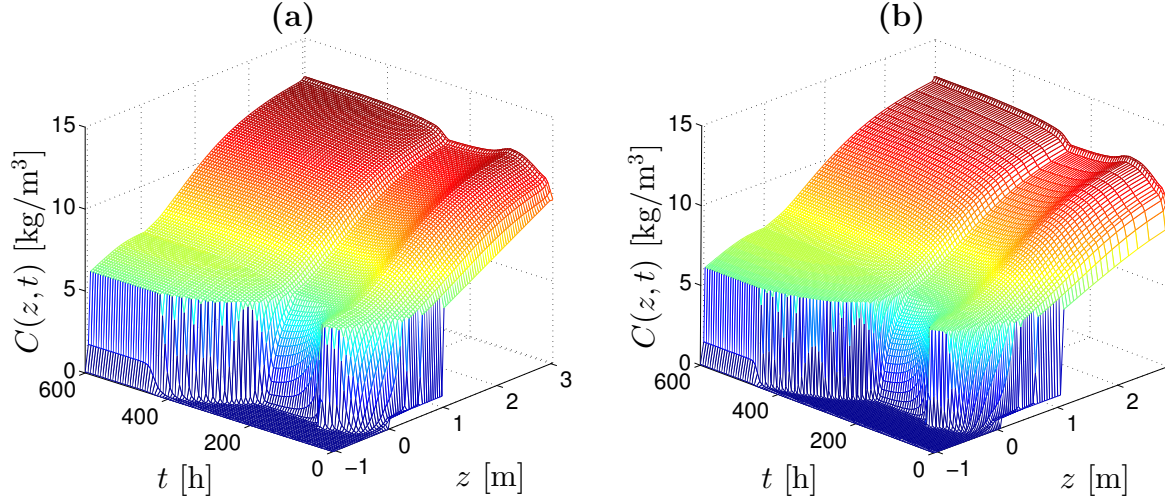


Figura 5.8: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 2 hasta un tiempo final de 600 horas.

$t = 50$ h y $t = 150$ h se ve que el Método 2 aproxima de mejor forma la discontinuidad dada para concentraciones cercanas a C_c y cerca de la alimentación ($z = 0$), esto es debido a que la malla para el Método 2 es más fina para valores de $z < 1$ (ver Figura 5.6) que la malla dada para el Método 1. En el caso de $t = 500$ h se aprecia claramente que el Método 1 toma valores inferiores a los obtenidos por el Método 2 para concentraciones positivas e inferiores a la crítica. En los tres casos (perfiles de tiempo) se observa que para concentraciones superiores a la crítica ambos métodos se comportan de forma similar.

5.2.2. Simulación 2 (Tanque 2).

Para esta simulación puesto que la geometría del tanque 2 posee una gran variación entre el área de la sección transversal máxima ($19^2\pi \text{ m}^2$) y el área de la sección transversal mínima ($3.19843^2\pi \text{ m}^2$), el cuociente entre ambos valores es grande $A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} \approx 35.28963$ y en consecuencia la condición CFL para el Método 1 disminuye considerablemente comparado con la misma condición CFL para el caso de sección transversal constante, en el cual el factor es 1. La solución aproximada para cada uno de los métodos se aprecia en la Figura 5.8. Dado que el área es reducida en el fondo del sedimentador ($z = 3$ m), lo lógico es que se acumule material sólido en el interior del sedimentador conforme pasa el tiempo y que en algún momento suceda el desborde (concentración positiva en $z = -1$ m), este comportamiento se ve reflejado en la solución aproximada tanto para el Método 1 como para el Método 2 y para un tiempo superior a las 400 horas sucede el desborde. Ambas soluciones aproximadas poseen diferencias para tiempos superiores a 400 horas, en la zona de clarificación ($z < 0$ m) se observa que la solución del Método 1 llega al desborde antes que la dada por el Método 2, esto se puede deber a que la longitud de Δz se hace cada vez más pequeña para $z < 0$ m en el Método 2.

Notar que para el Método 2 se tiene que $z_{N-1/2} \approx 2.78$ m, en consecuencia el Método 2

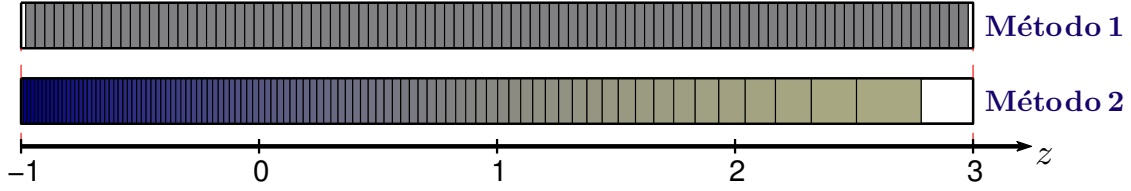


Figura 5.9: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 2.

tiene la limitación de determinar la concentración hacia $z = 3$ m en intervalos de longitud considerablemente más grande que en los obtenidos por el Método 1, esto se traduce en una pérdida de precisión de la solución hacia ese sector, efecto contrario a lo que sucede hacia $z = -1$ m, ver Figura 5.9. El paso temporal y el tiempo CPU bajo iguales condiciones de cómputo para ambos métodos están dados por

Método 1 : $\Delta t = 0.074224$ s & tiempo-CPU = 289.352599 s,

Método 2 : $\Delta t = 0.434288$ s & tiempo-CPU = 48.384176 s.

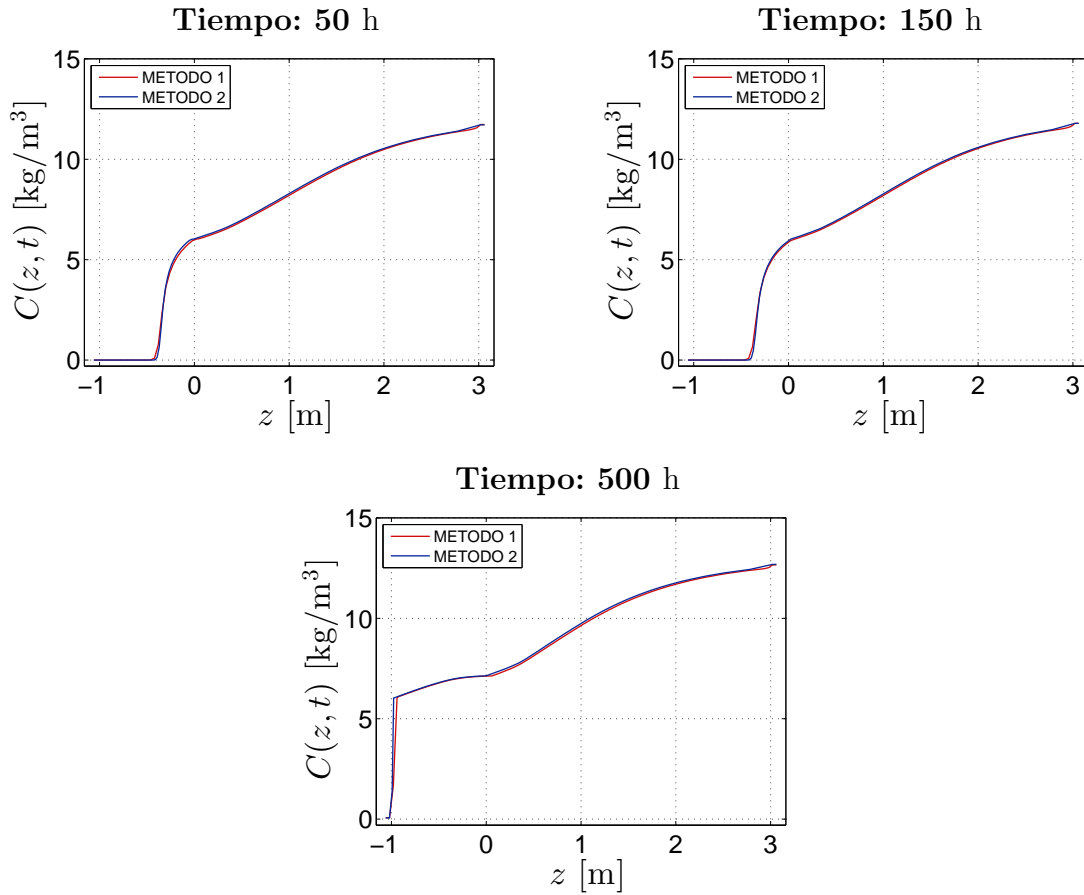


Figura 5.10: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 2.

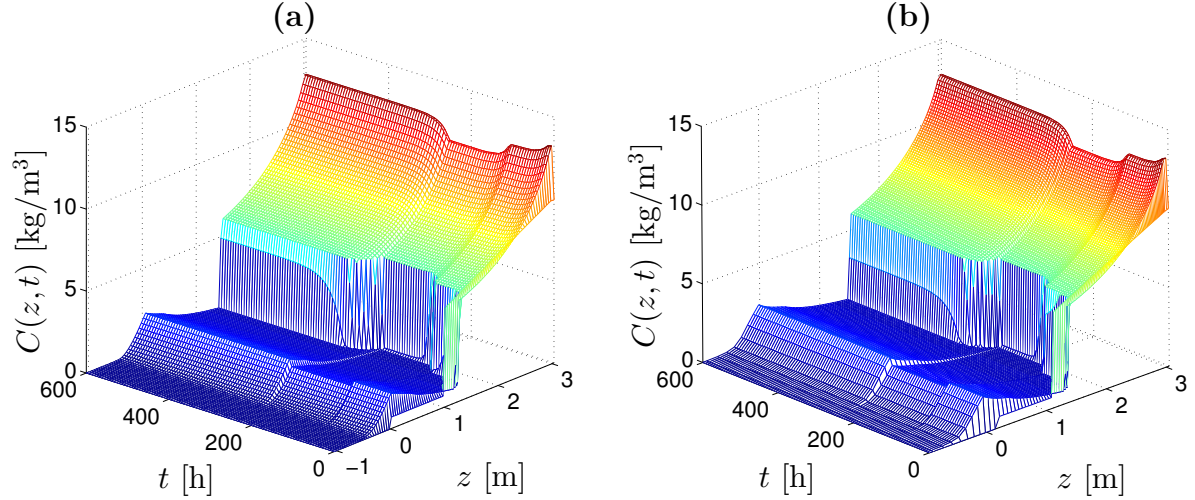


Figura 5.11: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 3 hasta un tiempo final de 600 horas.

El paso temporal para el Método 2 con ésta geometría es aproximadamente 5.8 veces más grande que el dado por la condición CFL del Método 2, lo cual explica que la diferencia entre los tiempos CPU para ambos casos sea de aproximadamente 241 s, siendo el Método 2, casi 6 veces más rápido que el Método 1. Para $t = 50$ h el Método 1 asume valores levemente inferiores al Método 2, siendo para valores de z inferiores a cero la diferencia más notable, en tanto para $t = 150$ h no se aprecia gran diferencia entre ambos métodos, en cambio para $t = 500$ h se observan diferencias en ambas curvas para valores de z cercano a $z = -1$ m y entre $z = 0$ m y $z = 1/2$ m.

5.2.3. Simulación 3 (Tanque 3).

En este caso el área de la sección transversal crece conforme aumenta el valor de z , teniendo el área máxima de la sección transversal del tanque en $z = 3$ m, este tanque se denomina divergente con respecto a z y el cuociente entre el área máxima y área mínima es $A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} \approx 12.71429$, menor al dado para el tanque 2 pero elevado con respecto al caso constante. La lógica en este tipo de sedimentador es que como el área en $z = 3$ m es grande no se acumule una gran cantidad de material con altas concentraciones (superiores a la crítica) dentro del tanque, esto se puede observar en la Figura 5.11 para ambos métodos, no obstante en zonas cercanas al nivel de alimentación se observa que la concentración es positiva con valores que no superan los 2.5 kg/m^3 , esto es debido al efecto de la dispersión en dicha zona.

Para esta simulación tenemos

Método 1 : $\Delta t = 0.205898 \text{ s}$ & tiempo-CPU = 102.607492 s,

Método 2 : $\Delta t = 0.557925 \text{ s}$ & tiempo-CPU = 36.770268 s.

El paso temporal en el Método 2 es aproximadamente 2.71 veces mayor que el del Método

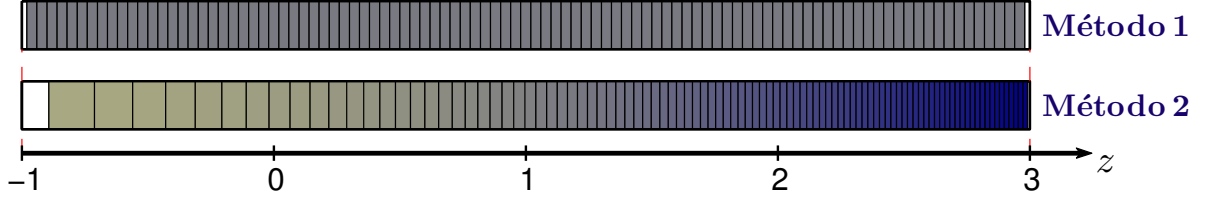


Figura 5.12: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 3.

2 y la diferencia en los tiempos CPU entre ambos métodos es de 65.837224 segundos. La diferencia entre los pasos espaciales en el interior del tanque para ambos métodos se pueden ver en la Figura 5.12, en este caso en el Método 2, Δz es más grande hacia $z = -1$ m, y más pequeño hacia $z = 3$ m, siendo $z_{1/2} \approx -0.89$ m y $z_{N-1/2} \approx 2.99$ m.

De la Figura 5.13 en los tres perfiles se observa que son similares las soluciones para concentraciones superiores a la crítica, teniendo una notable diferencia para valores de z

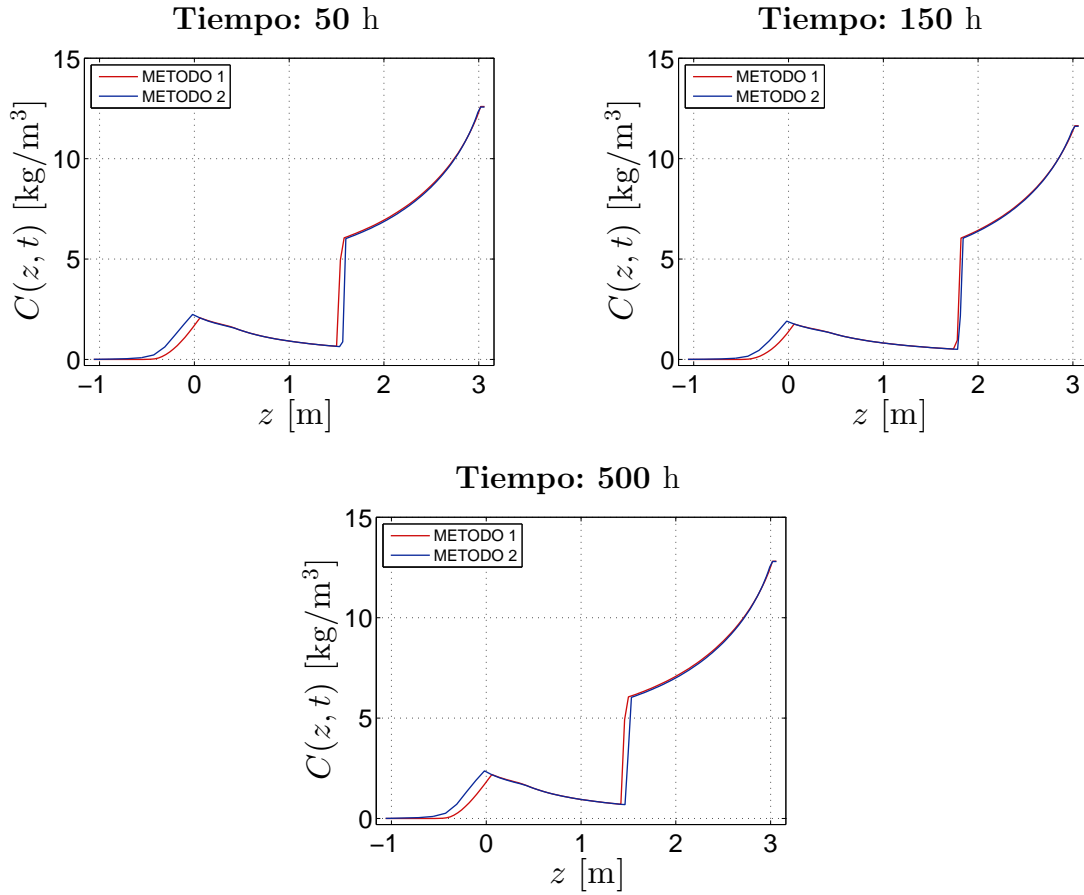


Figura 5.13: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 3.

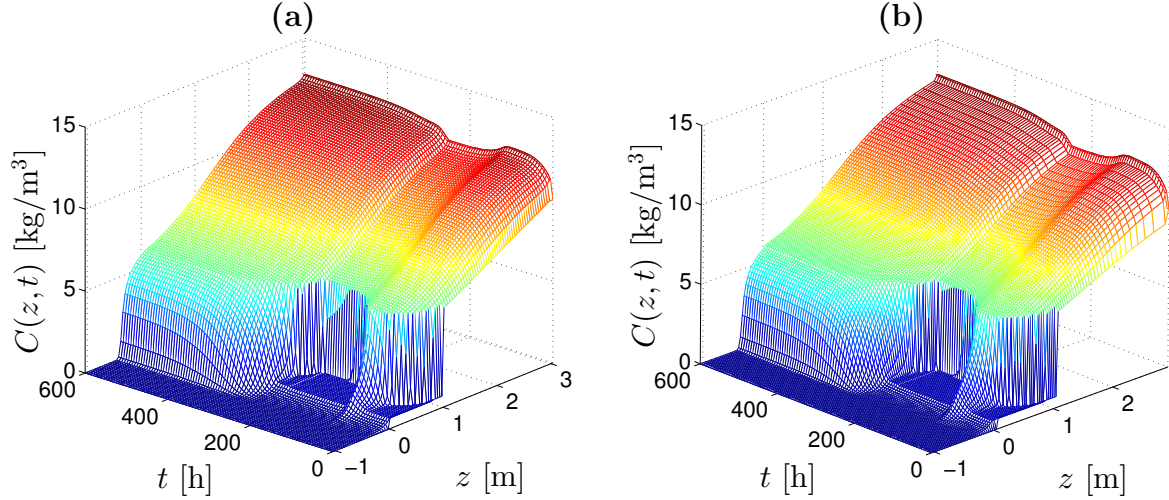


Figura 5.14: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 4 hasta un tiempo final de 600 horas.

cercanos al nivel de alimentación (aproximadamente entre $z = -1/2$ m y $z = 1/2$ m), esto puede ser debido a que la longitud de Δz es elevada para el Método 2 en esa zona. En $t = 50$ h y $t = 500$ h se ve una diferencia en la aproximación del salto de discontinuidad hacia la concentración crítica.

5.2.4. Simulación 4 (Tanque 4).

Esta simulación permite ver el comportamiento de ambos métodos para una función de área (de sección transversal) que sólo es diferenciable a trozos y continua. El cociente entre el área máxima y el área mínima es $A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} = 10.320914$. Las simulaciones con este tipo de geometría se aprecian en la Figura 5.14 para ambos métodos, en la cual se observa que para valores de tiempo superior a 400 horas no se produce el desborde, lo cual se podría esperar considerando que el área en $z = 3$ m es reducida, no obstante el comportamiento se asemeja al obtenido en la solución aproximada para el tanque 1. Para $z > 1$ m la concavidad es similar a la de la solución mostrada en la simulación 2.

El paso temporal obtenido de la condición CFL para ambos métodos como también el tiempo CPU bajo iguales condiciones de cómputo están dados por

Método 1 : $\Delta t = 0.151329$ s & tiempo-CPU = 138.088279 s,

Método 2 : $\Delta t = 0.756162$ s & tiempo-CPU = 26.514696 s.

El valor de Δt obtenido por el Método 2 es aproximadamente 5.7 veces más grande que el obtenido con el Método 1, y a su vez éste método es aproximadamente 5.7 veces más rápido, con una diferencia en tiempo CPU de 65.499839 segundos.

Ya que el área de la sección transversal para valores de z menores que 1 m es constante al hacer el cambio de variables en el Método 2 el valor del paso espacial también es

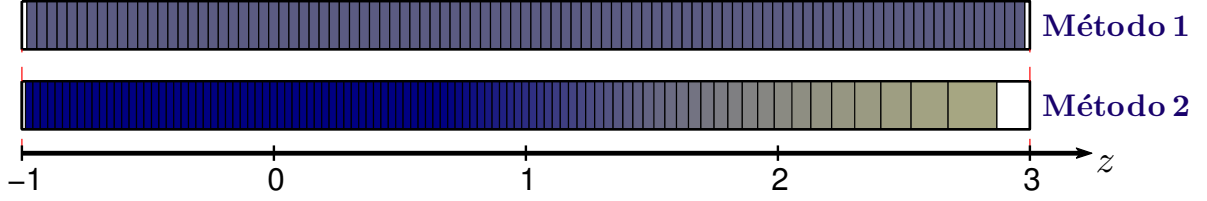


Figura 5.15: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 4.

constante, esto es $z_{j+1/2} - z_{j-1/2} \approx 0.029388 \text{ m}$ para j tal que $z_{j+1/2} \leq 1 \text{ m}$. A partir de $z = 1 \text{ m}$, el área deja de ser constante y toma la forma dada por la ecuación (5.1), con lo cual el paso espacial Δz aumenta con respecto a la profundidad z . En este caso nuevamente la posición de los centros de cada celda difieren considerablemente entre ambos métodos, siendo la diferencia hacia $z = 3 \text{ m}$ más notoria, esto pues $z_{N-1/2} \approx 2.87 \text{ m}$ para el Método 2, ver Figura 5.15. En la Figura 5.16 se muestran las soluciones de ambos métodos en tres tiempos distintos, $t = 50 \text{ h}$, $t = 150 \text{ h}$ y $t = 500 \text{ h}$. Para $t = 500 \text{ h}$ las soluciones no difieren

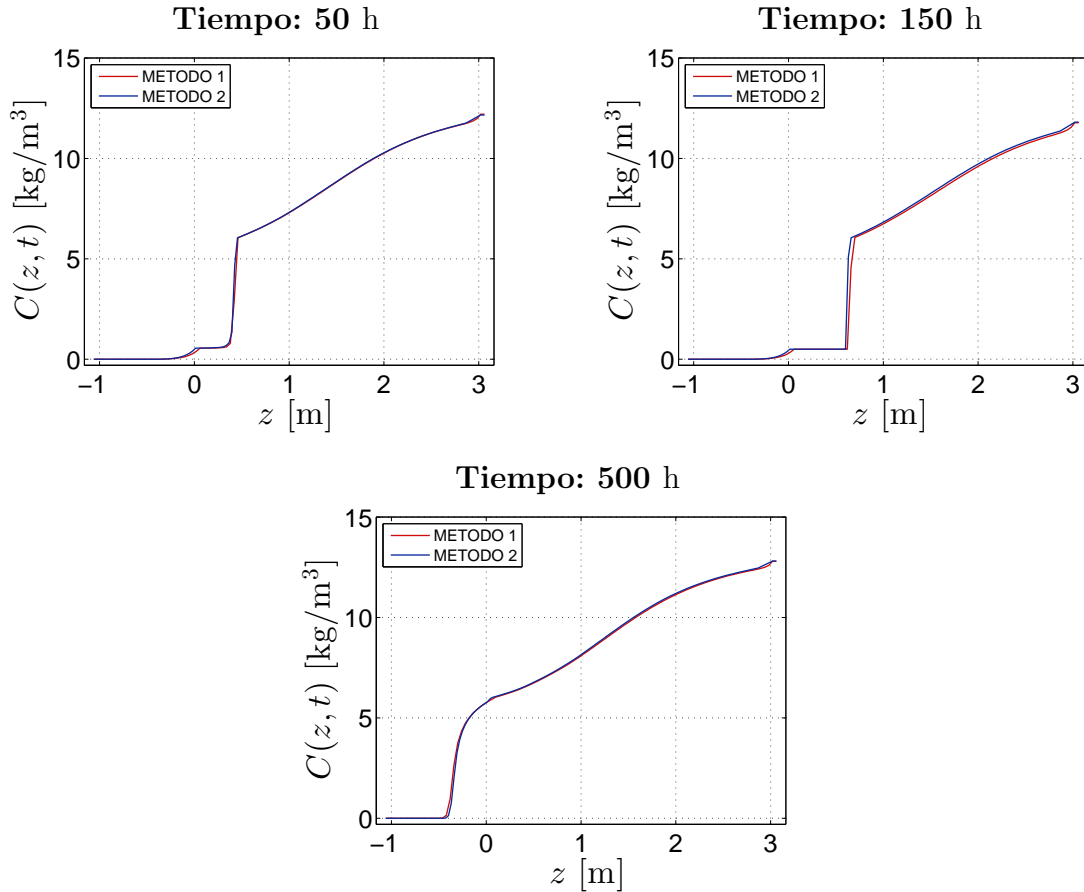


Figura 5.16: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50 \text{ h}$ (izquierda), $t = 150 \text{ h}$ (centro) y $t = 500 \text{ h}$ (derecha) para el tanque 4.

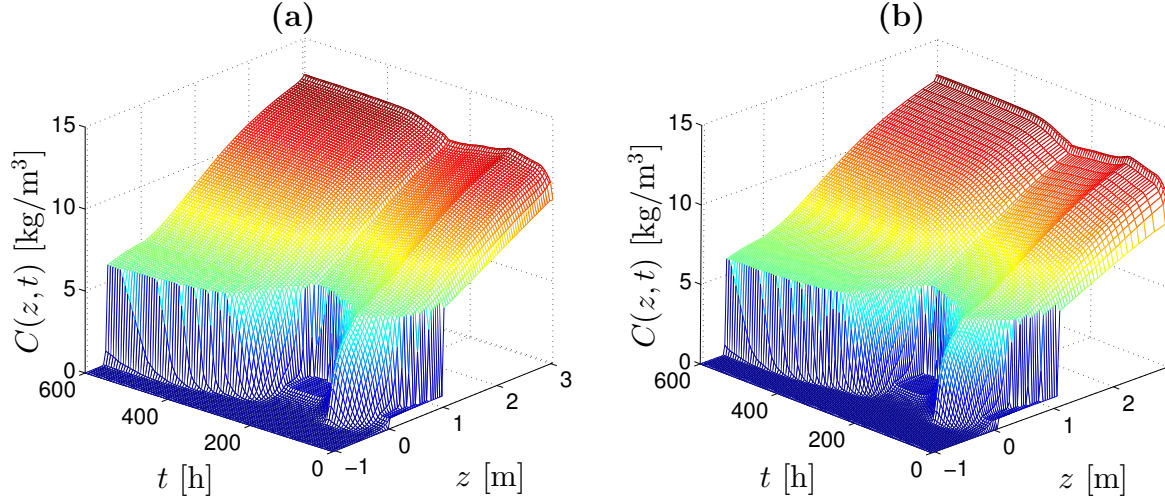


Figura 5.17: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 5 hasta un tiempo final de 600 horas.

notablemente entre ambos métodos, en cambio para $t = 150$ h y $t = 50$ h se aprecian diferencias en las aproximaciones de los saltos de discontinuidad.

5.2.5. Simulación 5 (Tanque 5).

La geometría del tanque 5 difiere de las anteriores en el sentido que el radio de la sección transversal ya no varía linealmente o linealmente a trozos (como es el caso del tanque 4) con respecto a la profundidad. El valor del cuociente entre el área máxima y área mínima para este tipo de tanque está dado por $A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} \approx 17.285864$ m. En la Figura 5.17 se aprecia la solución aproximada dada por ambos métodos, de las cuales se puede observar que conforme aumenta el tiempo (por sobre las 250 horas), la concentración aumenta hacia $z = -1$ m lo cual se puede interpretar como un posible desborde para tiempos superiores a las 600 horas. Para esta simulación el valor de Δt y el tiempo CPU bajo iguales condiciones de cómputo para ambos métodos son

Método 1 : $\Delta t = 0.252929$ s & tiempo-CPU = 79.288439 s,

Método 2 : $\Delta t = 1.435828$ s & tiempo-CPU = 13.788600 s.

En esta simulación el Método 2 posee un valor de Δt que es aproximadamente 5 veces mayor al dado por el Método 1, y es 5.2 veces más rápido, con una diferencia de tiempo entre ambos métodos de 111.573583 segundos. Las diferencias entre las mallas para ambos métodos se pueden ver en la figura 5.18, en la cual se observa que para el Método 2 hacia $z = 3$ m el valor de Δz aumenta producto de la disminución en el área de la sección transversal hacia el fondo del tanque, lo cual ya se había visto en las simulaciones anteriores. El centro de la última celda del interior del tanque para el Método 2 es $z_{N+1/2} \approx 2.858$ m y el centro de la primera celda del interior del tanque es $z_{1/2} \approx -0.9894$ m.

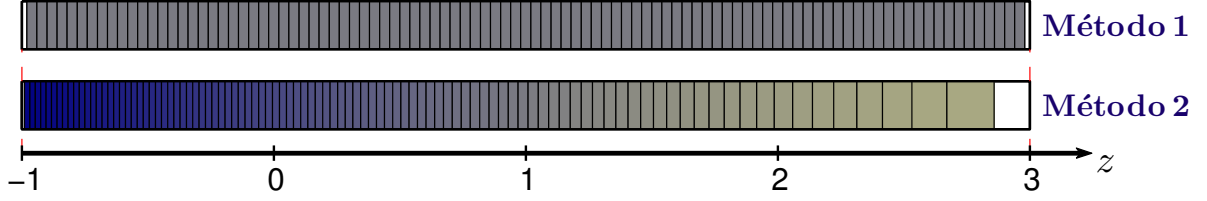


Figura 5.18: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 5.

Las diferencias para los perfiles de tiempo $t = 50$ h, $t = 150$ h y $t = 500$ h se ven en la Figura 5.19, en donde sólo se aprecian diferencias considerables para $t = 50$ h y $t = 150$ h para valores de concentración menores a la concentración crítica. En el tiempo $t = 500$ h se puede observar que ambos métodos aproximan de forma similar la discontinuidad cercana a $z = -0.5$ m evidenciando una leve diferencia en dicho salto de discontinuidad para valores de concentración tendiendo a cero.

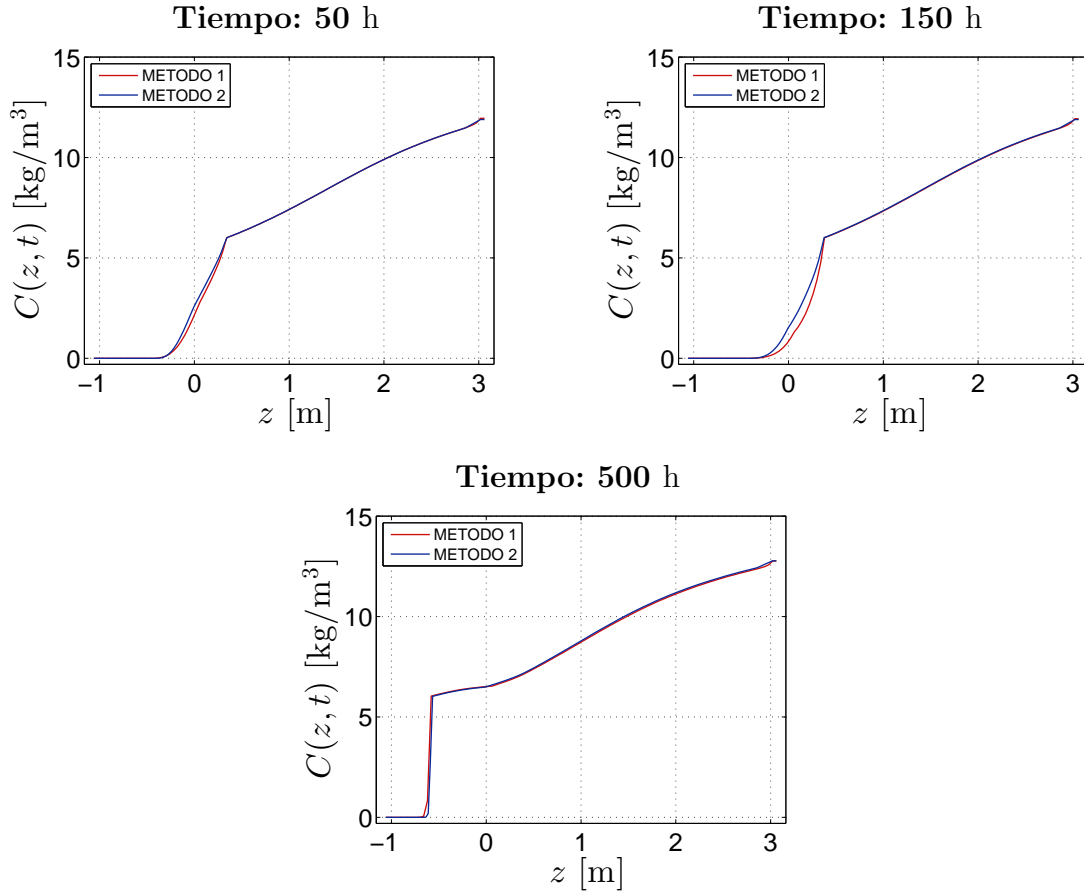


Figura 5.19: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 5.

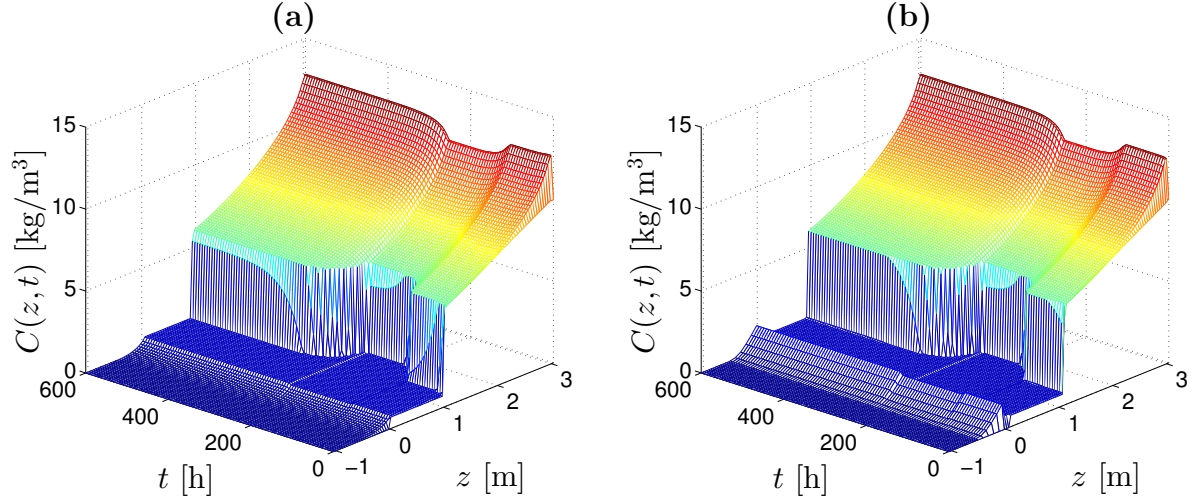


Figura 5.20: Solución aproximada para $N = 100$ con el Método 1 (a) y con el Método 2 (b) para el tanque 6 hasta un tiempo final de 600 horas.

5.2.6. Simulación 6 (Tanque 6).

La función de área $A(z)$ en este caso es discontinua, esta función de área sirve para comparar el comportamiento de ambos métodos en el caso de área discontinua. Notar que en éste caso el cuociente $A_{\text{máx}}/A_{\text{mín}} \approx 17.3611\text{m}$ es levemente superior al valor obtenido en la simulación 5, no obstante el valor $A_{\text{máx}}$ es el menor en comparación con los demás tanques, lo cual implica que el Método 2 en este caso será mucho más rápido que en las otras simulaciones. En la Figura 5.20 se pueden ver las soluciones dadas por ambos métodos. Se observa que en $z = 0\text{m}$ la solución dada por el Método 2 posee un salto de discontinuidad significativo en comparación con la solución dada por el Método 1 en la misma zona, este comportamiento erróneo de la solución aproximada se puede explicar debido a que en $z = 0\text{m}$ se tiene un punto de discontinuidad en la función de área, y entre $z = -0.5\text{m}$ y $z = 0\text{m}$ el valor de Δz es más grande. El hecho de que el comportamiento dado por el Método 1 sea el correcto se desprende del estudio de convergencia mostrado en la sección 5.4.

El paso temporal para ambos métodos como también el tiempo CPU bajo iguales condiciones de cómputo en esta simulación son

Método 1 : $\Delta t = 0.1500815\text{ s}$ & tiempo-CPU = 135.594841 s,

Método 2 : $\Delta t = 2.2256049\text{ s}$ & tiempo-CPU = 8.885174 s.

En este caso se tiene la mayor diferencia en los tiempos de cómputo, siendo el Método 1 aproximadamente quince veces más lento que el Método 2, esto es debido a que el valor de Δt sigue una proporción similar entre ambos métodos, pues Δt obtenido del Método 1 es aproximadamente 14.8293 menor al obtenido por el Método 2.

Puesto que en este caso el área es una función constante a trozos, los valores de Δz deberían ser también constantes a trozos, no obstante esto se puede asegurar sólo para

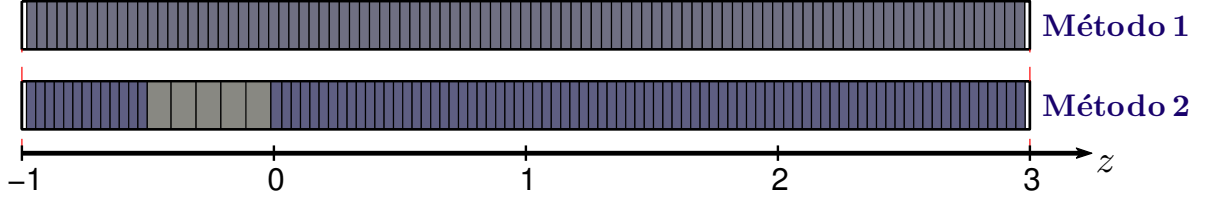


Figura 5.21: Diagrama de los nodos $z_{j-1/2}$ para $j = 1, \dots, 100$ con el Método 1 (constante) y con el Método 2 (variable) de la simulación 6.

celdas a las cuales no pertenezca alguna de las discontinuidades $z = -0.5$ m o $z = 0$ m, así $\Delta z \approx 0.09888$ para celdas completamente contenidas en $(-0.5, 0)$ y $\Delta z \approx 0.0369$ para celdas completamente contenidas en $[-1, -0.5) \cup (0, 3]$, ver Figura 5.21. La principal diferencia para los perfiles de tiempo $t = 50$ h, 150 h y 500 h de ambos métodos se aprecia entre $z = -0.5$ m y $z = 0$ m debido al salto de discontinuidad que se produce en la solución aproximada por el Método 2 ya discutida anteriormente, esto se puede apreciar en la Figura 5.22.

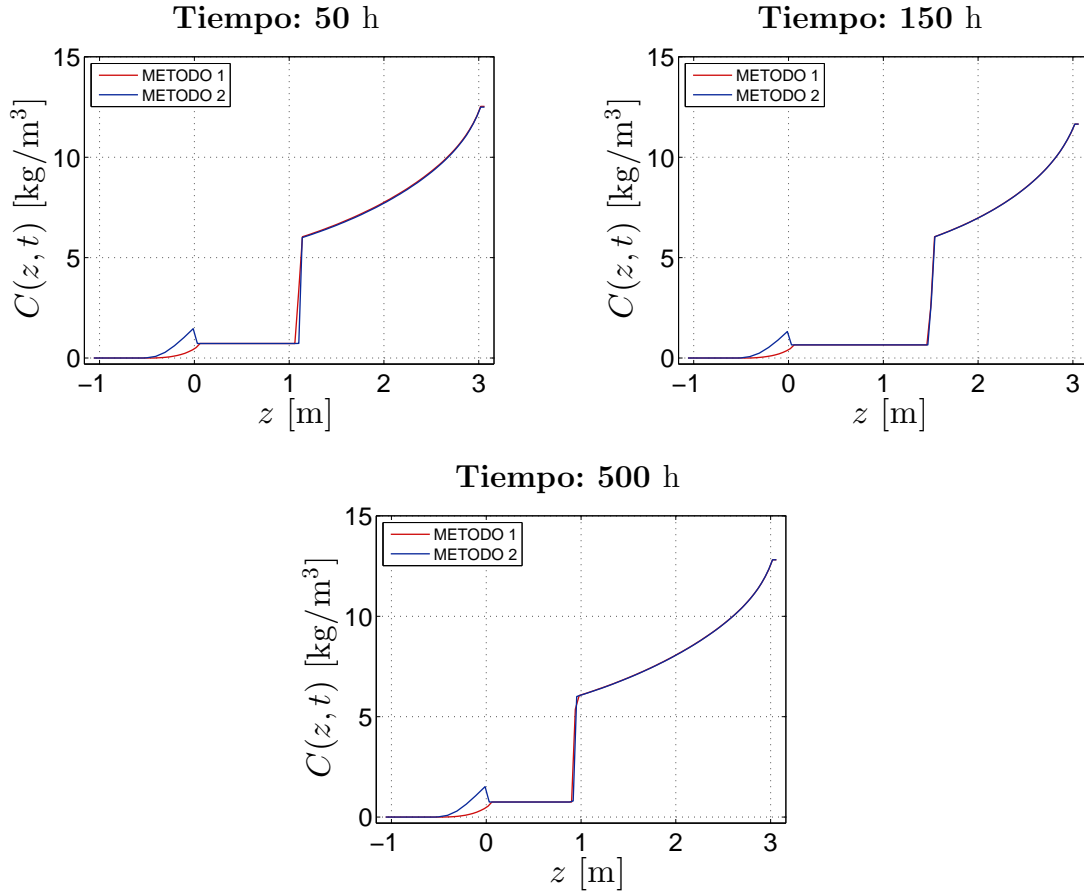


Figura 5.22: Comparación de la solución aproximada por el Método 1 y 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) para el tanque 6.

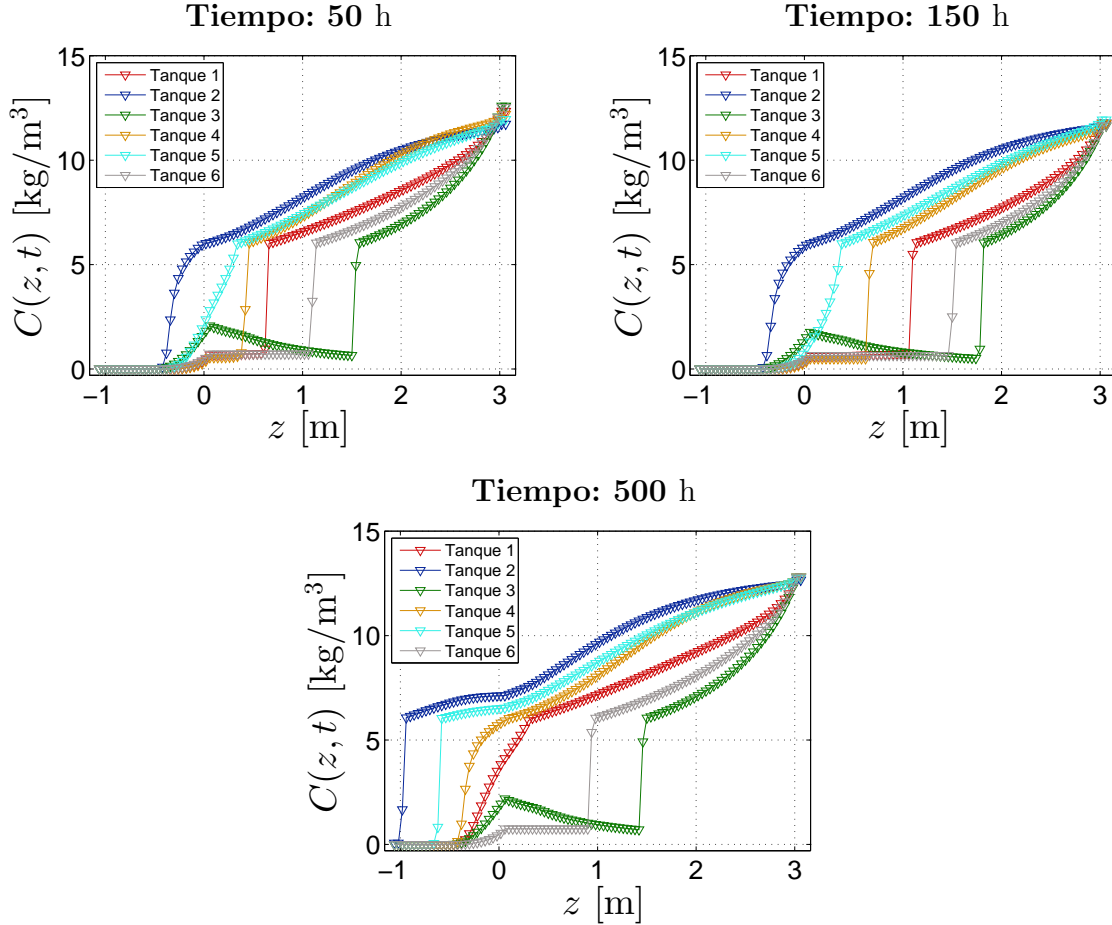


Figura 5.23: Comparación de la soluciones aproximadas por el Método 1 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) dadas en las simulaciones 1 a la 5.

5.3. Comparación por tanques:

Pese a que el volumen de cada uno de los tanques es el mismo, la diferencia en la geometría de estos genera diferencias considerables en las soluciones obtenidas por ambos métodos, siendo la geometría del sedimentador un aspecto relevante en la obtención de resultados más realistas. En las Figuras 5.23 y 5.24 se pueden ver las diferencias entre cada una de las simulaciones para cada uno de los seis tanques en $t = 50$ h, $t = 150$ h y $t = 500$ h de ambos métodos. Se observa que la solución obtenida para el tanque 2 es la única de todas en alcanzar el desborde para $t \leq 600$ h, lo cual se puede explicar dado que posee una reducida área de sección transversal en $z = 3$ m, el tanque 5 también posee un área reducida en $z = 3$ m y como ya se mencionó, éste tiende al rebalse para valores de t superiores a 600 h, no obstante el tanque con la menor área de sección transversal en $z = 3$ m es el tanque 6, este tanque no presenta una gran acumulación de material sólido en su interior (ver simulación 6) y no se aprecia una tendencia al rebalse como sería de esperar, su comportamiento difiere en este sentido al dado por las simulaciones 2 y 5

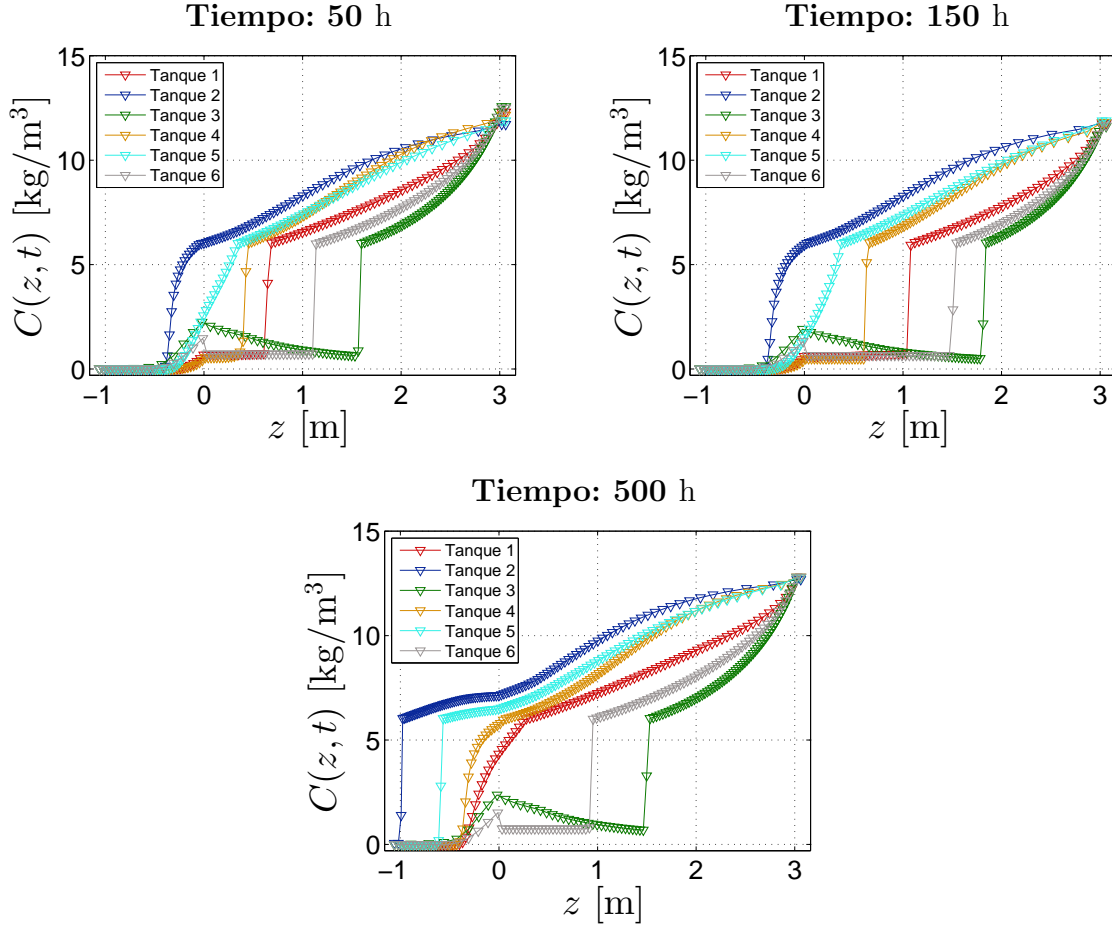


Figura 5.24: Comparación de la soluciones aproximadas por el Método 2 en $t = 50$ h (izquierda), $t = 150$ h (centro) y $t = 500$ h (derecha) dadas en las simulaciones 1 a la 5.

respectivamente. Esto se puede deber a que la función de área presenta discontinuidades en $z = -1$ m, -0.5 m, 0 m y en $z = 3$ m además de poseer la menor área de sección transversal en $z = -1$.

El único tanque con geometría denominada divergente considerado en las simulaciones junto con el de función de área discontinua poseen las mayores diferencia con respecto a los demás. La simulación para el tanque con geometría divergente (simulación 3) tiene la mayor área de sección transversal en $z = 3$ m y es el único caso en que se presenta un comportamiento decreciente de la concentración con respecto a la profundidad z . Por otro lado la solución para el tanque 6 utilizando el Método 2 presenta un salto de discontinuidad atribuido a la discontinuidad de la función de área, el cual es producto del error numérico producido por la aproximación para el valor de $N = 100$, para valores de N superiores a 100 se aprecia la disminución paulatina de dicho salto de discontinuidad, este comportamiento se puede observar para valores de N mayores que 100 y tiempo de simulación $t = 10$ h en la Figura 5.27, Tanque 6. Las concavidades dadas por la solución aproximada para concentraciones superiores a la crítica en los tanques 2, 4 y 5 son similares, con una

Tiempo: 50 horas		
Simulación	C_u método 1 [kg/m ³]	C_u método 2 [kg/m ³]
1	12.349061	12.311455
2	11.729193	11.716173
3	12.596099	12.571287
4	12.201266	12.162289
5	11.952257	11.890842
6	12.530031	12.494691

Cuadro 5.1: Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 50$ h.

notable concavidad negativa para valores de concentración superiores 7 kg/m³, en tanto para los tanques 1, 3 y 6 ésta cambia y en tales casos dicha concavidad es positiva.

En las seis simulaciones y para los tres perfiles de tiempo considerados en las comparación de las soluciones aproximadas (Figuras 5.7, 5.10, 5.13, 5.16, 5.19 y 5.22) las concentraciones de descarga C_u para ambos métodos se encuentran comprendidas entre 11.716 kg/m³ y 12.812 kg/m³, ver Cuadros 5.1, 5.2 y 5.3. Para $t = 50$ h las concentraciones de descarga obtenidas por el Método 1 son levemente superiores a las obtenidas por el Método 2, la mayor diferencia de concentraciones de descarga entre ambos métodos para este perfil temporal se obtiene en la simulación 5 con un valor aproximado de 0.061415 kg/m³, por otro lado la mayor concentración de descarga se obtiene para la simulación 3, ver Cuadro 5.1. Los valores de las concentraciones de descarga para $t = 150$ h disminuyen con respecto a $t = 50$ h, esto debido a la concentración de alimentación es menor en este perfil temporal que la dada para $t = 50$ h. Las diferencias en las concentraciones de descarga entre ambos métodos para cada simulación también disminuyen con respecto a $t = 50$ h, aquí la mayor diferencia de concentraciones de descarga entre los dos métodos nuevamente se tiene en la simulación 5 con una diferencia aproximada de 0.041583 kg/m³, el máximo valor de concentración de descarga en este caso se asume en la simulación 5.

Tiempo: 150 horas		
Simulación	C_u método 1 [kg/m ³]	C_u método 2 [kg/m ³]
1	11.739769	11.744614
2	11.790450	11.790006
3	11.638679	11.610680
4	11.777821	11.807681
5	11.931559	11.889976
6	11.649864	11.650793

Cuadro 5.2: Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 150$ h.

Tiempo: 500 horas		
Simulación	C_u método 1 [kg/m ³]	C_u método 2 [kg/m ³]
1	12.768348	12.778009
2	12.661766	12.687017
3	12.812464	12.797064
4	12.802936	12.807185
5	12.766773	12.775075
6	12.811963	12.812493

Cuadro 5.3: Concentración de descarga C_u obtenida a partir del Método 1 y 2 respectivamente para el tiempo $t = 500$ h.

Por último para el perfil temporal $t = 500$ h las concentraciones aumentan en relación a los perfiles temporales $t = 50$ h y $t = 150$ h, en este caso la mayor diferencia de concentraciones de descarga entre los dos métodos es de 0.025252 kg/m³ dada en la simulación 2, y la mayor concentración de descarga se obtiene en la simulación 6. En la Figura 5.25 se muestra la concentración de descarga en función del tiempo obtenida para cada una de las seis simulaciones tanto para el Método 1 como para el Método 2. Se aprecia una cima en la curva de la concentración de descarga de la simulación 3 y ésta es superior a las concentraciones obtenidas de las demás simulaciones para tiempos superiores a las 300 horas. Se observan diferencias entre las curvas obtenidas con un método y con el otro, no obstante ambos grupos de curvas tienden a una recta para valores de tiempo superiores a las 300 horas.

Es posible optimizar el área en el fondo del sedimentador de tal forma de evitar el desborde bajo condiciones de alimentación dadas, lo cual queda fuera del alcance de éste trabajo.

5.4. Precisión y eficiencia

Se considera una solución de referencia obtenida a partir del Método 1 para $N = 3000$ y tiempo de simulación igual a 10 horas, y las soluciones con ambos métodos numéricos para diferentes valores de N en $t = 10$ h. A continuación se presentan las imágenes con la comparación de las soluciones obtenidas para algunos valores de N y la solución de referencia para el perfil de tiempo $t = 10$ h a fin de mostrar el comportamiento de la solución aproximada por cada uno de los métodos numéricos con respecto a la variable espacial conforme aumenta el número de celdas. Pese a que la solución de referencia es construida utilizando el Método 1, el cual difiere en la discretización con el Método 2, es de esperar que ambas soluciones se aproximen cada vez más a la solución de referencia.

En la Figura 5.26 se muestra las soluciones obtenidas por el Método 1 para distintos valores de N , en las cuales se aprecia como las soluciones aproximadas respectivas para cada tanque se acercan cada vez más a la solución de referencia conforme el valor de N

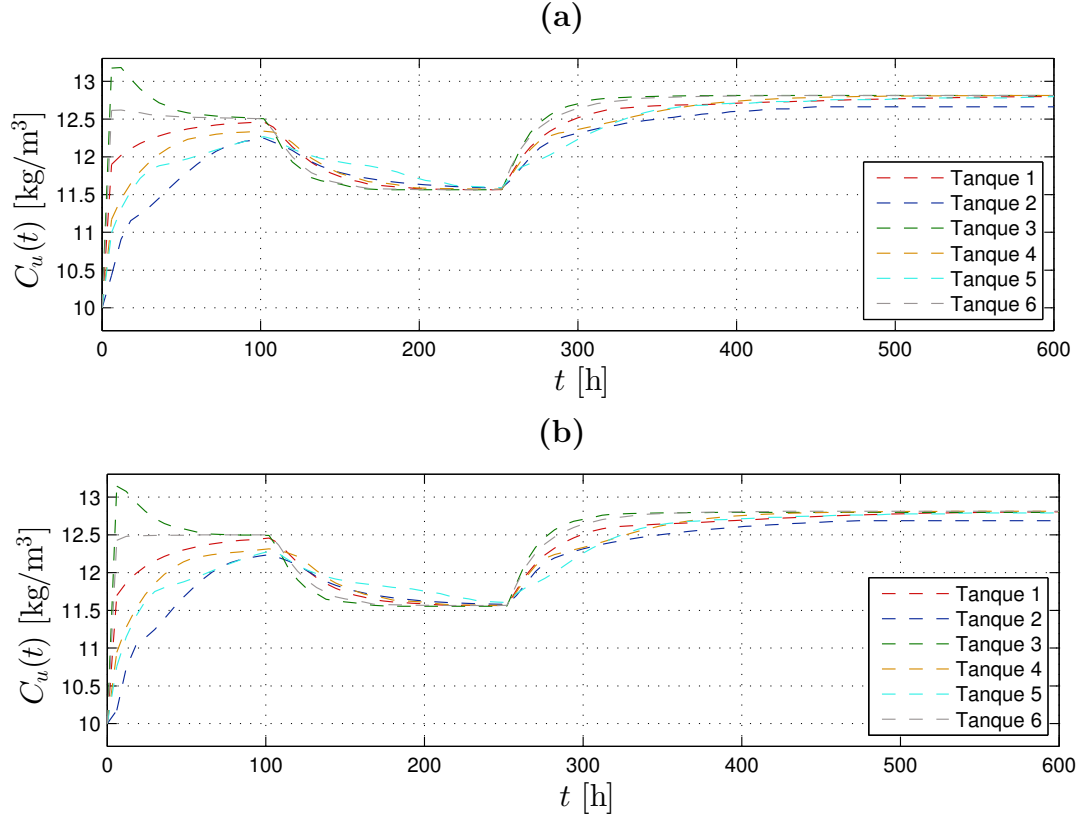


Figura 5.25: Concentración de descarga C_u en función del tiempo de la simulación 1 a la 6. Imágen superior **(a)** corresponde a la concentraciones de descarga obtenidas por el Método 1 y la imágen inferior **(b)** corresponde a las obtenidas por el Método 2.

aumenta.

La Figura 5.27 muestra las soluciones obtenidas utilizando el Método 2 para los mismos valores de N considerados para el caso del Método 1. Se puede observar que las soluciones aproximadas al igual que para el caso del Método 1 a medida que aumenta el valor de N tienden a la solución de referencia pese a las diferencias que ya han sido mencionadas con anterioridad entre ambos métodos. Las curvas producidas por las soluciones aproximadas obtenidas para cada N y cada tanque hacia el fondo del sedimentador (posterior al salto de discontinuidad) se encuentran por debajo de la curva dada por la solución de referencia, distinto al comportamiento de las curvas obtenidas por el Método 1. En la simulación 6, se observa que la discontinuidad en $z = 0$ m va disminuyendo conforme se aumenta el valor de N , aproximándose así a la solución de referencia.

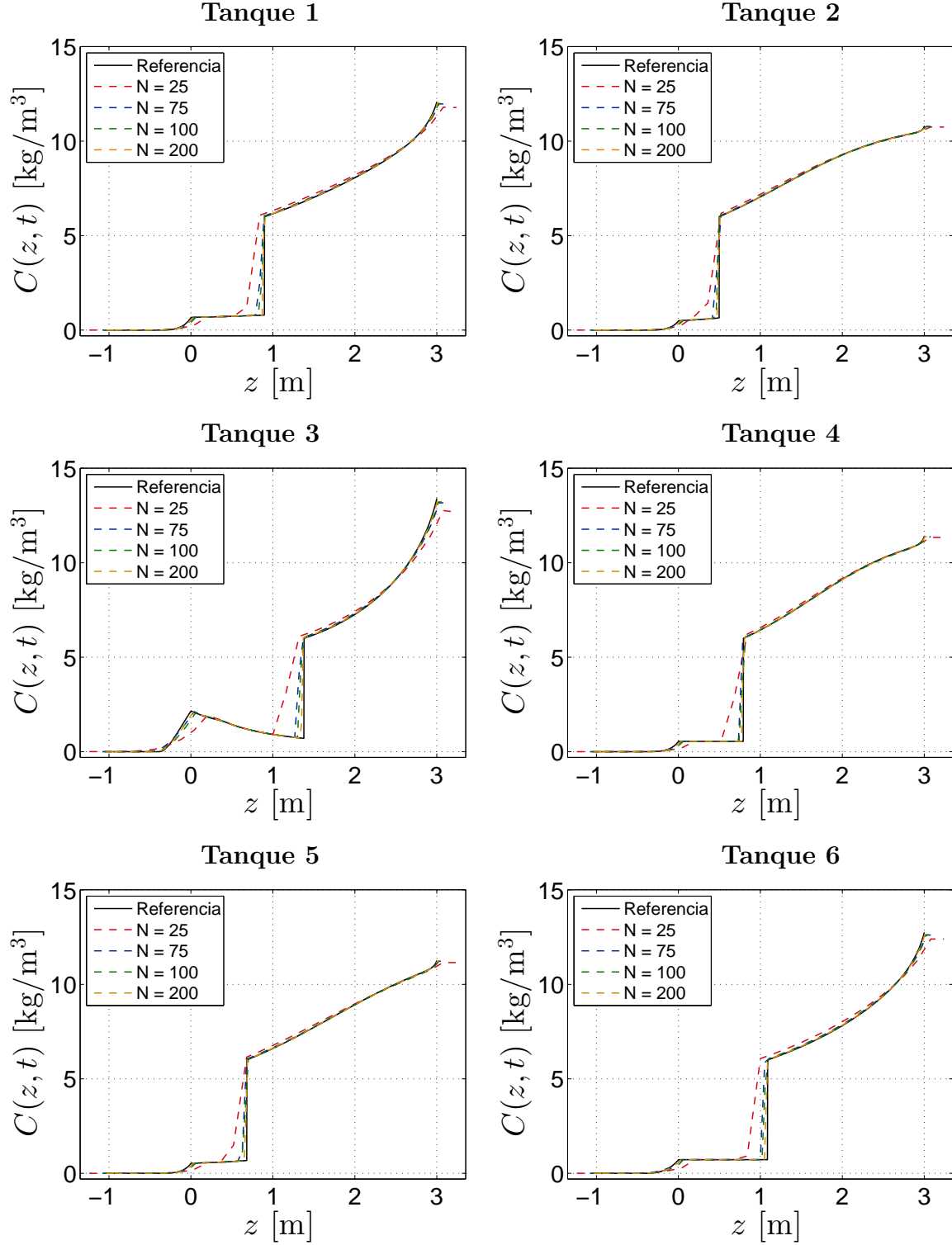


Figura 5.26: Solución aproximada para $N = 25, 75, 100, 200$ y solución de referencia con $N = 3000$ del Método 1 para el tiempo $t = 10$ h.

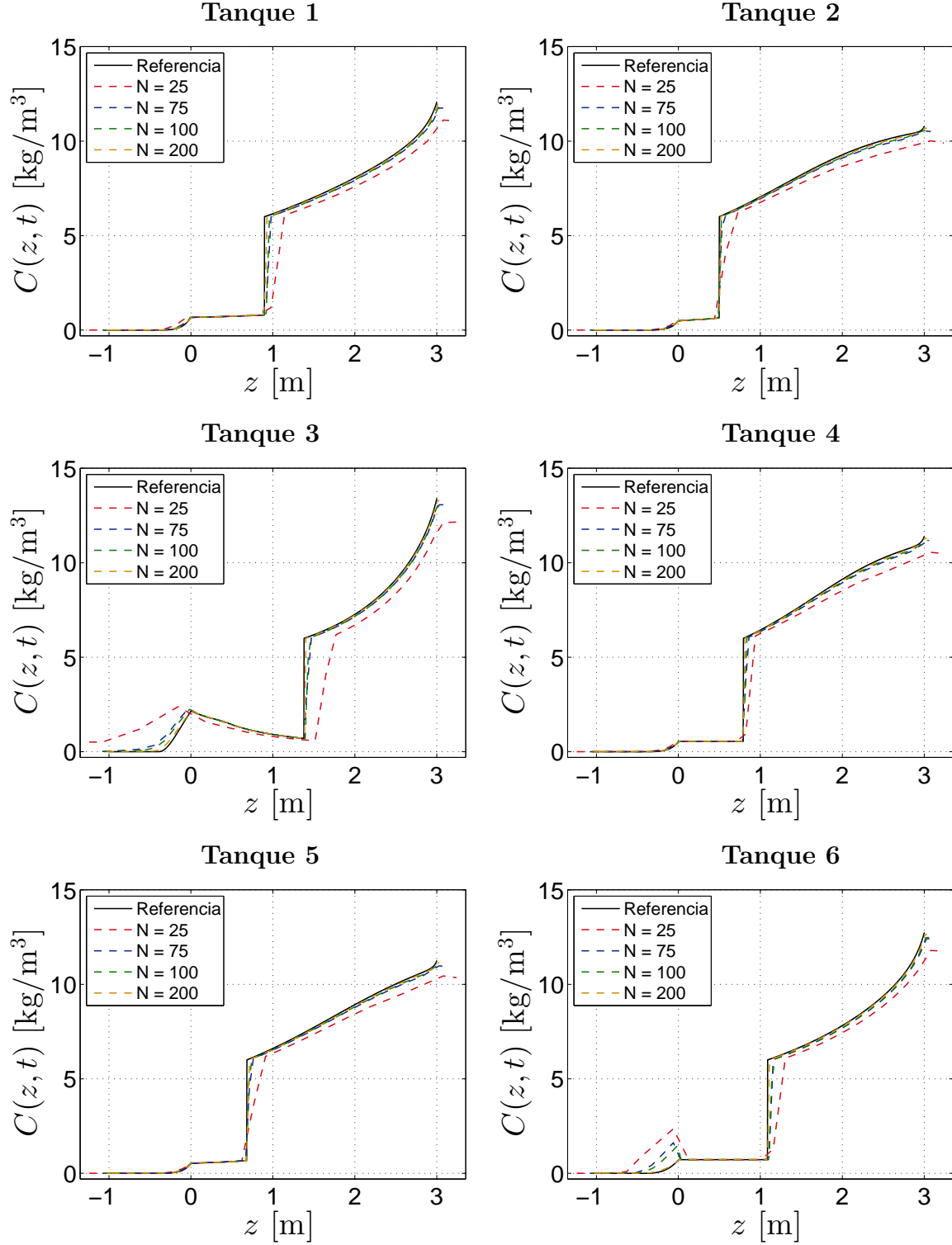


Figura 5.27: Solución aproximada para $N = 25, 75, 100, 200$ y solución de referencia con $N = 3000$ del Método 2 para el tiempo $t = 10$ h.

Tanque 1				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.131446	- -	0.238773	- -
25	0.070261	0.683611	0.114573	0.801384
50	0.028215	1.316254	0.044769	1.355686
75	0.022075	0.605274	0.034624	0.633766
100	0.014671	1.420277	0.029701	0.533159
200	0.007431	0.981266	0.011348	1.388120
300	0.004688	1.136149	0.009896	0.337675
600	0.002141	1.130910	0.004024	1.298007

Tanque 2				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.090082	- -	0.241736	- -
25	0.035566	1.014239	0.103963	0.920895
50	0.018001	0.982400	0.045740	1.184563
75	0.011110	1.190123	0.030114	1.030834
100	0.008101	1.098058	0.021282	1.206717
200	0.004221	0.940368	0.012979	0.713447
300	0.002540	1.253404	0.007506	1.350619
600	0.001361	0.899762	0.004823	0.637975

Cuadro 5.4: Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 1 y 2 en $t_0 = 10$ h.

5.4.1. Error relativo

Se define el error en norma L_1 con respecto a la variable espacial relativo a la solución de referencia en un tiempo t_0 fijo por

$$e_N^{\text{rel}} := \frac{\int_{-H}^B |C_N(z, t_0) - C_{\text{ref}}(z, t_0)| dz}{\int_{-H}^B |C_{\text{ref}}(z, t_0)| dz},$$

donde C_N denota la solución aproximada para un valor N , en nuestro caso $N < 3000$ y C_{ref} la solución de referencia calculada con $N = 3000$ considerando $t_0 = 10$ h utilizando el Método 1. Se define además la tasa de convergencia entre dos discretizaciones distintas N_1 y N_2 dada por

$$\theta = -\ln(e_{N_1}^{\text{rel}}/e_{N_2}^{\text{rel}}) / \ln(N_1/N_2)$$

Los errores obtenidos de las soluciones aproximadas para diferentes valores de N con ambos métodos se pueden ver en los Cuadros 5.4, 5.5 y 5.6.

Tanque 3				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.246656	- -	0.448171	- -
25	0.122721	0.761854	0.236854	0.695991
50	0.054914	1.160132	0.089462	1.404659
75	0.038847	0.853712	0.049057	1.481822
100	0.030461	0.845341	0.039401	0.761923
200	0.014933	1.028460	0.014278	1.464427
300	0.009698	1.064476	0.009826	0.921727
600	0.004382	1.146035	0.004427	1.150179

Tanque 4				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.101204	- -	0.249495	- -
25	0.043968	0.909833	0.109682	0.896939
50	0.018502	1.248814	0.057085	0.942131
75	0.013832	0.717312	0.042336	0.737214
100	0.010504	0.956933	0.033865	0.776023
200	0.005341	0.975801	0.023120	0.550673
300	0.003161	1.293307	0.019615	0.405412
600	0.001309	1.272250	0.016082	0.286565

Cuadro 5.5: Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 3 y 4 en $t_0 = 10$ h.

Los ordenes de magnitud de los errores relativos en los dos métodos son similares. Las gráficas obtenidas a partir de los errores presentados en las tablas anteriores sirven para obtener otro mecanismo de comparación entre ambos métodos. Estas gráficas se muestran en la Figura 5.28. Para ambos métodos y en cada una de las simulaciones para los diferentes tanques se ve el deseado comportamiento decreciente de los errores conforme aumenta el valor de N , los errores cometidos con el Método 2 son superiores a los obtenidos por el Método 1, lo cual es de esperar dado que la solución de referencia se obtiene utilizando el Método 1. En el caso de los tanques 1, 2 y 5, las tasas de convergencia son similares para ambos métodos, mientras que para el tanque 3 los errores cometidos para valores de N superiores a 100 tienden a igualarse. El caso del tanque 4 es el de una mayor variación entre en el comportamiento de los errores relativos de ambos métodos, a medida que aumenta el valor de N el error relativo cometido por el Método 2 decrece lentamente, no así el obtenido por el Método 1 que presenta una rápida disminución similar a lo que ocurre con el mismo método para el tanque 5. Para el tanque 6 los errores obtenidos por el Método 2 son decrecientes pero presentan leves variaciones en la tasa de convergencia conforme aumenta el valor de N .

Por último en la Figura 5.29 se puede ver las diferencias de los errores cometidos por

Tanque 5				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.075971	- -	0.229445	- -
25	0.045917	0.549508	0.095800	0.953187
50	0.017989	1.351934	0.047397	1.015228
75	0.013778	0.657641	0.027951	1.302452
100	0.009304	1.364885	0.021403	0.927887
200	0.004560	1.028826	0.013668	0.646970
300	0.002965	1.061649	0.008424	1.193646
600	0.001364	1.120340	0.004668	0.851872

Tanque 6				
N	e_N^{rel} método 1	θ método 1	e_N^{rel} método 2	θ método 2
10	0.156606	- -	0.430944	- -
25	0.088163	0.627034	0.115261	1.439258
50	0.037474	1.234292	0.047629	1.274993
75	0.028350	0.688105	0.037119	0.614871
100	0.019677	1.269421	0.032984	0.410514
200	0.009596	1.035983	0.011866	1.474934
300	0.006205	1.075480	0.010682	0.259170
600	0.002805	1.145370	0.006405	0.737869

Cuadro 5.6: Tablas con los errores e_N^{rel} para distintos valores de N del Método 1 y 2 para los tanques 5 y 6 en $t_0 = 10$ h.

cada uno de los métodos para cada tanque, en donde se aprecia notoriamente que el error cometido por el tanque 3 (geometría divergente) es mayor al cometido por los demás tanques utilizando ambos métodos, siendo el error cometido por el Método 2 considerando este tanque, el de mayor diferencia con respecto a los demás, esto se puede atribuir a la forma de la malla obtenida con esta función de área de sección transversal, la cual posee longitudes de Δz más grandes hacia $z = -H$, no obstante para el caso del tanque 2, sucede este mismo efecto, pero hacia $z = B$ y los errores en dicho caso no son elevados como el del tanque 3, con lo cual se puede conjeturar que un refinamiento menor hacia $z = -H$ produciría un error relativo más grande que el de un refinamiento menor hacia $z = B$, para ratificar este comportamiento de los errores relativos se podrían considerar más tanques con área de sección transversal divergente con distintas formas, lo cual queda fuera del alcance de este trabajo.

5.4.2. Comparación de la eficiencia

Se ha visto en las simulaciones 1 a 6 que en general para las geometrías utilizadas en este capítulo (tanques 1 a 6) el Método 2 es más rápido que el Método 1, sin embargo al

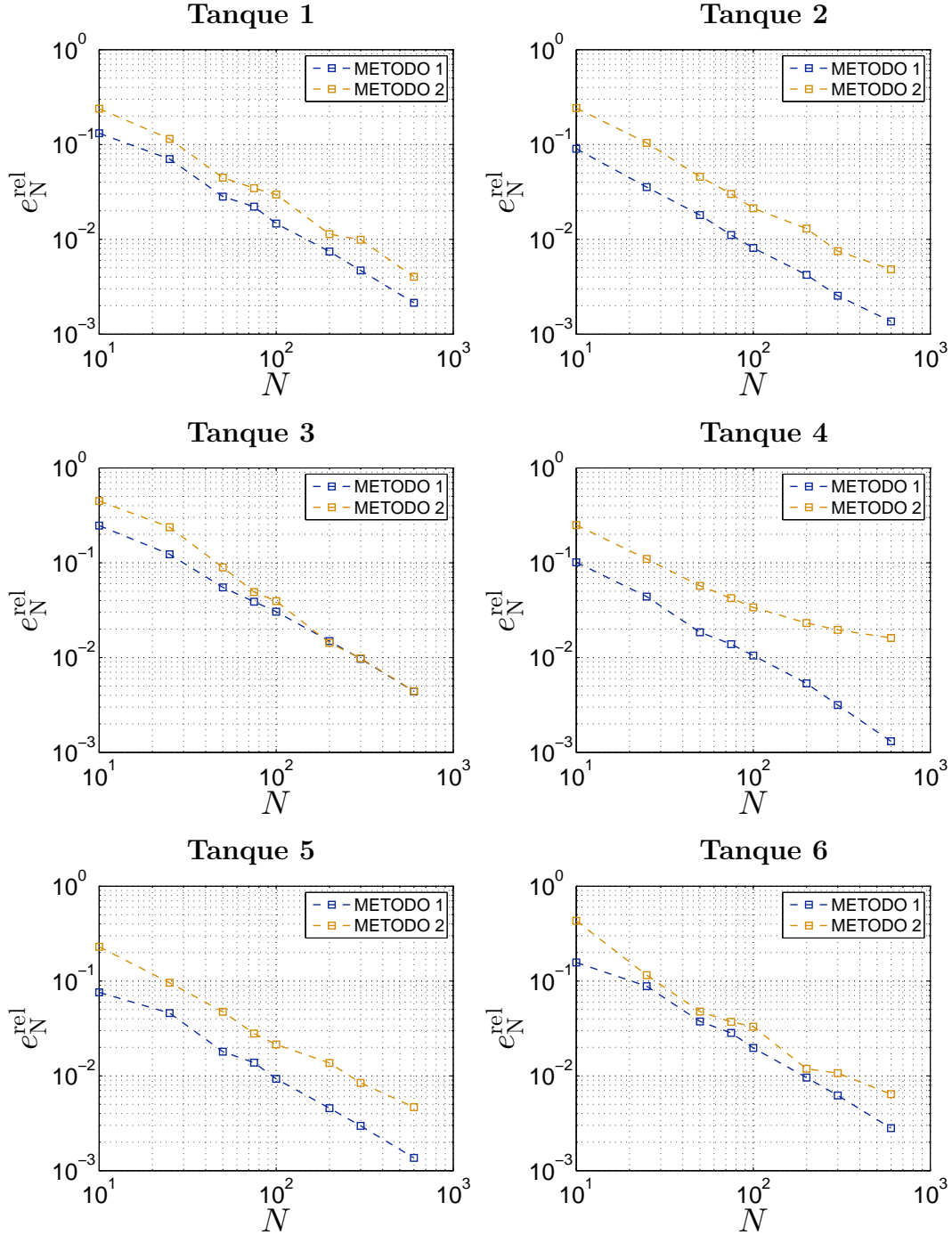


Figura 5.28: Error relativo e_N^{rel} cometido considerando los tanques 1 a 6 en función de N para los métodos 1 y 2 respectivamente.

calcular el error relativo es posible observar que el error cometido por el Método 1 es menor al cometido por el Método 2 para diferentes valores de N con respecto a una solución de referencia dada por el Método 1. Para poder comparar la eficiencia entre ambos métodos se gráfica el error relativo versus el tiempo CPU medido en segundos para los mismos valores de N considerados anteriormente ($N = 10, 25, 50, 75, 100, 150, 200, 300, 600$), habiendo

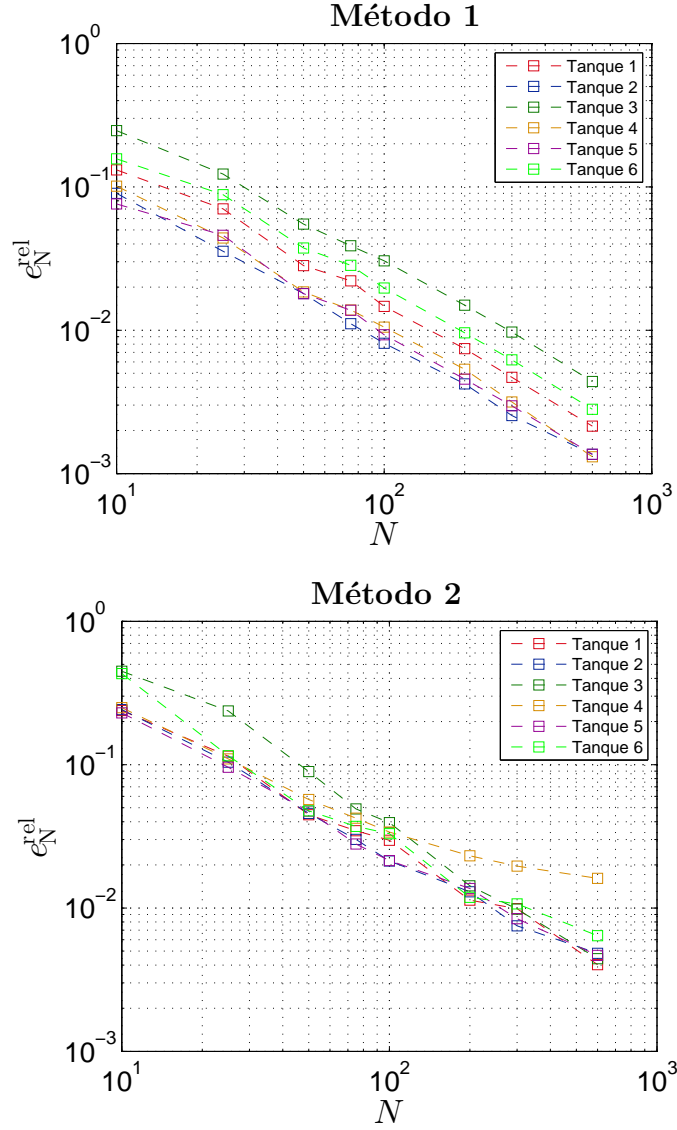


Figura 5.29: Error relativo e_N^{rel} cometido por el Método 1 (arriba) y Método 2 (abajo) en función de N para los tanques 1 al 6.

sido realizados todos las simulaciones con iguales condiciones de cómputo. Se considera que un método es más eficiente que otro si requiere un menor tiempo computacional para obtener un error determinado, esto último se puede observar graficamente (al considerar en el eje de las ordenadas el error relativo y en el de las absisas el tiempo CPU) la curva que se encuentra por debajo de la otra. En la Figura 5.30 se aprecian las gráficas de eficiencia para ambos métodos en los distintos tanques, en ella se aprecia que la eficiencia varia considerablemente de un tanque a otro. Para el tanque 1, 2, 4 y 5 el Método 1, sin embargo es más eficiente que el 2, siendo el caso del tanque 4 aquel con la mayor diferencia. Las curvas obtenidas para el tanque 3 muestran que para un cierto valor de N el Método 2 tiende a ser más eficiente que el 1, sin embargo las curvas son similares. El caso del tanque 6 es la única geometría en la cual se obtiene una mayor eficiencia del Método 2 sobre el 1,

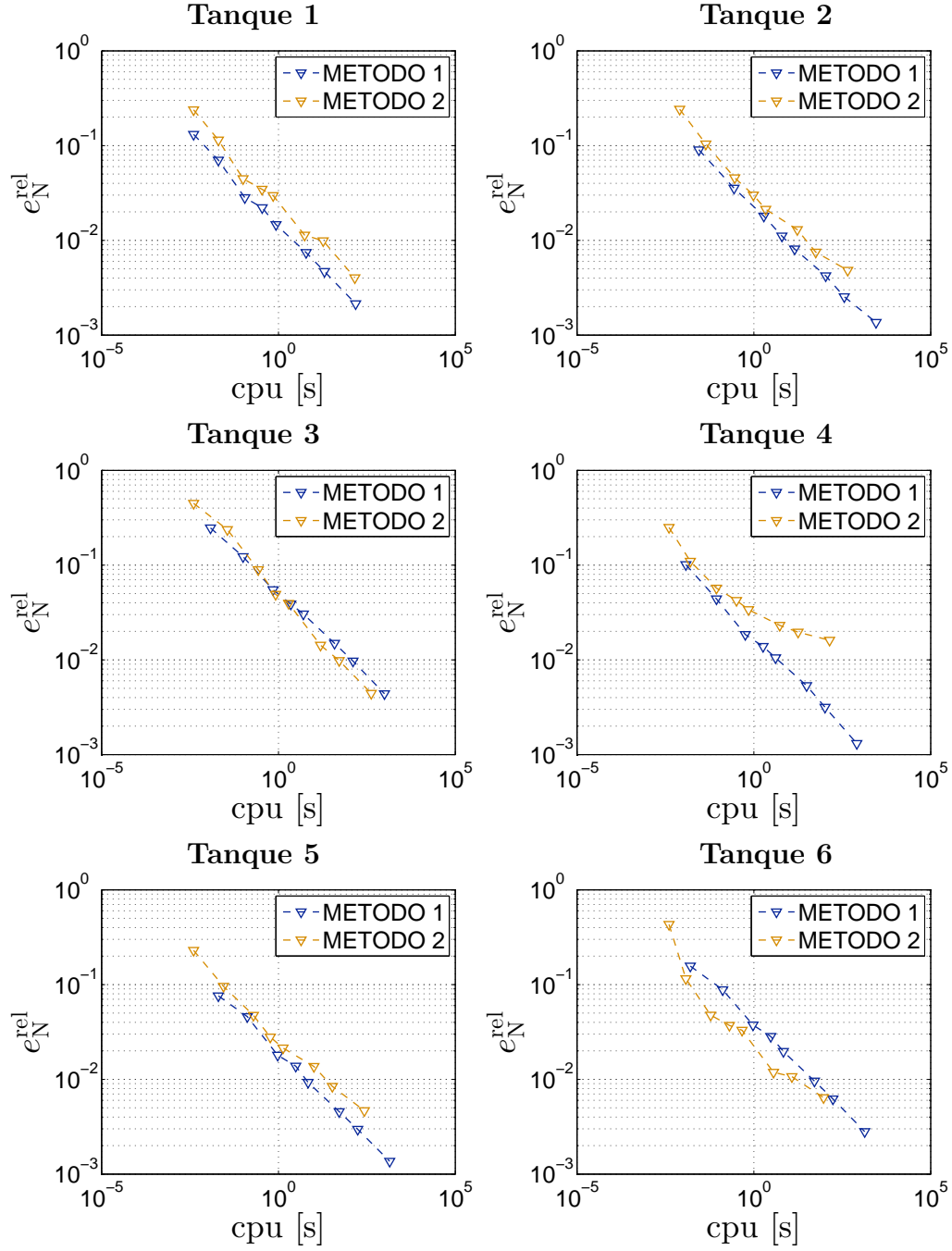


Figura 5.30: Error relativo e_N^{rel} cometido considerando los tanques 1 a 6 versus el tiempo CPU para los métodos 1 y 2 respectivamente.

sin embargo las curvas tienden a intersectarse.

A la luz de los resultados obtenidos es posible concluir que no existe una gran diferencia entre las eficiencias de ambos métodos salvo el caso del tanque 4. Cabe señalar que los errores calculados tienen el sesgo de la determinación de la solución de referencia a partir de un sólo método.

Capítulo 6

Condiciones CFL casos específicos

En el Capítulo 4 se vio la forma en la que se obtiene la condición CFL para el método numérico y se puede apreciar la forma en la cual se realizan las cotas de tal forma de obtener la monotonía del esquema general, en él se deducen las condiciones CFL para ambos métodos. En el Capítulo 5 se compara ambos métodos y se concluye que el Método 2 es más rápido que el Método 1 bajo la condición CFL encontrada en el Capítulo 4. Para las geometrías consideradas en las simulaciones anteriores es posible determinar una condición CFL mucho más ventajosa que las dadas en el Capítulo 4 para ambos métodos. Se considera la desigualdad (4.1), en ella se puede apreciar la existencia de un factor del tipo

$$\frac{A_{j-1/2} + A_{j+1/2}}{A_j}, \quad (6.1)$$

el cual al ser mayorado se obtiene el término $2 \max \{A(z)\} / \min \{A(z)\}$ que disminuye drásticamente el valor de Δt para tanques con gran variación de área transversal. Se estudiará una mayoración conveniente del factor (6.1) para dos tipos de áreas de sección transversal distintas, mostrando que se puede obtener una cota de condición CFL mucho mejor que la dada por el Método 1 y 2. Dada una función de área $A := A(z)$ (positiva), definimos

$$\mathcal{R}(z, \alpha) := \frac{A(z - \alpha) + A(z + \alpha)}{A(z)}, \quad z \in [-H, B], \quad \alpha \leq H + B.$$

En el caso particular en que A es de clase C^2 , aplicando un desarrollo en serie de Taylor truncada para A se obtiene

$$\mathcal{R}(z, \alpha) = 2 + \frac{A''(z)}{A(z)} \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3). \quad (6.2)$$

Luego considerando la función de área (de tipo conica truncado convergente/divergente)

$$A(z) = A_{-H} (a(z + H) + 1)^2, \quad (6.3)$$

donde $A_{-H} \in \mathbb{R}^+$ y $a \in \mathbb{R}$ es elegido de tal forma que la función de área no sea nula, ni negativa. Vemos que en este caso $A''(z) = 2A_{-H}a^2$, y $A'''(z) = 0$, con lo cual

$$\mathcal{R}(z, \alpha) = 2 \left(1 + \frac{a^2}{(a(z + H) + 1)^2} \alpha^2 \right),$$

ahora para el caso de un cóno truncado convergente con respecto a la profundidad $a < 0$, en tal caso a sólo puede asumir valores en el intervalo $] -1/L, 0[$ con $L := H + B$. En tal caso se tiene que $A(B) = \min\{A(z)\}$ con lo cual

$$\mathcal{R}(z, \alpha) \leq \mathcal{R}(B, \alpha) = 2 \left(1 + \frac{a^2}{(aL + 1)^2} \alpha^2 \right) \leq 2 \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}}. \quad (6.4)$$

Por otro lado para un cono truncado divergente $a > 0$ y en tal caso

$$\mathcal{R}(z, \alpha) \leq \mathcal{R}(-H, \alpha) = 2 (1 + a^2 \alpha^2) \leq 2 \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}}. \quad (6.5)$$

Así (6.4) y (6.5) representan mejores cotas para este caso particular, con lo cual para cada $j = 1, \dots, N$ y $\Delta z = L/N$ y función de área A definida en (6.3) el cuociente

$$\frac{A_{j-1/2} + A_{j+1/2}}{A_j} = \mathcal{R}(z_j, \Delta z/2)$$

se encuentra acotado por

$$\tilde{\mathcal{R}} := \begin{cases} 2 \left(1 + \frac{a^2}{4(aL + 1)^2} (\Delta z)^2 \right) & \text{si } a < 0, \\ 2 & \text{si } a = 0, \\ 2 \left(1 + \frac{a^2 \Delta z^2}{4} \right) & \text{si } a > 0. \end{cases}$$

Ahora para el caso de una función de área de sección transversal del tipo

$$A(z) = A_{-H} (a(B - z) + b),$$

se tiene que $A''(z) = A'''(z) = 0$ luego $\mathcal{R}(z, \alpha) = 2 \leq 2 \max\{A(z)\} / \min\{A(z)\}$ y por lo tanto para cada $j = 1, \dots, N$

$$\frac{A_{j-1/2} + A_{j+1/2}}{A_j} = 2 = \tilde{\mathcal{R}}$$

Este tipo de áreas de sección transversal fue utilizada para la simulación 5 y en cuyo caso $2 \max\{A(z)\} / \min\{A(z)\} \approx 34.571728$ lo cual es más de 15 veces el valor obtenido para $\tilde{\mathcal{R}}$, lo cual muestra la desmedida cota utilizada en esta condición CFL. Para ambos casos la nueva condición para el Método 1 se puede reescribir como

$$\Delta t \leq \left(\frac{1}{\Delta z} \frac{\max\{Q_f(t)\}}{\min\{A(z)\}} + \frac{\tilde{M}}{\Delta z} \|f'_{bk}\|_{\infty} + \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{\Delta z^2} (\|d_{\text{comp}}\|_{\infty} + \|d_{\text{disp}}\|_{\infty}) \right)^{-1} \quad (6.6)$$

donde $\tilde{M} := \min\{\tilde{\mathcal{R}}, \frac{\max\{A(z)\}}{\min\{A(z)\}}\}$. A continuación se muestran las gráficas de Δt versus N obtenidos de las condiciones CFL (4.1), (4.2) y (6.6) para los tanques 1, 2, 3 y 5 definidos en el Capítulo 5.

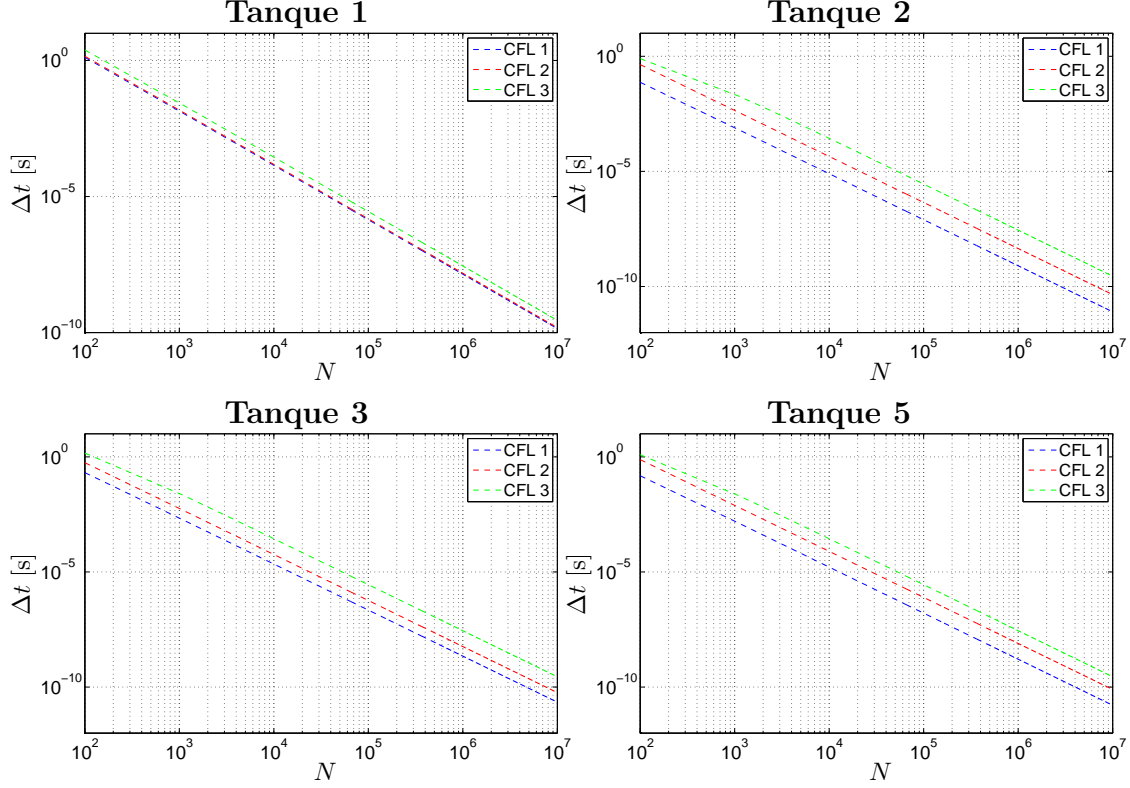


Figura 6.1: Paso temporal Δt en función de N para la condición CFL del Método 1 (CFL 1), condición CFL del Método 2 (CFL 2) y condición CFL específica (6.6) (CFL 3) obtenida para los tanques 1, 2, 3 y 5.

La Figura 6.1 muestra que las cotas específicas (6.6) para cuatro de las geometrías definidas en el Capítulo 5 entregan valores de Δt mayores que los dados por las condiciones CFL del método 1 como del método 2, lo cual implica una ganancia de tiempo en las simulaciones y un menor costo computacional. Además, para geometrías más complejas como por ejemplo áreas de sección transversal discontinuas, el problema de acotar $\mathcal{R}(z, \alpha)$ se vuelve más complejo en general, sin embargo es importante recalcar que para la obtención del cambio de variable definido en el Método 2 no siempre es posible utilizar un desarrollo algebraico, por lo cual es necesario definir un algoritmo que calcule el cambio de variable inverso de x a z , también en el mismo sentido es preciso definir una regla de cuadratura para calcular la integral de la definición en casos más generales, lo cual puede llegar a ser muy costoso computacionalmente, sumado a los errores obtenidos de las aproximaciones respectivas. Por lo tanto una forma de obtener una condición CFL más ventajosa sin pasar por el Método 2 es directamente programar el vector

$$\mathbf{r} = \left(\frac{A_{1/2} + A_{3/2}}{A_1}, \dots, \frac{A_{N-1/2} + A_{N+1/2}}{A_N} \right)$$

luego definir $\tilde{\mathcal{R}} = \max\{\mathbf{r}\}$ y utilizar la condición CFL dada en (6.6). En el caso de fortran 90 lenguaje en el cual se han implementado ambos métodos para este trabajo, la función “máximo” viene incluida previamente. Este es un procedimiento sencillo, no es

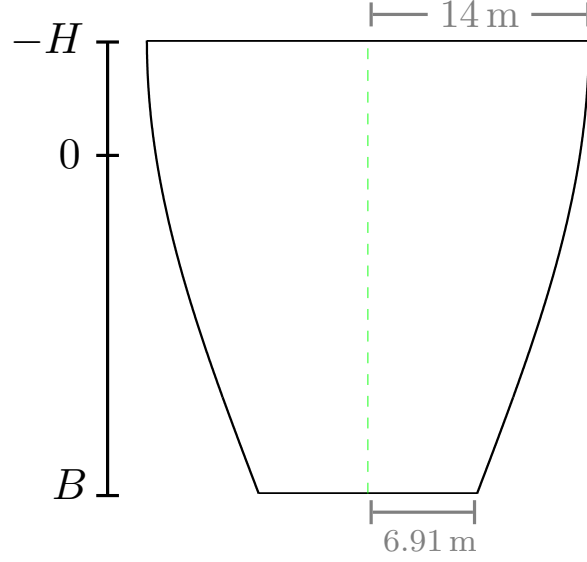


Figura 6.2: Diagrama de un sedimentador con función de área dada por la función (6.7). Donde $H = 1$ m y $B = 3$ m.

costoso computacionalmente dado que la función de área transversal A debe ser programada debido a que forma parte de la ecuación principal, además no incluye nuevos errores a la aproximación como sería el caso de aplicar una regla de cuadratura o un calculo de una función inversa. La ventaja es la obtención de una condición CFL incluso mejor que la dada por el Método 2 en algunos casos, y sin la programación extra que involucra el cambio de variables.

Un ejemplo de función de área para la cual es necesario realizar una integración numérica previa es la definida por la función de radio

$$r(z) = 18 e^{-\frac{1}{32}(z+1)^2} - 4,$$

para $H = 1$ m y $B = 3$ m, esta es

$$A(z) = \pi \left(18 e^{-\frac{1}{32}(z+1)^2} - 4 \right)^2, \quad (6.7)$$

el volumen total de un sedimentador con esta función de área es $V \approx 1693.46 \text{ m}^3$, con área máxima 615.75 m^2 y área mínima 150.33 m^2 . En la Figura 6.2 se aprecia un sedimentador con ésta función de área.

Capítulo 7

Sedimentación reactiva

Como ya se ha mencionado durante el presente trabajo, el planteamiento de las ecuaciones junto con un esquema numérico y la resolución bajo distintos escenarios para el proceso de sedimentación no reactiva en plantas de tratamiento de aguas servidas ha sido tratado en trabajos previos por Bürger et al. (2011, 2012, 2013b). La idea de este capítulo es mostrar una primera extensión del modelo de Bürger-Diehl al caso de sedimentación reactiva para un problema de orden reducido de sedimentación batch. Para las simulaciones es posible utilizar todas las herramientas desarrolladas en los trabajos previos para la aproximación numérica en el caso no reactivo.

Esta primera extensión es el resultado de un trabajo en conjunto con Raimund Bürger, Stefan Diehl, Camilo Méjias, Ingmar Nopens, Elena Torfs y Peter Vanrolleghem.

7.1. Preliminar

Muchos modelos de proceso de lodos activados se basan en el supuesto de que todas las reacciones ocurren en el reactor biológico y que no hay reacción en el tanque sedimentador secundario (TSS) (Gernaey et al., 2014). No obstante, es bien sabido que ocurren reacciones biológicas en el sedimentador. En particular la desnitrificación ocurre hacia el fondo del tanque en donde la concentración de los lodos es elevada y no existe suministro de oxígeno. Siegrist et al. (1995) y Koch et al. (1999) reportaron medidas de tres plantas, mostrando que del total de desnitrificación en cada planta, el 15 %, 30 % y 37 % ocurre en el sedimentador, respectivamente. Gernaey et al. (2006) presenta un estudio de simulaciones tomando en cuenta dos modelos diferentes para las reacciones que tienen lugar en el sedimentador. Ambos modelos utilizan el modelo de simulación dado por Takács et al. (1991) para el proceso de sedimentación. El primer modelo incluye un bloque de modelo adicional en la línea de lodos de retorno consistente en la eliminación algebraica de oxígeno y nitrato para dar cuenta de las reacciones en el sedimentador. El segundo modelo consiste en la utilización de todo el modelo de lodo activado no 1 (ASM1) dado por Henze et al. (1987), modelando las biorreacciones en cada una de las 10 capas en el modelo sedimentación de Takács. Otros autores han estudiado diferentes modelos de

lodos activados, por ejemplo Flores-Alsina et al. (2012), Ostace et al. (2012) y Guerrero et al. (2013). Para compensar la sobrestimación del modelo sedimentación reactiva de 10 capas, Guerrero et al. (2013) introduce un factor de reducción a la cinética. Estos factores no están presentes en los balances de masa originales y por lo tanto no está de acuerdo con una metodología de modelamiento consistente (Bürger et al., 2011). Para introducir tal factor como compensación por algún otro fenómeno — en este caso la gruesa discretización espacial (10 capas) del sedimentador para la simulación numérica.

Una aplicación relacionada es la sedimentación reactiva ocurrida en reactores batch secuenciales (SBR), para los que se pueden encontrar algunos modelos con enfoque heurístico (Alex et al., 2011; Kazmi y Furumai, 2000a,b). Keller y Yuan (2002) modelan un SBR sin considerar sedimentación reactiva.

A pesar de la sencillez de nuestro modelo reducido, representa tres supuestos constitutivos que determinan su naturaleza matemática:

- i) La sedimentación obstaculizada de las partículas floculadas.
- ii) La compresión de las partículas floculadas en altas concentraciones cuando se forma una malla (partículas próximas unas a otras que admiten esfuerzo).
- iii) Términos de reacción que contienen una tasa cinética de crecimiento no lineal y un decaimiento constante de la biomasa.

Algunas de ellas ya consideradas en modelo de Burger-Diehl (Bürger et al., 2011, 2013b; Torfs et al., 2015a).

7.2. Modelo gobernante

Estudiamos el proceso de sedimentación batch en una dimensión espacial de partículas suspendidas en agua con sustratos solubles en un recipiente cerrado con un área de sección transversal constante. La profundidad z se mide desde la superficie del recipiente (cilindro) en $z = 0$ m hasta el fondo en $z = B$. Por simplicidad, se estudia la última fase de sedimentación de un proceso SBR donde suponemos que, además de partículas de biomasa, todavía hay una cierta cantidad de nitrato disuelto (NO_3) en el agua. A medida que la biomasa se desintegra, en seguida biodegradable DQO (o COD en inglés) se produce, reacciona con el nitrato, y el nitrógeno gaseoso (N_2) es producido en concentraciones tan bajas que se disuelve en el agua.

Las partículas de microorganismos se dividen en dos componentes: los organismos heterótrofos ordinarios (X_{OHO}) y los compuestos orgánicos no degradables (X_{U}). La concentración total de las partículas floculadas es: $X := X_{\text{OHO}} + X_{\text{U}}$. Cada partícula se asume que sedimenta con velocidad $v = v(X, Xz)$ dada por supuestos constitutivos de sedimentación obstaculizada con compresión que involucra la concentración local X y su derivada espacial $X_z := \partial X / \partial z$. La notación para la concentración de los sustratos solubles en agua son S_{NO_3} para el nitrato, S_{S} para el sustrato fácilmente biodegradable y S_{N_2} para el gas

nitrógeno. El pequeño movimiento espacial de los sustratos causado por la sedimentación de las partículas se asume capturado por un único coeficiente de difusión d_S presente en las ecuaciones del modelo.

Al inicio de la sedimentación, asumimos una suspensión homogénea de las partículas con concentración X_0 , concentración de nitrato $S_{\text{NO}_3}^0$, sustratos fácilmente biodegradables S_S^0 y una concentración de gas nitrógeno igual a cero. Cada partícula consiste inicialmente en un determinado porcentaje p_0 de heterótrofos y el resto son organismos no degradables. El balance de masa produce las siguientes ecuaciones diferenciales parciales para $0 < z < B$ y $t > 0$:

$$\frac{\partial X_{\text{OHO}}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(v(X, X_z)X_{\text{OHO}}) + (\mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) - b)X_{\text{OHO}}, \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial X_U}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(v(X, X_z)X_U) + f_P b X_{\text{OHO}}, \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial S_{\text{NO}_3}}{\partial t} = d_S \frac{\partial^2 S_{\text{NO}_3}}{\partial z^2} - \frac{1-Y}{2.86Y} \mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) X_{\text{OHO}}, \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial S_S}{\partial t} = d_S \frac{\partial^2 S_S}{\partial z^2} - \left(\frac{\mu(S_{\text{NO}_3}, S_S)}{Y} - (1 - f_P)b \right) X_{\text{OHO}}, \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial S_{\text{N}_2}}{\partial t} = d_S \frac{\partial^2 S_{\text{N}_2}}{\partial z^2} + \frac{1-Y}{2.86Y} \mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) X_{\text{OHO}}, \quad (7.5)$$

junto con las condiciones iniciales

$$\begin{aligned} X_{\text{OHO}}(z, 0) &= p_0 X_0, & X_U(z, 0) &= (1 - p_0) X_0, \\ S_{\text{NO}_3}(z, 0) &= S_{\text{NO}_3}^0, & S_S(z, 0) &= S_S^0, & S_{\text{N}_2}(z, 0) &= 0, \end{aligned} \quad (7.6)$$

donde $S_{\text{NO}_3}^0$ y S_S^0 son constantes dadas, y las condiciones de flujo cero en la frontera

$$\begin{aligned} v(X, X_z)X|_{z=0} &= v(X, X_z)X|_{z=B} = 0, \\ (S_{\text{NO}_3})_z(0, t) &= (S_{\text{NO}_3})_z(B, t) = 0, \\ (S_S)_z(0, t) &= (S_S)_z(B, t) = 0, \\ (S_{\text{N}_2})_z(0, t) &= (S_{\text{N}_2})_z(B, t) = 0. \end{aligned}$$

Aquí, Y es un factor adimensional de rendimiento y b es la tasa de descomposición de biomasa activa. La tasa de crecimiento bacteriano específica está dada por el siguiente producto de expresiones de Monod:

$$\mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) := \mu_{\max} \frac{S_{\text{NO}_3}}{K_{\text{NO}_3} + S_{\text{NO}_3}} \frac{S_S}{K_S + S_S}, \quad (7.7)$$

donde μ_{\max} es la tasa máxima de crecimiento y $K_{\text{NO}_3}, K_S \geq 0$ son constantes de saturación media (ver Tabla 7.1). La función constitutiva de la velocidad de las partículas $v(X, X_z)$ es asumida tomando en cuenta la obstaculización a la sedimentación y la compresión, y es de la siguiente forma (Bürger et al., 2011):

$$v(X, X_z) = \begin{cases} v_{\text{hs}}(X) & \text{si } X < X_c, \\ v_{\text{hs}}(X) \left(1 - \frac{\rho_s \sigma'_e(X)}{X g \Delta \rho} \frac{\partial X}{\partial z} \right) & \text{si } X > X_c. \end{cases} \quad (7.8)$$

Parámetro del modelo	símbolo	valor y unidad
parámetro presente en la función v_{hs} , cf. (7.9)	v_0	$1.76 \times 10^{-3} \text{ m s}^{-1}$
parámetro presente en la función v_{hs} , cf. (7.9)	\bar{X}	3.87 kg m^{-3}
parámetro presente en la función v_{hs} , cf. (7.9)	q	$3.58 [-]$
parámetro de proporción	f_P	$0.2 [-]$
concentración crítica	X_c	5 kg m^{-3}
parámetro en la función de esfuerzo efectivo σ_e , cf. (7.10)	α	$0.2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$
densidad del sólido	ρ_s	1050 kg m^{-3}
diferencia de densidad sólido-fluido	$\Delta\rho$	52 kg m^{-3}
aceleración de gravedad	g	9.81 m s^{-2}
coeficiente de difusión	d_S	$1.00 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
constante de rendimiento heterótrofo	Y	$0.67 [-]$
tasa de crecimiento heterótrofo máxima	$\mu_{\text{máx}}$	$5.56 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$
tasa de decaimiento heterótrofo	b	$6.94 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$
coeficiente de saturación media (csm) para heterótrofos	K_S	0.02 kg m^{-3}
csm para los heterótrofos desnitrificantes	K_{NO_3}	$5.00 \times 10^{-4} \text{ kg m}^{-3}$

Cuadro 7.1: Parámetros empleados para la simulación de sedimentación reactiva.

Aquí, $v_{\text{hs}}(X)$ es la función de velocidad de sedimentación obstaculizada, σ_e el esfuerzo efectivo del sólido, ρ_s es la densidad del sólido, $\Delta\rho$ la diferencia de densidad entre el sólido y líquido, y X_c es una concentración crítica por sobre la cual las partículas se juntan unas con otras formando una malla que puede soportar cierto esfuerzo.

Para este trabajo elegimos (Diehl, 2015; Torfs et al., 2015b)

$$v_{\text{hs}}(X) = \frac{v_0}{1 + (X/\bar{X})^q}, \quad (7.9)$$

donde los parámetros v_0 , \bar{X} y q toman los valores dados en la Tabla 7.1 (Torfs et al., 2015b), y

$$\sigma_e(X) = \begin{cases} 0 & \text{si } X < X_c, \\ \alpha(X - X_c) & \text{si } X > X_c, \end{cases} \quad (7.10)$$

para los valores de α y de concentración crítica X_c indicados en la Tabla 7.1.

7.3. Método Numérico

7.3.1. Discretización espacial

Definimos la función de densidad de flujo batch $f_b(X) := X v_{\text{hs}}(X)$, junto con

$$d_{\text{comp}}(X) := v_{\text{hs}}(X) \frac{\rho_s \sigma_e'(X)}{g \Delta\rho} \quad (7.11)$$

y la primitiva

$$D(X) := \int_{X_c}^X d_{\text{comp}}(s) \, ds. \quad (7.12)$$

Para la simulación numérica, note que la suma de la ecuación (7.1) y (7.2) da la siguiente ecuación, que aparte de los términos de reacción sólo contiene derivadas de la concentración total X :

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial z} \left(f_b(X) - \frac{\partial D(X)}{\partial z} \right) \\ & + (\mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) - (1 - f_P)b)X_{\text{OHO}}, \quad 0 < z < B, \quad t > 0. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Una característica especial de la ecuación (7.13) es que como consecuencia de (7.10), (7.11) y (7.12), esta EDP es de segundo orden parabólica para valores en que la solución X excede X_c y es de primer orden hiperbólica para valores de concentración más bajos. Por lo tanto, la EDP (7.13) es llamada parabólica fuertemente degenerada o parabólica-hiperbólica, donde no se conoce de antemano la ubicación de la interfaz de cambio. Además, debido a la no-linealidad y naturaleza degenerada, aparecen discontinuidades en la solución, por lo cual tienen que ser usadas técnicas especiales para la solución numérica (que se incorporan en el método numérico se describe en esta sección).

Note que el flujo total dentro del paréntesis en el lado derecho de (7.13) es

$$v(X, X_z)X = f_b(X) - \frac{\partial D(X)}{\partial z}. \quad (7.14)$$

Esto significa que para (7.13) podemos utilizar ingredientes del método numérico presentado por Bürger et al. (2013b) con el término adicional de reacción. Para actualizar los valores numéricos de las dos porciones X_{OHO} y X_U de X , utilizamos la idea propuesta por Diehl (1997a) y Jeppsson & Diehl (1996b). Con este fin, introducimos el porcentaje $p := X_{\text{OHO}}/X$ cuando $X > 0$, con lo cual $X_{\text{OHO}} = pX$ y $X_U = (1 - p)X$. Reescribimos la ecuación (7.1) utilizando la nueva variable introducida

$$\frac{\partial(pX)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} (v(X, X_z)pX) + (\mu(S_{\text{NO}_3}, S_S) - b)pX, \quad 0 < z < B, \quad t > 0. \quad (7.15)$$

La idea del método numérico es la siguiente. En cada paso de tiempo discreto, X es la primera en ser actualizada vía una versión discretizada de (7.13), asumiendo X_{OHO} conocida. Esto significa que el flujo (7.14) es conocido durante este paso de tiempo. Luego el flujo de (7.15) es p veces el flujo conocido de (7.14), por lo tanto es sólo la variable p la que necesita ser actualizada, lo cual se puede obtener mediante una versión discreta de (7.15). Entonces la concentración del segundo componente particulado (meteria inerte) es simplemente $X_U = (1 - p)X$. Las actualizaciones numéricas de S_{NO_3} , S_S y S_{N_2} son entonces sencillas para las correspondientes ecuaciones (7.3)–(7.5).

Introducimos la discretización espacial mediante la división del intervalo $(0, B)$ en N celdas con tamaño $\Delta z := B/N$. Sean $X_j = X_j(t)$, $S_{\text{NO}_3,j} = S_{\text{NO}_3,j}(t)$, etc. las concentraciones aproximadas en la j -ésima celda e igualmente $P_j = P_j(t)$ la aproximación de p . El

flujo numérico entre las celdas j y $j + 1$ son definidos como sigue. El flujo convectivo f_b es discretizado por el flujo numérico de Godunov, es decir,

$$G_{j+1/2} := \begin{cases} \min_{X_j \leq X \leq X_{j+1}} f_b(X), & \text{si } X_j \leq X_{j+1}, \\ \max_{X_j \geq X \geq X_{j+1}} f_b(X), & \text{si } X_j > X_{j+1}. \end{cases}$$

Si el flujo numérico compresivo es definido como

$$J_{j+1/2} := \frac{D(X_{j+1}) - D(X_j)}{\Delta z},$$

entonces el flujo total (7.14) entre las celdas j y $j + 1$ es aproximado por $F_{j+1/2} := G_{j+1/2} - J_{j+1/2}$. El correspondiente flujo de (7.15) es $P_{j+1/2}(G_{j+1/2} - J_{j+1/2})$, donde $P_{j+1/2}$ necesita ser definido. Usamos la idea de Diehl (1997a), que es la siguiente. Si el flujo total $F_{j+1/2}$ es positivo, esto significa que las partículas se mueven en dirección del eje z sobre la frontera desde la celda j a la $j + 1$. En consecuencia, el valor de $P_{j+1/2}$ en la frontera entre las celdas es el que está en la celda izquierda, es decir P_j . Si $F_{j+1/2} \leq 0$, entonces el valor es P_{j+1} , es decir

$$P_{j+1/2} = \begin{cases} P_{j+1}, & \text{si } F_{j+1/2} \leq 0, \\ P_j, & \text{si } F_{j+1/2} > 0. \end{cases} \quad (7.16)$$

Definiendo las condiciones de frontera nulas para los flujos y porcentajes $G_{1/2} = G_{N+1/2} = J_{1/2} = J_{N+1/2} = P_{1/2} = P_{N+1/2} = 0$, obtenemos el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias semi-discreto para cada $j = 1, \dots, N$:

$$\frac{dX_j}{dt} = -\frac{F_{j+1/2} - F_{j-1/2}}{\Delta z} + (\mu(S_{\text{NO}_3,j}, S_{\text{S},j}) - (1 - f_P)b)X_{\text{OHO},j}, \quad (7.17)$$

$$\frac{d(P_j X_j)}{dt} = -\frac{P_{j+1/2}F_{j+1/2} - P_{j-1/2}F_{j-1/2}}{\Delta z} + (\mu(S_{\text{NO}_3,j}, S_{\text{S},j}) - b)X_{\text{OHO},j}, \quad (7.18)$$

$$\frac{dS_{\text{NO}_3,j}}{dt} = d_S \frac{S_{\text{NO}_3,j+1} - 2S_{\text{NO}_3,j} + S_{\text{NO}_3,j-1}}{\Delta z^2} - \frac{1 - Y}{2.86Y} \mu(S_{\text{NO}_3,j}, S_{\text{S},j})X_{\text{OHO},j},$$

$$\frac{dS_{\text{S},j}}{dt} = d_S \frac{S_{\text{S},j+1} - 2S_{\text{S},j} + S_{\text{S},j-1}}{\Delta z^2} - \left(\frac{\mu(S_{\text{NO}_3,j}, S_{\text{S},j})}{Y} - (1 - f_P)b \right) X_{\text{OHO},j},$$

$$\frac{dS_{\text{N}_2,j}}{dt} = d_S \frac{S_{\text{N}_2,j+1} - 2S_{\text{N}_2,j} + S_{\text{N}_2,j-1}}{\Delta z^2} + \frac{1 - Y}{2.86Y} \mu(S_{\text{NO}_3,j}, S_{\text{S},j})X_{\text{OHO},j}, \quad (7.19)$$

$$X_{\text{OHO},j} = P_j X_j,$$

$$X_{\text{U},j} = (1 - P_j)X_j.$$

Estas ecuaciones son por lo tanto leyes de conservación exactas para cada una de las N celdas. Note que $X_{\text{U},j}$ puede ser definido después de que la simulación haya completado.

7.3.2. Esquema discreto totalmente explícito

Sea t_n , $n = 0, 1, \dots$ los puntos del tiempo discreto y Δt el paso de tiempo que debe satisfacer una cierta condición CFL dependiendo de la elección del método de integración

para la derivada temporal. Sea $\lambda := \Delta t / \Delta z$. Para esquemas explícitos, el lado derecho cada una de las ecuaciones son evaluados en el tiempo t_n . El valor de una variable en el tiempo t_n es denotado por un super índice, por ejemplo, P_j^n . La principal restricción del paso de tiempo (para valores pequeños de Δz) se debe a las derivadas de segundo orden espacial en el término de compresión (Bürger et al., 2005, 2012). La condición CFL para el método de Euler explícito y sedimentación batch es

$$\Delta t \leq \frac{1}{\max\{k_1, k_2\}}, \quad (7.20)$$

con

$$k_1 := \frac{\max_{0 \leq X \leq X_{\max}} |f'_b(X)|}{\Delta z} + \frac{2 \max_{0 \leq X \leq X_{\max}} d_{\text{comp}}(X)}{\Delta z^2} + \max\{\mu_{\max} - (1 - f_P)b, (1 - f_P)b\},$$

$$k_2 := \frac{2d_S}{\Delta z^2} + \frac{\mu_{\max} X_{\max}}{Y} \max\left\{\frac{(1 - Y)}{2.86 K_{\text{NO}_3}}, \frac{1}{K_S}\right\},$$

y donde X_{\max} es la concentración máxima.

Para el método de Euler explícito, las derivadas temporales en el lado izquierdo de (7.17)–(7.19) son aproximadas por la razón de diferencias finitas estandar y el lado derecho es evaluado en el tiempo t_n . Primero, la ecuación (7.17) da la actualización X_j^{n+1} acorde a

$$X_j^{n+1} = X_j^n + \Delta t \left(-\frac{F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n}{\Delta z} + (\mu(S_{\text{NO}_3,j}^n, S_{\text{S},j}^n) - (1 - f_P)b) X_{\text{OHO},j}^n \right). \quad (7.21)$$

Las ecuaciones para los substratos se pueden escribir de la misma forma. Para la ecuación (7.18), la aproximación de las derivadas temporales es

$$\frac{d(P_j X_j)}{dt_n} \approx \frac{P_j^{n+1} X_j^{n+1} - P_j^n X_j^n}{\Delta t}.$$

Note que si $X_j^{n+1} = 0$, entonces no hay partículas en la celda j , por lo tanto el valor de P_j^{n+1} es irrelevante, pues $P_j^{n+1} X_j^{n+1} = 0$. Tenemos la siguiente fórmula de actualización para P_j^{n+1} :

$$P_j^{n+1} = \begin{cases} P_j^n, & \text{if } X_j^{n+1} = 0, \\ \frac{1}{X_j^{n+1}} \left[P_j^n X_j^n + \Delta t \left(-\frac{P_{j+1/2}^n F_{j+1/2}^n - P_{j-1/2}^n F_{j-1/2}^n}{\Delta z} + (\mu(S_{\text{NO}_3,j}^n, S_{\text{S},j}^n) - b) X_{\text{OHO},j}^n \right) \right], & \text{if } X_j^{n+1} > 0. \end{cases}$$

7.3.3. Método de líneas

Con el fin de aplicar algún solver de EDO para la discretización temporal, la ecuación semi-discreta (7.18) debera ser reescrita con la variable $X_{\text{OHO},j} = P_j X_j$. Recalcamos que

el flujo total F_j depende sólo de X_j , mientras que la fórmula (7.16) debe ser reemplazada por

$$P_{j+1/2} = \begin{cases} X_{\text{OHO},j+1}/X_{j+1}, & \text{si } F_{j+1/2} \leq 0, \\ X_{\text{OHO},j}/X_j, & \text{si } F_{j+1/2} > 0. \end{cases}$$

La materia inerte puede ser definida por $X_{\text{U},j} = X_j - X_{\text{OHO},j}$.

El análisis detrás de la CFL condición (7.20) no se presenta aquí, pero la idea subyacente es que esta condición debe implicar que el lado derecho de la fórmula de actualización para cada variable es una función monótona de las mismas variables en todas las celdas en el punto de tiempo anterior. Por ejemplo, la condición CFL (7.20) implica que el lado derecho de (7.21) es una función monótona de los argumentos X_{j-1}^n , X_j^n y X_{j+1}^n para cualquier valor de las concentraciones de sustrato que aparecen en la fórmula. Un análisis más completo se puede encontrar en (Bürger et al., 2016).

7.4. Simulaciones

Para todos los test empleamos la función de sedimentación obstaculizada v_{hs} y la función de esfuerzo efectiva σ_e dada por (7.9) y (7.10), respectivamente. La tasa de crecimiento heterotrófico específica máxima μ que usamos es dada en (7.7), y todos los demás parámetros son indicados en la Tabla 7.1 (a menos que se indique lo contrario). Para el KT simulamos tres diferentes escenarios eligiendo distintos valores para el coeficiente de difusión d_s (Ejemplos 1 a 3), mientras que los dos escenarios considerados para el DT (Ejemplos 4 y 5) y OT (Ejemplos 6 y 7) difieren en la concentración inicial de X .

En todos los ejemplos numéricos, empleamos el esquema explícito con $N = 100$ celdas para una columna de altura $B = 1$ m. Para representar adecuadamente la dinámica de reacción que presentamos simulaciones hasta $t = T = 2$ h, excepto para una de las simulaciones del KT, en la cual se considera hasta $T = 100$ h. El paso temporal Δt es elegido por 98 % de la cota dada en el lado derecho de (7.20), con constantes k_1 y k_2 definidas en la sección anterior. Los valores iniciales comunes en todos los ejemplos son

$$S_S^0 = 9.00 \times 10^{-4} \text{ kg m}^{-3} \quad \text{y} \quad S_{\text{NO}_3}^0 = 6.00 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3},$$

recalcando que por (7.6), el valor inicial de S_{N_2} es cero.

7.5. Ejemplos 1 a 3: Kynch test

En los Ejemplos 1–3, simulamos la sedimentación de una suspensión inicial homogénea de densidad inicial $X_0 = 3.5 \text{ kg m}^{-3}$, que se divide en biomasa activa y materia inerte por la proporción $p_0 = 5/7 \approx 0.7143$, esto es

$$X_{\text{OHO}}(z, 0) = 2.5 \text{ kg m}^{-3}, \quad X_{\text{U}}(z, 0) = 1.0 \text{ kg m}^{-3} \quad \text{for } 0 < z < B.$$

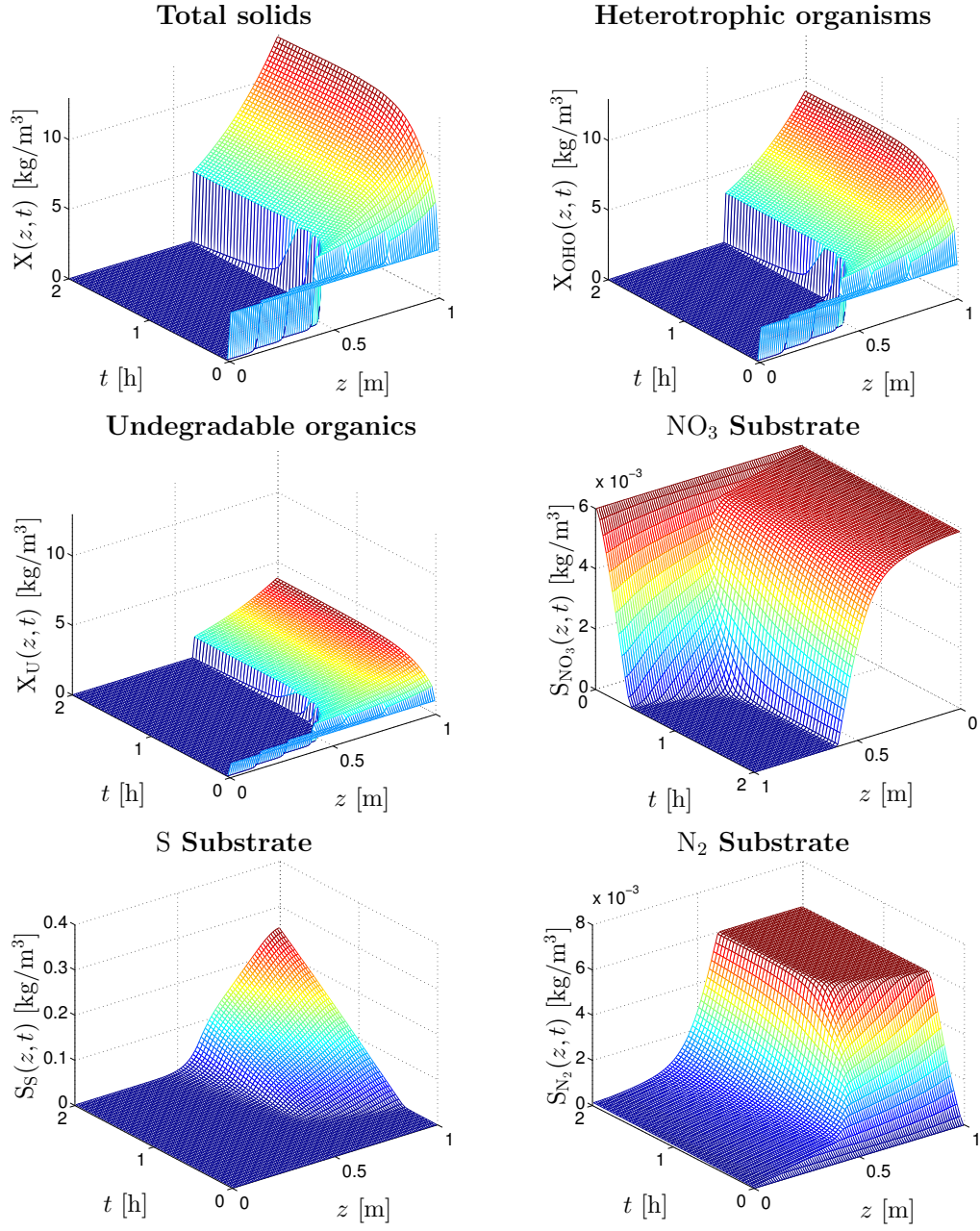


Figura 7.1: Ejemplo 1 (test de Kynch, $d_S = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$). Aquí y en las Figuras 7.2 a 7.6, la cuadrícula visual usada para mostrar la solución numérica es más gruesa que la cuadrícula computacional, y las gráficas de las soluciones se han girado para cada cantidad tal que casi todas las partes sean visibles.

Empleamos esta configuración inicial para evaluar la influencia del coeficiente de difusión sustrato d_S . El Ejemplo 1 ha sido obtenido empleando el valor por defecto $d_S = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ informado en la Tabla 7.1. La Figura 7.1 y 7.2 muestran los resultados numéricos para todas las incógnitas hasta $T = 2 \text{ h}$ y $T = 100 \text{ h}$, respectivamente. Se observa que el sólido sedimenta hacia abajo rápidamente y forma un manto de lodo con una interfaz

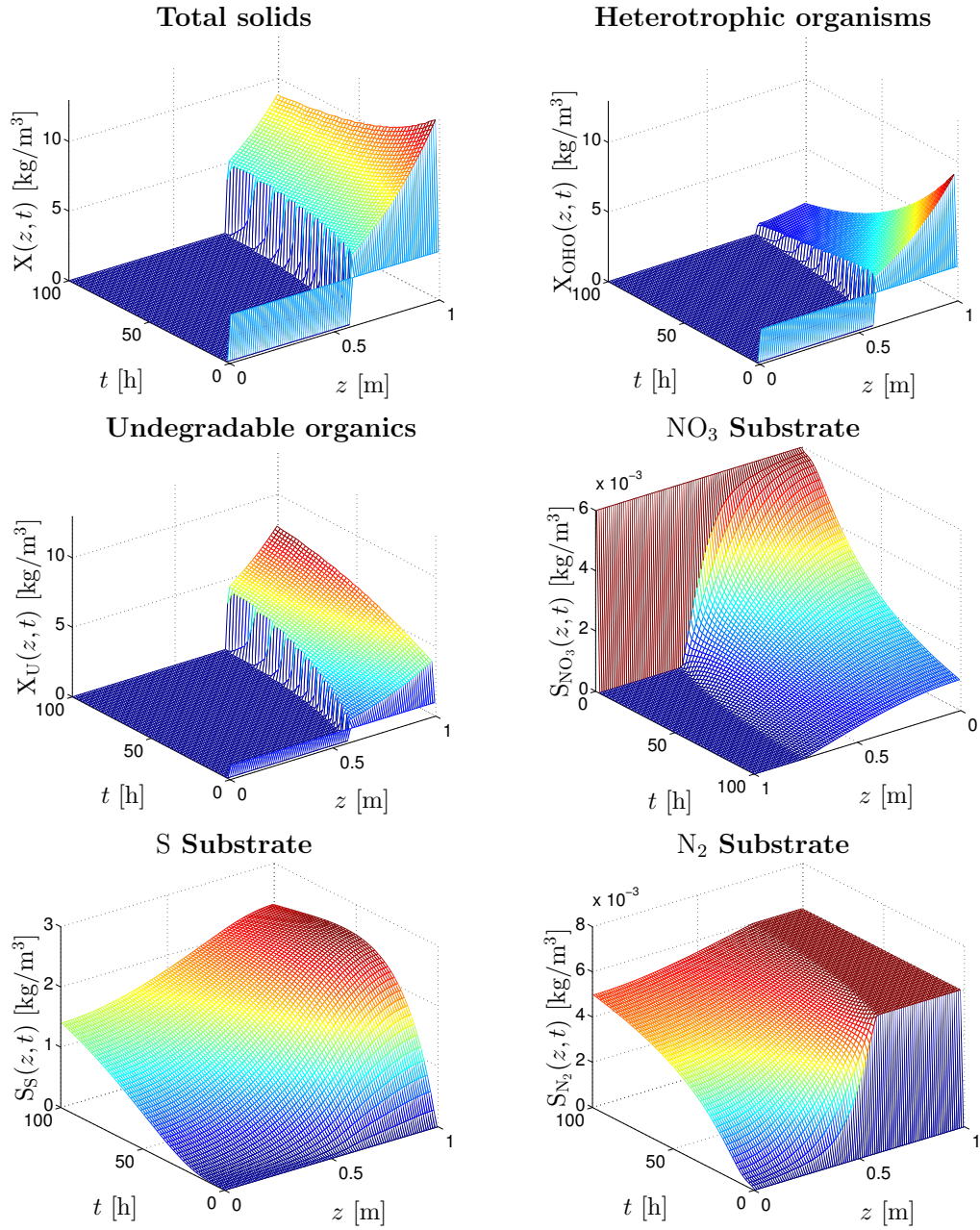


Figura 7.2: Ejemplo 1 (test de Kynch, $d_s = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$): largo tiempo de simulación ($T = 100 \text{ h}$).

aguda en $X_c = 5 \text{ kg m}^{-3}$. Además, la concentración incrementa hacia abajo gradualmente hasta alcanzar aproximadamente 20 kg m^{-3} en el fondo. Aquí, y en los Ejemplos 2 a 7, las soluciones para todas las cantidades son acotadas y no negativas. La gráfica de S_{NO_3} indica un rápida degradación del nitrato dentro del manto de lodo, mientras que la misma cantidad se descompone muy lentamente flotando en el líquido claro. Observamos la formación de sustrato fácilmente biodegradable (de concentración S_S) en el fondo de la columna. Además, la solución de S_{N_2} posee una meseta en $6 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$, que corresponde al valor inicial de S_{NO_3} . Esto sugiere que dentro del manto de lodo, casi todo el nitrato en nitrógeno soluble se degrada.

Para este caso particular también presentamos una simulación hasta $T = 100$ h para estudiar el comportamiento del modelo para un largo valor de tiempo. Los resultados se ven en la Figura 7.2, la cual muestra que la concentración de sólido total alcanza un máximo de alrededor de 20 kg m^{-3} en la parte inferior, pero que este máximo, así como la masa total de sólidos, decrece en el tiempo. Además, la proporción de materia inerte incrementa en el tiempo (como se esperaba). Los sustratos se aproximan lentamente a una concentración de equilibrio como consecuencia de su lento movimiento difusivo.

Las Figuras 7.3 y 7.4 muestran el correspondiente resultado para el mismo escenario pero con un aumento de los valores del parámetro de difusión del sustrato, es decir, $d_S = 9 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (Figura 7.3) y $d_S = 1.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (Figura 7.4). Observamos que la elección de este parámetro prácticamente no afecta el comportamiento de la sedimentación de los sólidos; las soluciones para X , X_a y X_i son virtualmente las mismas que en el Ejemplo 1. No obstante, se aprecian diferencias en el comportamiento de la solución de los sustratos, especialmente para S_{NO_3} . En términos generales, el aumento de d_S significa incrementar el flujo difusivo de cada sustrato, es decir, la velocidad de flujo de las regiones de alta concentración a las de baja concentración, observamos que el flujo de nitrato en la zona de lodo incrementa consistentemente comparando los resultados de los Ejemplos 1, 2, y 3. Dado que la degradación de nitrato se lleva a cabo debido a las reacciones en esa zona, obtenemos que para esta prueba, aumentando d_S produce una desnitrificación más rápida en general. Además, las correspondientes diferencias en el comportamiento de la solución son visibles con los otros dos sustratos.

7.6. Ejemplos 4 y 5: Diehl test (sedimentación batch de una suspensión inicial situado por encima de líquido transparente)

Aquí elegimos la siguiente distribución inicial de sólidos:

$$X(z, 0) = \begin{cases} 7 \text{ kg m}^{-3} & \text{for } 0 \text{ m} < z \leq 0.5 \text{ m}, \\ 0 & \text{for } 0.5 \text{ m} < z \leq 1 \text{ m} \end{cases}$$

para el Ejemplo 4, y

$$X(z, 0) = \begin{cases} 14 \text{ kg m}^{-3} & \text{for } 0 \text{ m} < z \leq 0.25 \text{ m}, \\ 0 & \text{for } 0.25 \text{ m} < z \leq 1 \text{ m} \end{cases}$$

para el Ejemplo 5. Todos los otros parámetros son elegidos como en el Ejemplo 1. Puesto que la masa inicial de sólidos totales es la misma que en los Ejemplos 1 a 3, los resultados se pueden comparar. Las soluciones numéricas se muestran en las Figuras 7.5 y 7.6. Observamos en ambos ejemplos que el cuerpo de lodo inicial, forma una llamada onda de rarefacción, los sólidos sedimentan hacia abajo, y se acumulan en la parte inferior para formar una capa de lodo. Bajo opciones adecuadas de parámetros y concentraciones iniciales, el comportamiento de la solución de un test de Diehl produce una trayectoria curvada

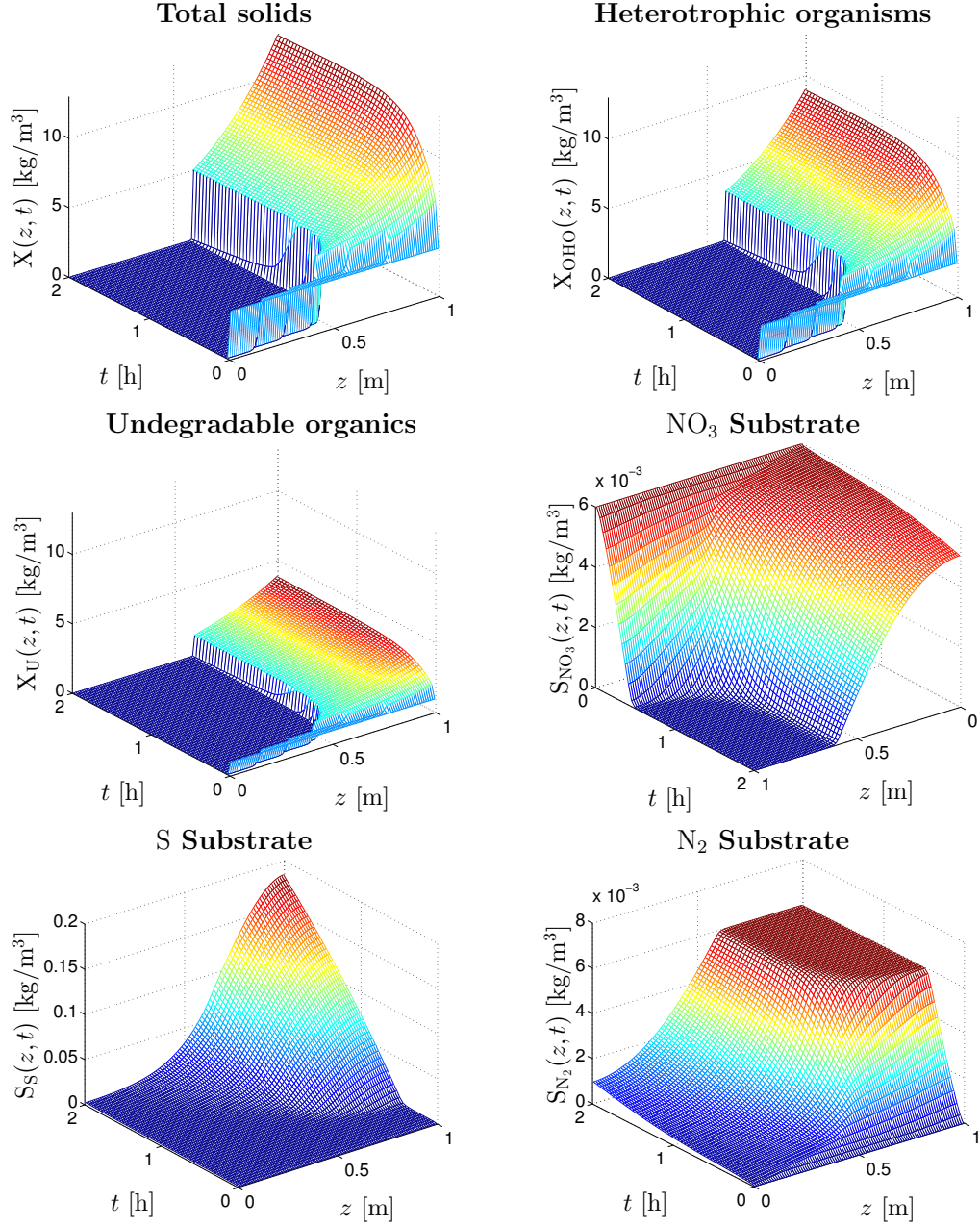


Figura 7.3: Ejemplo 2 (test de Kynch, $d_S = 9 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$).

de la interfaz de la suspensión flotante, que no surge con un test de Kynch. y que puede ser convertida en ciertas porciones de la función f_b . Si bien esto nos ha llevado a proponer un test de Diehl como un dispositivo para la identificación de la función f_b (Diehl, 2007; Bürger & Diehl, 2013b; Betancourt et al., 2014), usamos esta configuración con el fin de evaluar los efectos de la configuración inicial en el proceso de desnitrificación. Vemos que la solución para S_{NO_3} no es monótona (como función de z para t fijo), que también se refleja en la solución para S_{N_2} , y comparando la gráfica de S_{NO_3} en la Figura 7.6 con la de la Figure 7.1 vemos que la cantidad total de nitratos en $T = 2 \text{ h}$ es significativamente

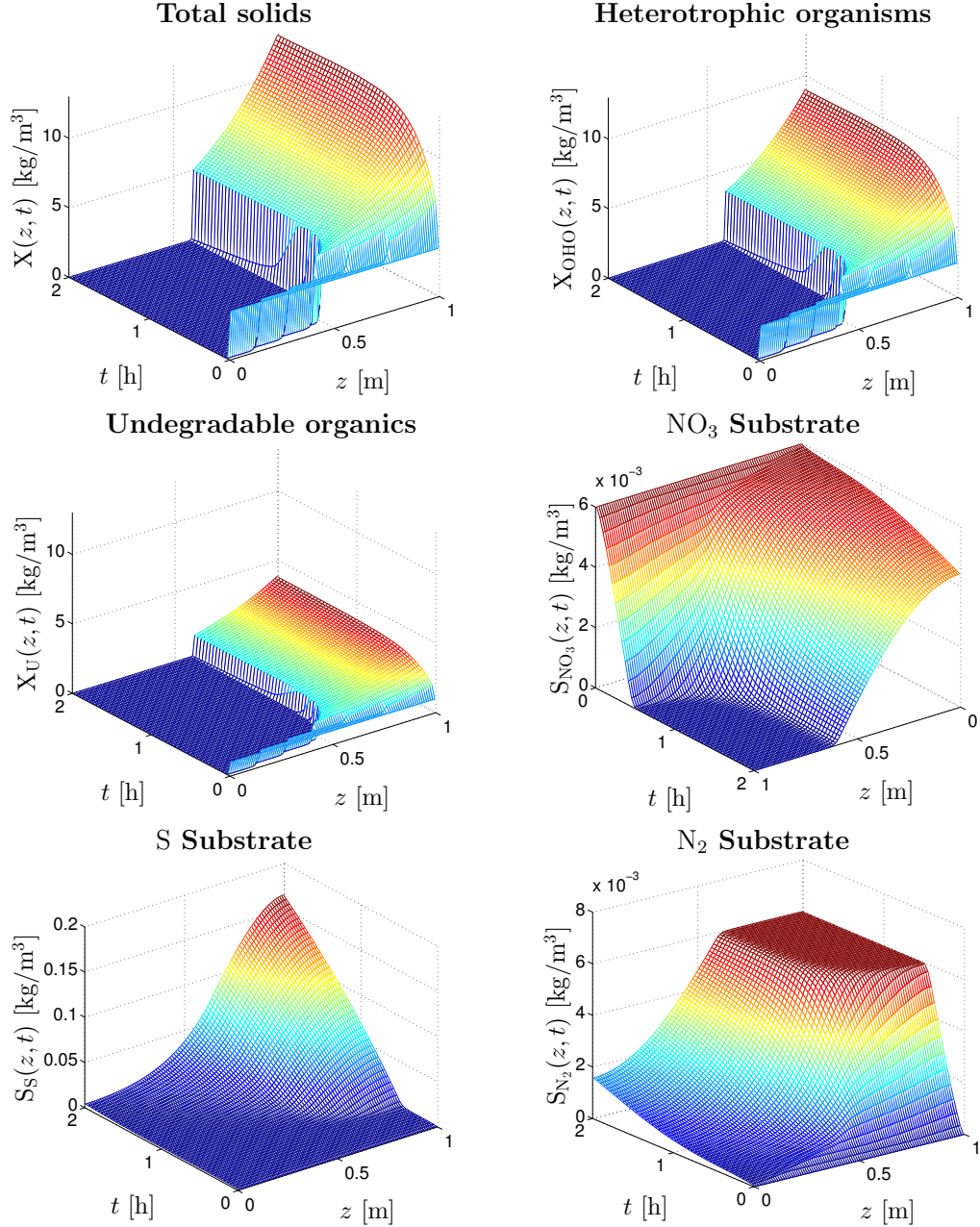


Figura 7.4: Ejemplo 3 (test de Kynch, $d_s = 1.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$).

más pequeña en los Ejemplos 4 y 5 que en el Ejemplo 1.

A la luz de esta última observación medimos la masa de nitrato total normalizada en función del tiempo, el llamado inventario normalizado, definido por

$$I_{\text{NO}_3}(t) := \frac{1}{S_{\text{NO}_3}^0 B} \int_0^B S_{\text{NO}_3}(z, t) dz.$$

Para una discretización dada $\Delta = (\Delta z, \Delta t)$ y $t = n\Delta t$ estas cantidades son aproximadas

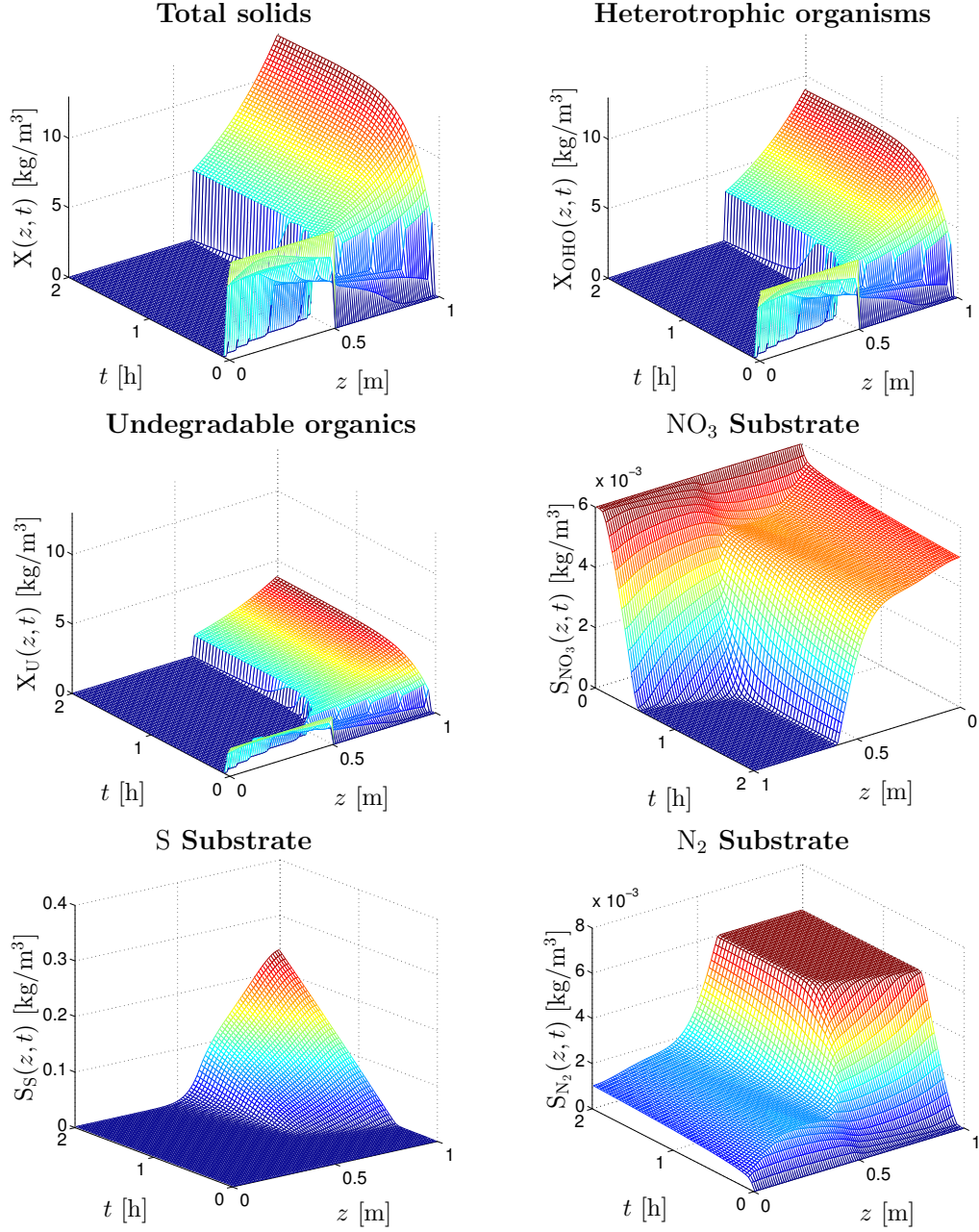


Figura 7.5: Ejemplo 4 (test de Diehl, $X(z, 0) = 7 \text{ kg m}^{-3}$ sobre $z = 0.5 \text{ m}$).

por

$$I_{\text{NO}_3}^\Delta(t) := \frac{1}{S_{\text{NO}_3}^0 B} \sum_{j=1}^N S_{\text{NO}_3,j}^n \Delta z = \frac{1}{S_{\text{NO}_3}^0 N} \sum_{j=1}^N S_{\text{NO}_3,j}^n.$$

Note que $I_{\text{NO}_3}(0) = I_{\text{NO}_3}^\Delta(0) = 1$. La Figura 7.7 muestra la evolución de $I_{\text{NO}_3}^\Delta(t)$ para los Ejemplos 1 al 5. Comparando las curvas de los Ejemplos 1, 2 y 3, confirmamos que un incremento en el valor del coeficiente de difusión del sustrato d_S acelera el proceso de desnitrificación en el test de Kynch. No obstante, d_S es un parámetro del modelo que

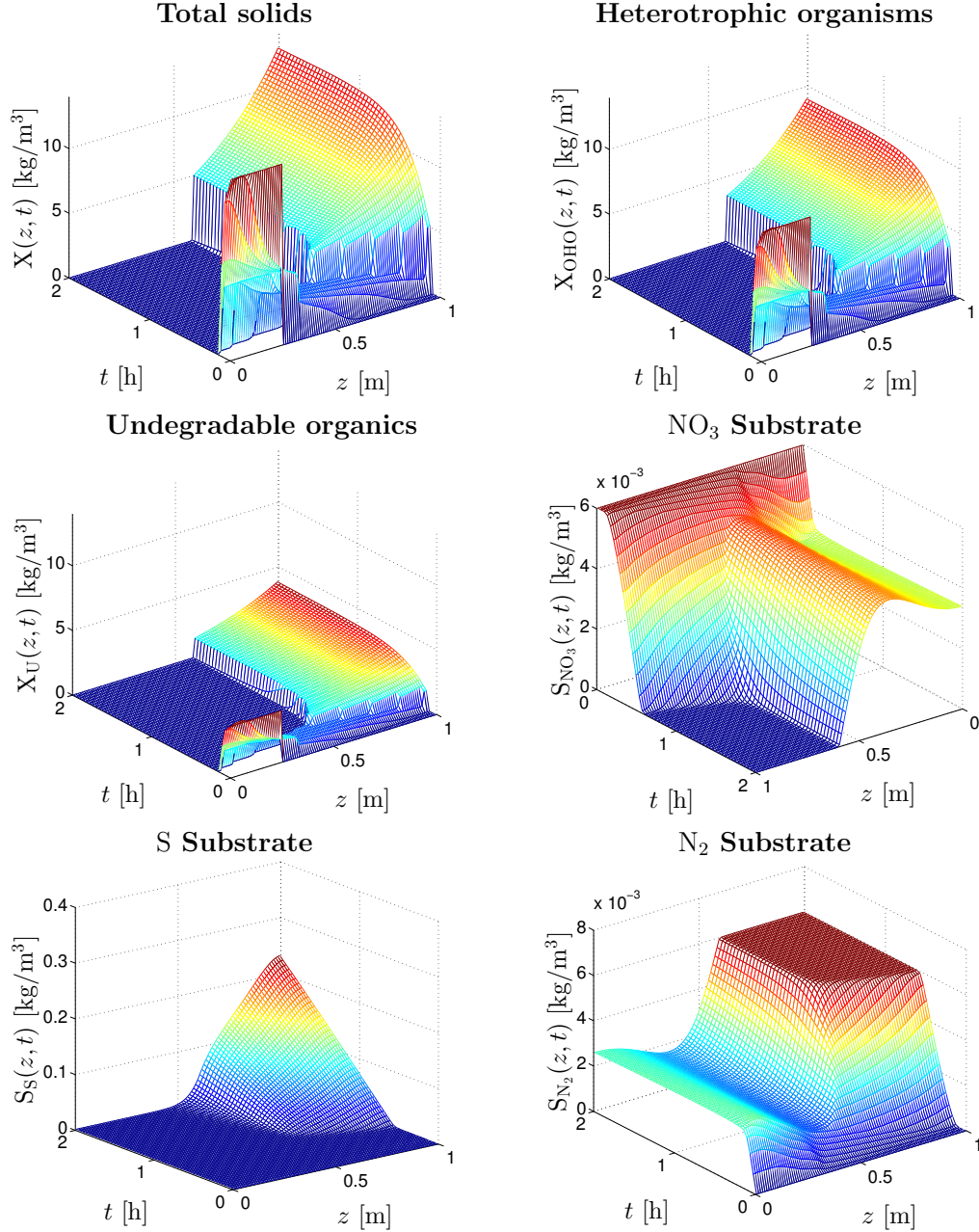


Figura 7.6: Ejemplo 5 (test de Diehl, $X(z, 0) = 14 \text{ kg m}^{-3}$ sobre $z = 0.25 \text{ m}$).

no es posible controlar, por lo que es de interés más práctico comparar los resultados del Ejemplo 1 (KT) con los de los Ejemplos 4 y 5 (DT) (calculados con el mismo valor de d_S). Aquí se observa que la velocidad inicial de desnitrificación es bastante rápida y la misma en estos tres ejemplos, pero se mantiene durante un período de tiempo más largo en el caso del DT, con el efecto que las porciones de la curva correspondiente a bajas tasas de desnitrificación (producido en la etapa de consolidación) están espaciados en aproximadamente 10 % y 15 %, en los respectivos casos del DT Ejemplos 4 y 5, por debajo del Ejemplo 1 correspondiente al KT. Este resultado ilustra como la concentración

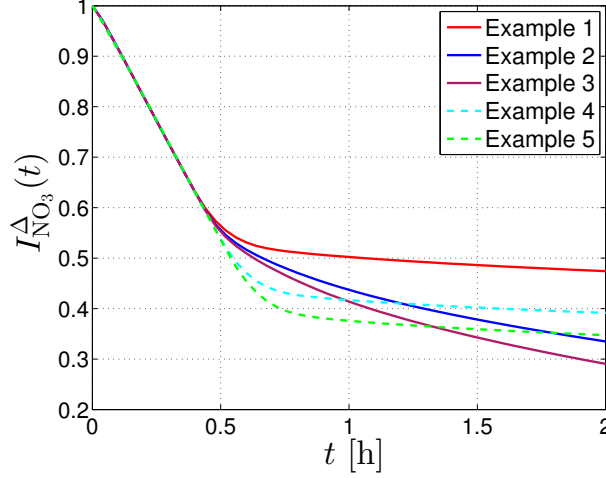


Figura 7.7: Ejemplo 1 a 5: evolución de la aproximación del inventario de nitrato aproximado $I_{\text{NO}_3}^{\Delta}(t)$. Ejemplos 1–3 muestra los resultados de los tres KT incrementando el coeficiente de difusión d_s , mientras que los Ejemplos 4–5 muestran los resultados de los dos DT con el mismo valor de d_s con en Ej. 1.

inicial de la masa de sólidos puede influir en la tasa de desnitrificación.

7.7. Ejemplos 6 y 7: test de lodo sobrecompresido (expansión de lodo comprimido)

Utilizamos los mismos parámetros que en el Ejemplo 1 y para la concentración inicial consideramos un cuerpo altamente comprimido de lodos cerca de la parte inferior de la columna. Específicamente, elegimos

$$X(z, 0) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \text{ m} < z \leq 0.7 \text{ m}, \\ 20 \text{ kg m}^{-3} & \text{for } 0.7 \text{ m} < z \leq 1 \text{ m} \end{cases}$$

para el Ejemplo 6 y

$$X_{\text{OHO}}(z, 0) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \text{ m} < z \leq 0.9 \text{ m}, \\ 25 \text{ kg m}^{-3} & \text{for } 0.9 \text{ m} < z \leq 1 \text{ m} \end{cases}$$

para el Ejemplo 7. Los respectivos resultados numéricos se muestran en las Figuras 7.8 y 7.9. En ambos casos la capa de lodo comprimido se expande una vez que el sistema comienza a evolucionar. Estas simulaciones alertan las limitaciones de modelar la compresibilidad de sedimentos por un término difusivo no lineal $\partial^2 D(\phi)/\partial z^2$. Esta aproximación corresponde al comportamiento elástico de un material reversible que por lo general no se observa con lodo activado en la realidad. Si bien este comportamiento en una situación anómala pide una mejora de los supuestos constitutivos relativos a la compresibilidad de

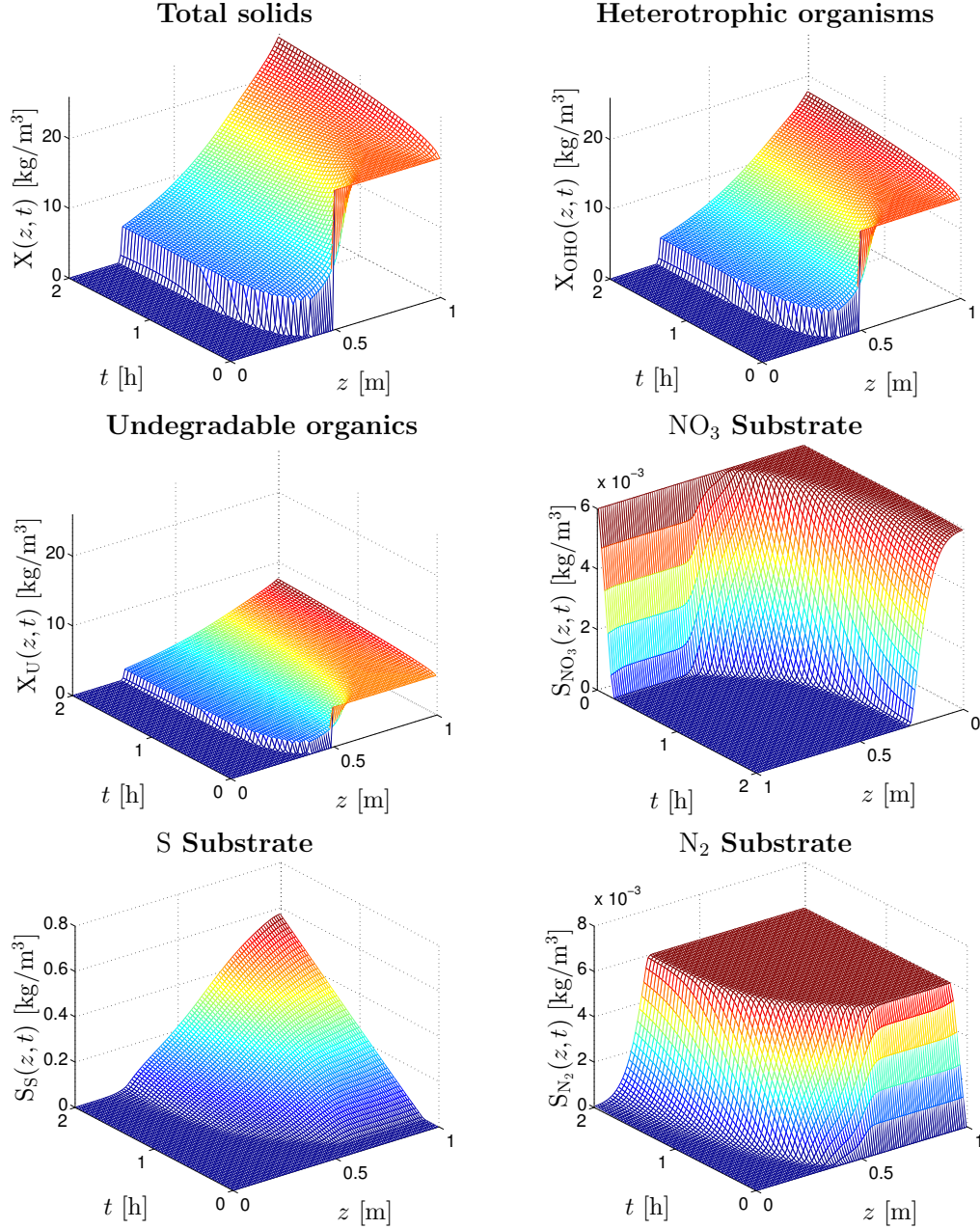


Figura 7.8: Ejemplo 6 (test sobrecomprimido, $X(z, 0) = 20 \text{ kg m}^{-3}$ por debajo de $z = 0.7 \text{ m}$)

sedimentos, hacemos hincapié en que esta prueba produce un movimiento ascendente de partículas sólidas que se asocia con valores negativos de la velocidad v definida en (7.8). La discriminación en el caso de (7.16), que se remonta al método dado por Diehl (1997a), que precisamente ha sido ideado para manejar esta situación. Así, las Figuras 7.8 y 7.9 demuestran que el modelo es estable, y que el esquema numérico funciona correctamente incluso para velocidades de sedimentación con signo variable.

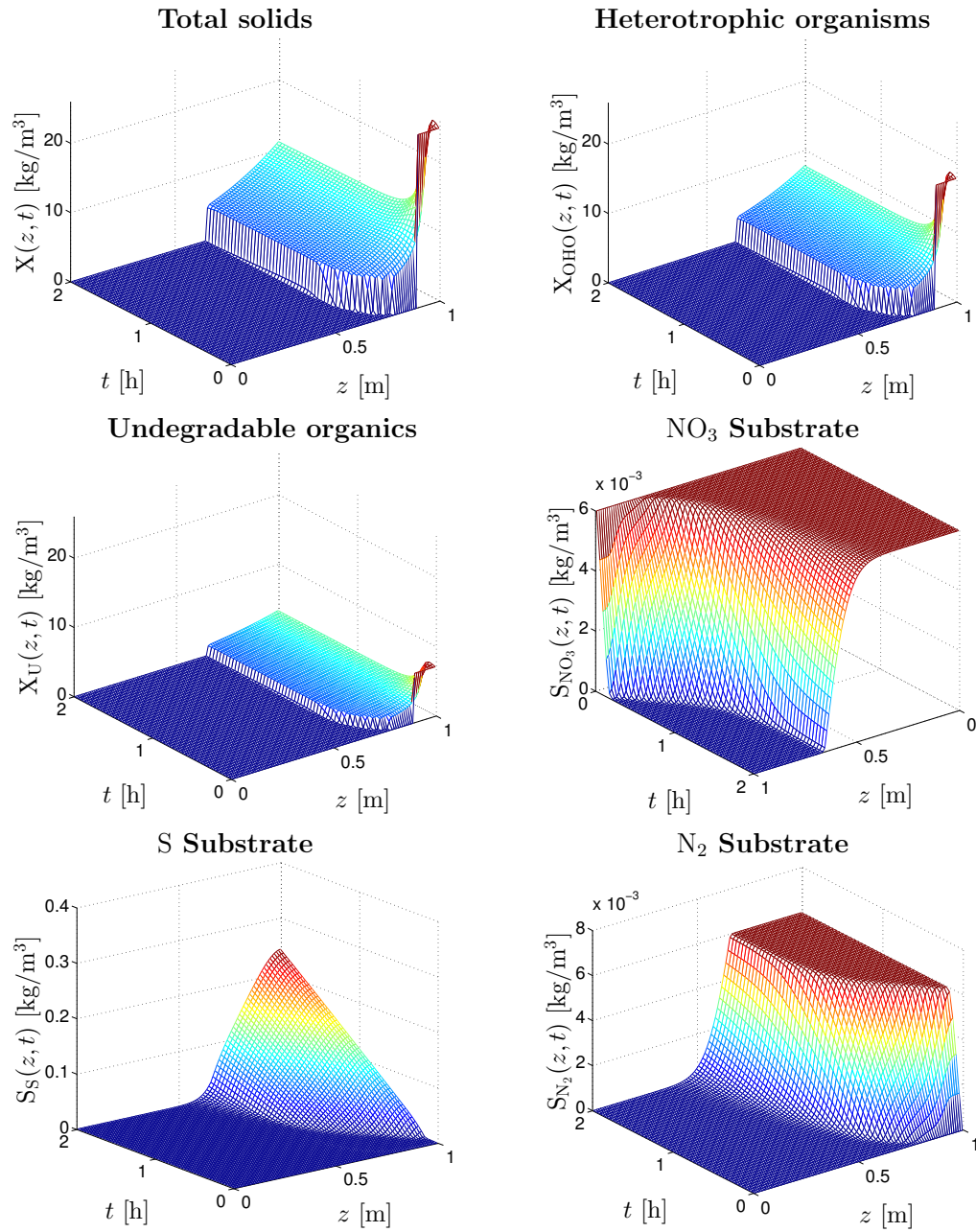


Figura 7.9: Ejemplo 7 (test sobrecomprimido, $X(z, 0) = 25 \text{ kg m}^{-3}$ por debajo de $z = 0.9 \text{ m}$)

Capítulo 8

Conclusiones y trabajo futuro

8.1. Conclusión

Referente al trabajo realizado sobre sedimentación continua no reactiva para plantas con área de sección trasnversal variable se concluye que el modelo de Bürger-Diehl y la respectiva resolución numérica puede ser extendido al caso de tanques con sección transversal variable, para el cual una extensión natural al modelo y resolución numérica es la presentada en el Método 1. Además al realizar el cambio de variables dado por el Método 2 es posible obtener un segundo método (Método 2), el cual también es posible de aproximar mediante el método de líneas pero en la variable espacial transformada. Dada la restrictiva condición CFL del Método 1, con este método las simulaciones suelen ser en general más lentas que las obtenidas por el Método 2. No obstante las aproximaciones dadas por el Método 2 tienden a producir un mayor error que el dado por la aproximación del Método 1, esto es debido a que el cambio de variables produce una malla no equiespaciada, la cual depende de la geometría del sedimentador. Es posible encontrar una condición CFL para el Método 1 menos restrictiva considerando geometrías específicas para el tanque o bien realizando un cálculo computacional adicional, lo cual es incluso menos costoso computacionalmente que la adición de un cambio de variables como se propone en el Método 2. Las diferencias en la geometría del sedimentador influye considerablemente en la solución obtenida en ambos métodos, además ambos métodos se pueden aplicar al caso en que la seccion transversal es discontinua, como se muestra en la simulación 6 (ver Capítulo 5). El Método 1 es levemente más eficiente que el método 2 en cuatro de las seis geometrías consideradas, en las dos restantes no es del todo claro una eficiencia mayor del Método 2.

Para el caso de la sedimentación reactiva, un modelo reducido de reacciones biológicas simultáneas y sedimentación de partículas floculadas de tipo batch ha sido escrito como un sistema de PDEs de convección-difusión-reacción, y un esquema numérico para su simulación numérica se ha sugerido. La idea de introducir un vector de porcentaje para la composición de las partículas floculadas (Diehl, 1997a) se puede utilizar de una manera natural también cuando los efectos de la compresión y las reacciones se incluyen en las ecuaciones. En el modelo reducido aquí, con sólo dos componentes particulados, este vector

es simplemente $(p, 1 - p)^T$. La ventaja de este enfoque es que, puesto que el vector aparece linealmente en cada término de las ecuaciones para las concentraciones de las partículas, la suma de las ecuaciones para los dos tipos de partículas consideradas entrega una ecuación de la concentración de sólidos totales en suspensión X excepto por un término de reacción. Esta ecuación es la ecuación del modelo de sedimentación de Burger-Diehl con un término de reacción adicional. En consecuencia, podemos utilizar los ingredientes numéricos presentados por Bürger et al. (2013b) para una correcta discretización espacial por celdas. La discretización temporal utiliza el hecho de que X puede ser actualizado primero, de modo que los flujos numéricos entre los celdas son conocidos, los cuales se utilizan en la actualización del vector de porcentaje.

Ejemplos numéricos para el modelado de la última etapa de una secuencia de SBR, donde se produce la desnitrificación, indican que el esquema numérico sugerido funciona bien y que el proceso de desnitrificación es el esperado. Además, estas simulaciones muestran que la distribución inicial de los lodos tiene una cierta implicación en la eficiencia de la reducción de nitrato. El caso de una suspensión inicial con lodo sólo en la parte superior del sedimentador (test de Diehl) significa una reducción más eficiente de el inventario de nitrato que el obtenido a partir de concentración de suspensión inicialmente homogénea (test de Kynch); véase la Figura 7.9.

8.2. Trabajo futuro

Sobre el trabajo referente a la sedimentación no reactiva en tanques con área de sección transversal variable, algunos de los trabajos futuros pueden ser:

1. Realizar un estudio sobre la condición de entropía considerando la inclusión del término de dispersión y función de área con poca regularidad, por ejemplo discontinua en una cantidad finita de puntos.
2. Una comparación entre los métodos explícitos expuestos en este trabajo versus un método implícito o semi-implícito, o bien con métodos en dos dimensiones.
3. Estudiar posibles soluciones analíticas a la ecuación diferencial que gobierna el problema.

Por otro lado, alguna de las continuaciones obvias del trabajo inicial sobre sedimentación reactiva son:

1. Una modelización más precisa del movimiento del líquido en el que se disuelven los sustratos.
2. La ampliación para incluir un modelo ASM (modelo de sedimentación de lodos activos) completo para las reacciones biológicas.
3. Análisis de las propiedades de convergencia del esquema numérico, la cual incluye la determinación de una condición CFL para el sistema de ecuaciones completo.
4. El desarrollo de discretizaciones de tiempo más eficientes.
5. La extensión al caso de sedimentación continua, y posteriormente al de sedimentadores de área variable.

Referencias

En la bibliografía que se presenta a continuación se incluyen referencias a trabajos relacionados que no son citados en el texto pero que son de interés para el estudio de este trabajo.

- Alex, J., Rönner-Holm, S.G.E., Hunze, M., & and Holm, N.C. (2011). A combined hydraulic and biological SBR model. *Water Science and Technology*, 64, 1025–1031.
- Anestis, G. (1981). Eine eindimensionale Theorie der Sedimentation in Absetzbehältern veränderlichen Querschnitts und in Zentrifugen. *Doctoral Thesis, Technical University of Vienna, Austria*.
- Betancourt, F., Bürger, R., Diehl, S., & Mejías, C. (2014). Advanced methods of flux identification for clarifier-thickener simulation models. *Minerals Engineering*, 63, 2–15.
- Bürger, R., & Concha, F. (1998). Mathematical model and numerical simulation of the settling of flocculated suspensions. *International Journal of Multiphase Flow*, 24, 1005–1023.
- Bürger, R., Coronel, A., & Sepúlveda, M. (2006). On an upwind difference scheme for strongly degenerate parabolic equations modelling the settling of suspensions in centrifuges and non-cylindrical vessels. *Applied Numerical Mathematics*, 56, 1397–1417.
- Bürger, R., Damasceno, J.J.R. & Karlsen, K.H. (2004). A mathematical model for batch and continuous thickening in vessels with varying cross section. *International Journal of Mineral Processing*, 73, 183–208.
- Bürger, R., Diehl, S., Farås, S. & Nopens, I. (2012). On reliable and unreliable numerical methods for the simulation of secondary settling tanks in wastewater treatment. *Computers and Chemical Engineering*, 41, 93–105.
- Bürger, R., & Diehl, S. (2013a). Convexity-preserving flux identification for scalar conservation laws modelling sedimentation. *Inverse Problems*, 29, paper 045008 (30pp).
- Bürger, R., Diehl, S., Farås, S., Nopens, I. & Torfs, E. (2013b). A consistent modelling methodology for secondary settling tanks: a reliable numerical method. *Water Science and Technology*, 68, 192–208.
- Bürger, R., Diehl, S. & Nopens, I. (2011). A consistent modeling methodology for secondary settling tanks in wastewater treatment. *Water Research*, 45, 2247–2260.
- Bürger, R., Karlsen, K.H. , Risebro, N.H. & Towers, J.D. (2004). Well-posedness in BV_t and convergence of a difference scheme for continuous sedimentation in ideal clarifier-thickener units. *Numerische Mathematik*, 97, 25–65.
- Bürger, R., Karlsen, K.H. , Torres, H. & Towers, J.D. (2010). Second-order schemes for

- conservation laws with discontinuous flux modelling clarifier-thickener units. *Numerische Mathematik*, 116, 579–617.
- Bürger, R., Karlsen, K.H. & Towers, J.D. (2005). A model of continuous sedimentation of flocculated suspensions in clarifier-thickener units. *SIAM J. Appl. Math.*, 65, 882–940.
- Bürger, R. & Kunik, M. (2001). A critical look at the kinematic-wave theory for sedimentation-consolidation processes in closed vessels. *Mathematical Methods in Applied Sciences*, 24, 1257–1273.
- Bürger, R., Kumar, S. & Ruiz-Baier, R. (2014). Discontinuous finite volume element discretization for coupled flow-transport problems arising in models of sedimentation, *Preprint 25, Centro de Investigación en Ingeniería Matemática, Universidad de Concepción; submitted*.
- Bürger, R., Ruiz-Baier, R. & Torres, H. (2012). A stabilized finite volume element formulation for sedimentation-consolidation processes. *SIAM J. Sci. Comput.*, 34, B265–B289.
- Bustos, M.C., Concha, F., Bürger, R., & Tory, E.M. (1999). Sedimentation and Thickening: Phenomenological Foundation and Mathematical Theory. *Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands*.
- De Clercq, J., Nopens, I., Defrancq, J., Vanrolleghem, P.A. (2008). Extending and calibrating a mechanistic hindered and compression settling model for activated sludge using in-depth batch experiments. *Water Res.* 42 (3), 781–791.
- Diehl, S. (1995). On scalar conservation laws with point source and discontinuous flux function. *SIAM J. Math. Anal.*, 26, 1425–1451.
- Diehl, S. (1996). A conservation law with point source and discontinuous flux function modelling continuous sedimentation. *SIAM J. Appl. Math.*, 56, 388–419.
- Diehl, S. (1997a). Continuous sedimentation of multi-component particles. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 20, 1345–1364.
- Diehl, S. (1997b). Dynamic and steady-state behavior of continuous sedimentation, *SIAM J. Appl. Math.*, 57, 991–1018.
- Diehl, S. (2000). On boundary conditions and solutions for ideal clarifier-thickener units, *Chemical Engineering Journal*, 80, 119–133.
- Diehl, S. (2007). Estimation of the batch-settling flux function for an ideal suspension from only two experiments. *Chemical Engineering Science*, 62, 4589–4601.
- Diehl, S. (2015). Numerical identification of constitutive functions in scalar nonlinear convection-diffusion equations with application to batch sedimentation. *Applied Numerical Mathematics*, 95, 154–172.
- Diehl, S. & Jeppsson, U. (1998). A model of the settler coupled to the biological reactor. *Water Res.* 32 (2), 331–342.
- Dupont, R. & Dahl, C. (1995). A one-dimensional model for a secondary settling tank including density current and shortcircuiting. *Water Sci. Tech.* 31 (2), 215–224.
- Ekama, G.A., Barnard, J.L., Günthert, F.W., Krebs, P., McCorquodale, J.A., Parker, D.S. & Wahlberg, E.J. (1997). Secondary Settling Tanks: Theory, Modelling, Design and Operation. *In: IAWQ Scientific and Technical Report No. 6. International Association on Water Quality, England*.
- Ekama, G.A. & Marais, P. (2004) Assessing the applicability of the 1D flux theory to full-scale secondary settling tank design with a 2D hydrodynamic model. *Water*

- Research*, 38, 495–506.
- Engquist, B. & Osher, S. (1981). One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws. *Mathematics of Computation*, 36, 321–351.
- Evje, S. & Karlsen, K.H. (2000). Monotone difference approximations of BV solutions to degenerate convection-diffusion equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37, 1838–1860.
- Flores-Alsina, X., Gernaey, K.V., & Jeppsson, U. (2012). Benchmarking biological nutrient removal in wastewater treatment plants: influence of mathematical model assumptions. *Water Science and Technology*, 65, 1496–1505.
- Gernaey, K.V., Jeppsson, U., Batstone, D.J., & Ingildsen, O. (2006). Impact of reactive settler models on simulated WWTP performance. *Water Science and Technology*, 53(1), 159–167.
- Gernaey, K.V., Jeppsson, U., Vanrolleghem, P.A., & Copp, J.B. (2014). Benchmarking of control strategies for wastewater treatment plants. IWA Scientific and Technical Report No. 23. IWA Publishing, London, UK.
- Guerrero, J., Flores-Alsina, X., Guisasola, A., Baeza, J.A., & Gernaey, K. (2013). Effect of nitrite, limited reactive settler and plant design configuration on the predicted performance of simultaneous C/N/P removal WWTPs. *Bioresource Technology*, 136, 680–688.
- Henze, M., Grady, C.P.L., Gujer, W., Marais, G.V.R., & Matsuo, T. (1987). Activated sludge model no. 1. Tech. Rep. 1, IAWQ, London, UK.
- Holden, H. & Risebro, N.H. (2007) Front Tracking for Hyperbolic Conservation Laws. *Corrected second printing, Springer-Verlag, Berlin*.
- Jeppsson, U., & Diehl, S. (1996a). An evaluation of a dynamic model of the secondary clarifier. *Water Science and Technology*, 34 (5–6), 19–26.
- Jeppsson, U., & Diehl, S. (1996b.) On the modelling of the dynamic propagation of biological components in the secondary clarifier. *Water Science and Technology*, 34 (5–6), 85–92.
- Kazmi, A.A., & Furumai, H. (2000a). Field investigations on reactive settling in an intermittent aeration sequencing batch reactor activated sludge process. *Water Science and Technology*, 41(1), 127–135.
- Kazmi, A.A., & Furumai, H. (2000b). A simple settling model for batch activated sludge process. *Water Science and Technology*, 42(3–4), 9–16.
- Keller, J., & Yuan, Z. (2002). Combined hydraulic and biological modelling and full-scale validation of SBR process. *Water Science and Technology*, 45(6), 219–228, 2002.
- Koch, G., Pianta, R., Krebs, P., & Siegrist, H. (1999). Potential of denitrification and solids removal in the rectangular clarifier. *Water Research*, 33, 309–318.
- Kynch, G.J. (1952). A theory of sedimentation. *Trans. Farad. Soc.*, 48, 166–176.
- Le Veque, R.J. (1992). Numerical Methods for Conservation Laws. *Birkhäuser Verlag, Basel*.
- Ostace, G.S., Cristea, V.M., & Agachi, P.S. (2012). Evaluation of different control strategies of the waste water treatment plant based on a modified activated sludge model no. 3, *Environmental Engineering and Management Journal*, 11, 147–164.
- Plósz, B. Gy., Weiss, M., Printemps, C., Essemiani, K., Meinhold, J., 2007. One-dimensional modelling of the secondary clarifier d factors affecting simulation in the clarification zone and the assessment of the thickening flow dependence. *Water Res.* 41 (15),

3359–3371.

- Queinnec, I. & Dochain, D. (2001). Modelling and simulation of the steady-state of secondary settlers in wastewater treatment plants. *Water Sci. Tech.* 43 (7), 39–46.
- Schneider, W. (1982). Kinematic-wave theory of sedimentation beneath inclined walls. *J. Fluid Mech.* 120, 323–346.
- Siegrist, H., Krebs, P., Bühler, R., Purtschert, I., Röck, C., & Rufer, R. (1995). Denitrification in secondary clarifiers. *Water Science and Technology*, 31(2), 205–214.
- Stenström, M. K. (1976). A Dynamic Model and Computer Compatible Control Strategies for Wastewater Treatment Plants. *PhD Dissertation, Clemson University, Clemson, SC, USA*.
- Takács, I., Patry, G.G., & Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research*, 25, 1263–1271.
- Tchobanoglous, G., Burton, F. & Stensel, H. (2003). Wastewater Engineering: Treatment and reuse, 4th Edition. *Metcalf and Eddy. McGraw - Hill, New York, USA*.
- Torfs, E., Bürger, R., Diehl, S., Farås, S. & Nopens, I. (2012). A reliable numerical method for secondary settling modelling. *Comm. Appl. Biol. Sci.* 77, 151–156.
- Torfs, E., Maere, T., Bürger, R., Diehl, S., & Nopens, I. (2015a). Impact on sludge inventory and control strategies using the benchmark simulation model no. 1 with the Bürger-Diehl settler model. *Water Science and Technology*, 71, 1524–1535.
- Torfs, E., Balemans, S. , Locatelli, F., Laurent, J., François, P., Bürger, R., Diehl, S., & Nopens, I. (2015b). Critical analysis of constitutive functions for hindered settling velocity in 1-D settler models. 9th IWA Symposium on Systems Analysis and Integrated Assessment 14–17 June 2015, Gold Coast, Australia.
- Vitasovic, Z. (1989). Continuous settler operation; a dynamic model. In: *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater Engineering (G. G. Patry & D. Chapman, eds)*. Lewis Publishers, Chelsea, MI, USA, 59–81.