



**UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA**

**ESTUDIO DE PROBLEMA INVERSO ASOCIADO A LAS ECUACIONES DE
MOVIMIENTOS DE PARTÍCULAS SÓLIDAS ACOPLADAS CON UN FLUIDO**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

ÁLVARO FELIPE MACÍAS ARAYA

PROFESOR GUÍA:

CARLOS CONCA ROSENDE

PROFESORA CO-GUÍA:

ALEJANDRA ÁLVAREZ VALLEJOS

MIEMBRO DE LA COMISIÓN:

RODRIGO LECAROS LIRA

SANTIAGO DE CHILE

JUNIO 2007

RESUMEN DE LA MEMORIA
PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO
POR: Á. FELIPE MACÍAS ARAYA
FECHA: 20 DE AGOSTO 2007
PROF. GUÍA: CARLOS CONCA R.

“ESTUDIO DE PROBLEMA INVERSO ASOCIADO A LAS ECUACIONES DE MOVIMIENTOS DE
PARTÍCULAS SÓLIDAS ACOPLADAS CON UN FLUIDO”

El presente trabajo de título presenta el estudio en conjunto del Centro de Modelamiento Matemático (CMM) y el Instituto de Innovación en Minería y Metalurgia (IM2) para estimar el comportamiento del material particulado acoplado con el aire al interior de un dominio, sólo haciendo mediciones en una sección de un borde.

En la primera parte se presentarán las ecuaciones de movimientos involucradas, definiciones y algunas hipótesis. Luego, se presenta el problema inverso a estudiar, donde se estudia el caso estacionario no acoplado en un dominio cualquiera, para entregar un algoritmo que entregue una estimación de la solución. También se analizarán pruebas numéricas realizadas para este caso. Posteriormente, se estudiará el caso no estacionario entregando un algoritmo similar al caso estacionario y se analizarán los ensayos numéricos respectivos. Para esto se define un funcional J apropiado para minimizar, tal que, el flujo que hace mínimo este funcional coincida con el valor del flujo sobre el rajo del problema directo. Para encontrar el mínimo se usa el método de máximo descenso, por lo que hay que derivar J y usar un problema dual para encontrar de manera explícita la derivada del funcional.

En la última parte se aplicará el problema inverso a un problema medioambiental que consiste en predecir el comportamiento del material particulado en suspensión en el aire con datos experimentales en una mina de rajo abierto.

Se concluye que es factible poder predecir el comportamiento en todo el dominio, especialmente en el caso estacionario, pero que existe una gran dependencia de la efectividad del método con la difusividad, la velocidad del viento y la forma del dominio.

Agradecimientos

Esta memoria fue realizada gracias al apoyo de dos importantes instituciones: el *Centro de Modelamiento Matemático* (CMM) y el *Instituto de Innovación en Minería y Metalurgia* (IM2) quienes me motivaron y me acogieron en su proyecto. Asimismo, quisiera hacer mención al *Departamento de Ingeniería Matemática* de la *Universidad de Chile*, el cual me forjó no sólo en los conocimientos matemáticos, sino también en desarrollarme como una persona involucrada con su medio y ser consciente del desafío que implica pertenecer a esta prestigiosa institución, como lo es la *Universidad de Chile*.

Mis sinceros agradecimientos a mi Profesor Guía Carlos Conca R. el cual con su valioso apoyo, su gran disposición, motivación y confianza en mi trabajo hizo posible la realización de esta memoria. Quiero agradecerle también su ayuda en hacerme ver lo importante que son las matemáticas en la ingeniería y las diversas aplicaciones que tiene.

También quisiera agradecer a mi Profesora Co-Guía Alejandra Álvarez V. y al miembro de la comisión Rodrigo Lecaros L. los cuales me acogieron en el IM2 con una gran disposición a aconsejarme y asesorarme. Ellos fueron fundamentales en el desarrollo de esta memoria.

No quiero dejar pasar la oportunidad y expresar mi agradecimiento a aquellos maestros que me han servido de ejemplo, que de alguna manera u otra me motivaron e inspiraron para continuar esta carrera. Algunos de ellos son Roberto Cominetti C., Axel Osses A., Manuel Del Pino M., Patricio Felmer A., Jorge San Martín H., Jorge Ortega, Raul Gormaz O., Salomé Martínez S., entre muchos otros.

A mis compañeros y amigos del DIM los cuales fui conociendo de a poco y sin duda con la ayuda de muchos de ellos logré llegar al final de la carrera. Muchas gracias a Oscar, Juan, Roberto, Mauricio, Diego, Luis, Sebastian, Gonzalo C., Gustavo, Rodrigo, Francisco, Bolívar, Ángela, Gonzalo S., Sofía, por nombrar a algunos.

Quiero darles las gracias a mis amigos que conocí durante la universidad, apesar de que con la mayoría seguimos caminos distintos, no olvidaré los momentos vividos. Mis amigos de primer año: Arturo, Ítalo, Daniel, Diego, Manfred, Marcelo y Rodrigo.

Quiero hacer una mención a mis amigos que me acompañaron y fueron un soporte fuera de la universidad: Abelardo J., Cristian J., Rodrigo V., Alejandro T., Eduardo V., Francisca H., Rocío O., Ricardo M., Egon G., Natalia C., Carolina M., y algún otro que en estos momentos no logro recordar.

No puedo dejar pasar la oportunidad de agradecer de manera especial a mi polola Paula Morandé, la cual es un persona muy importante en mi vida y logró, con su apoyo, darme la fuerza necesaria para lograr cumplir mi objetivo.

Siempre tendré presente a mi tío Fernando Araya y mi tía Ximena Macías, gracias a su ayuda en determinados momentos pude llegar hasta acá. Desde luego, no hubiese podido lograr llegar al final de esta importante etapa sin el apoyo de mi familia, mis padres Leopoldo Macías y Cecilia Araya que con su ejemplos de sacrificio y esfuerzo me alentaron en los momentos más difíciles. Mis hermanos: María Cecilia, Isabel Margarita, Javier y Valentina cada uno y de distintas maneras fueron pilares fundamentales en mi etapa de estudios.

A todos mi mayor reconocimiento y gratitud.

Índice general

1. Introducción	2
2. Conceptos teóricos	4
2.1. Definiciones	4
2.2. Sistemas de ecuaciones	5
2.3. Problema directo y condiciones de borde	6
3. Estudio del problema estacionario	8
3.1. Simplificación del problema	8
3.1.1. Problema estacionario no acoplado	8
3.1.2. Problema inverso	9
3.1.3. Funcional J y sus propiedades	10
3.2. Método del Gradiente Conjugado	12
3.2.1. Derivada de Gateaux de J	12
4. Pruebas numéricas para el problema estacionario	17
4.1. Problema directo	18
4.2. Resultados numéricos	20
4.2.1. Funcional J	20
4.2.2. Error en Γ_l	24
4.2.3. Estimación del flujo en Γ_m	25

ÍNDICE GENERAL

5. Estudio del problema no estacionario	27
5.1. Simplificación del problema	28
5.1.1. Problema no estacionario no acoplados	28
5.1.2. Problema inverso	28
5.1.3. Funcional J_T y sus propiedades	29
5.2. Método del Gradiente Conjugado	30
5.2.1. Derivada de Gateaux de J_T	31
5.2.2. Problema dual	31
5.2.3. Algoritmo de búsqueda del mínimo usando gradiente conjugado	33
6. Pruebas numéricas para el problema no estacionario	35
6.1. 1 paso, $T=10s$	36
6.1.1. Resultados numéricos	36
6.2. 2 pasos, $T=20s$	40
6.2.1. Resultados numéricos	41
6.3. 3 pasos, $T=30s$	45
6.3.1. Resultados numéricos	45
6.4. 5 pasos, $T=50s$	50
6.4.1. Resultados numéricos	51
6.5. Análisis general del error	57
7. Aplicación del problema inverso	58
7.1. Motivación	58
7.2. Esquema del rajo y algunas hipótesis	59
7.3. Ecuaciones de movimientos y problema directo	60
7.4. Aplicación del problema inverso en el caso estacionario	61
7.4.1. Resultados obtenidos	64
7.4.2. Resultados con datos experimentales	66

ÍNDICE GENERAL

7.5. Problema estacionario agregando una fuente	72
7.5.1. Algoritmo	74
7.5.2. Resultados	75
7.6. Problema estacionario con $\eta = 10$	76
7.6.1. Resultados	77
7.7. Problema inverso de evolución	77
7.7.1. Algoritmo para el problema no estacionario	79
7.7.2. La ecuación retrógrada	80
7.7.3. Resultados	81
7.8. El problema de estimar la concentración	81
7.8.1. Algoritmo	84
7.9. Conclusión	85
8. Modelo Físico del Rajo - Diseño	86
8.1. Detalles técnicos del modelo	86
8.1.1. Extractor convergente	88
8.1.2. Rugosidades	90
8.2. Resultados	91
8.2.1. Introducción	91
8.2.2. Modelo experimental	91
8.2.3. Posisionamiento del sistema-Z	93
8.2.4. Resultados	93
8.2.5. Función de densidad de probabilidad y espectro de energía	95
8.2.6. Velocidad promedio y fluctuaciones	95
8.2.7. Observaciones y trabajo en progreso	96
9. Conclusión	99
Bibliografía	101

Capítulo 1

Introducción

Cuando se trabajan con ecuaciones diferenciales no siempre se requiere encontrar la solución del esta, sino, por ejemplo, se desea conocer los coeficientes de la ecuación, determinar alguna condición de borde, etc. Estos problemas son conocidos como problemas inversos.

El problema inverso a tratar es el si el borde de un dominio se separa en dos y se efectúan mediciones sobre uno de ellos se quiere recuperar las condiciones de borde el otro. Especificamente, en un dominio Ω el borde se divide en dos Γ_m y Γ_l y al interior se tiene polvo en suspensión en el aire. Γ_l representa el borde donde se realizan las mediciones, no tiene condiciones particulares, ahí se conoce los valores de la velocidad, concentración del polvo y flujo de este. Con estos datos se quiere conocer el flujo del polvo en Γ_m , en el cual se suponen condiciones de muro, es decir velocidad nula.

En la primera parte se presentarán las ecuaciones de movimiento involucradas, definiciones y algunas hipótesis. Luego de algunas simplificaciones la ecuación que gobierna el valor de la concentración C en Ω es

$$\frac{\partial}{\partial t}C + \nabla C \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D\nabla C),$$

donde \vec{v} es la velocidad de C y D la difusión que es conocida.

Para estudiar este problema inverso se separa en dos grandes partes el caso estacionario y luego no estacionario. Los dos casos se trabajan de la misma manera, para encontrar el flujo q_m^* en Γ_m se define un funcional $J : L^2(\Gamma_m) \rightarrow \mathbb{R}$ con el objetivo de que el mínimo de J coincida con q_m^* . Se demuestra que J es convexa por lo que se usará el método de gradiente conjugado para encontrar el mínimo. Para ello se debe calcular la derivada de Gateaux de J . Con esto se explicita un algoritmo que entrega una sucesión de flujos q_k que converge a q_m^* .

Es importante estudiar como funciona numéricamente el algoritmo, por eso se realizaron pruebas numéricas tanto para el caso estacionario como el de evolución. En estas secciones se analizará la

convergencia del método y algunos problemas que se presentan especialmente en el caso de evolución.

El estudio de este problema inverso se motivó desde un problema medioambiental relacionado con la minería a gran escala. Las minas de rajo abierto son focos de contaminación debido, entre otras cosas, al polvo en suspensión en el aire producto de las tronaduras. Es por eso que se colocaron en los cuatro puntos cardinales puntos de medición de partículas PM_{10} . Las partículas PM_{10} son partículas de tamaño menor o igual a $10\mu m$ suspendidas en un gas, en este caso el aire. Partículas más grande se filtran en la nariz y garganta y no causa generalmente problemas, pero las partículas más pequeñas como las PM_{10} se pueden alojar en los bronquios y pulmones causando serios daños de salud. Es por ello que se quiere conocer el comportamiento del polvo en suspensión al interior del rajo y para esto se usará el problema inverso visto en los primeros capítulos.

Para finalizar se mostrará parte de un trabajo paralelo a la predicción que consiste en realizar una maqueta de la mina de Chuquicamata y estudiar el comportamiento de material en suspensión en la maqueta.

Capítulo 2

Conceptos teóricos

2.1. Definiciones

El problema a estudiar involucra las ecuaciones de movimiento de **partículas dispersas** en un fluido, es decir partículas sólidas interactuando esparcidos en un fluido. Por ello antes de establecer las ecuaciones de movimientos y dar a conocer el problema inverso a estudiar son necesarias algunas definiciones ([2]).

Se define la **densidad** $\rho(\vec{x})$ de un material en $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, como

$$\rho(\vec{x}) := \lim_{|\delta V| \rightarrow 0} \frac{\delta M}{\delta V},$$

donde δM es la masa del volumen δV .

Debido a que las partículas dispersas en todo el volumen δV son una cantidad finita, existen dos posibilidades cuando $|\delta V|$ tiende a cero, una es que δV llegue a encerrar sólo una de las partículas dispersas o que δV sólo involucre el volumen del fluido. Para evitar este problema en las siguientes definiciones se va a utilizar un δV^0 volumen límite, donde $|\delta V^0| > 0$ pequeño.

Con esto se pueden definir los **coeficientes adimensionales** α_d , α_c :

$$\alpha_d := \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^0} \frac{\delta V_d}{\delta V},$$

donde δV_d es el volumen de la fase dispersa contenida en δV . Análogamente se define α_c , pero, para el volumen de la fase continua (fluido) contenido en δV . Claramente $\alpha_d + \alpha_c = 1$.

La **densidad aparente** de la fase dispersa (resp. continua) se define como:

$$\bar{\rho}_d := \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^0} \frac{\delta M_d}{\delta V}$$

$$(\text{resp. } \bar{\rho}_c := \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^0} \frac{\delta M_c}{\delta V}),$$

donde δM_d (resp. δM_c) es la masa de la fase dispersa (resp. continua) contenida en δV . Entonces la **densidad mixta** es $\rho_m = \bar{\rho}_d + \bar{\rho}_c$.

La masa asociada a la fase dispersa puede ser escrita como $\delta M_d = \rho_d \delta V_d$ con ρ_d la densidad material con se concluye que $\bar{\rho}_d = \rho_d \alpha_d$. Análogamente se obtiene que $\bar{\rho}_c = \rho_c \alpha_c$. Por lo que otra expresión para la densidad mixta es $\rho_m = \alpha_c \rho_c + \alpha_d \rho_d$.

Por último \vec{u} es la **velocidad del fluido**, \vec{v} es la **velocidad de las partículas** y D_d es el **coeficiente de difusión**.

2.2. Sistemas de ecuaciones

Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ un conjunto abierto, conexo y acotado con $n \in \{2, 3\}$ y $T > 0$. La ecuación de conservación de masa para el fluido en Ω en un intervalo de tiempo $(0, T)$, usando derivadas totales, es:

$$\frac{D(\alpha_c \rho_c)}{Dt} = 0 \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (2.1)$$

Como se asume que el material disperso se difunde a través del fluido, a la ecuación de conservación de masa para las partículas se agrega el término correspondiente a la difusión (ley de Fick):

$$\frac{D(\alpha_d \rho_d)}{Dt} = \nabla \cdot (D_d \nabla(\alpha_d \rho_d)) \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (2.2)$$

Ahora como se está analizando el problema con una perspectiva lagrangiana, i.e. $\vec{x} = \vec{x}(t)$. Entonces las ecuaciones (2.1) y (2.2) se pueden escribir respectivamente como:

$$\frac{\partial(\alpha_c \rho_c)}{\partial t} + \nabla(\alpha_c \rho_c) \cdot \vec{u} = 0 \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (2.3)$$

y

$$\frac{\partial(\alpha_d \rho_d)}{\partial t} + \nabla(\alpha_d \rho_d) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla(\alpha_d \rho_d)) \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (2.4)$$

Las ecuaciones de conservación de momentum y masa para sistemas acoplados (Navier-Stokes) para un fluido incompresible es:

$$\begin{cases} \frac{\partial(\alpha_c \rho_c \vec{u})}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)(\alpha_c \rho_c \vec{u}) &= \alpha_c \nabla \cdot \sigma(\vec{u}, p) + \alpha_c \rho_c \vec{g} - \beta(\vec{u} - \vec{v}) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot u &= 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \end{cases} \quad (2.5)$$

La suspensión de las partículas sólidas se estudiará como la dinámica de dos fluidos incompresible acoplados, por lo que la ecuación de conservación de momentum para las partículas dispersas queda:

$$\begin{cases} \frac{\partial(\alpha_d \rho_d \vec{v})}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)(\alpha_d \rho_d \vec{v}) &= \alpha_d \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) + \alpha_d \rho_d \vec{g} + \beta(\vec{u} - \vec{v}) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot v &= 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \end{cases} \quad (2.6)$$

donde p es la presión, $\vec{g} \in \mathbb{R}^n$ es la constante gravitacional, $\beta \in \mathbb{R}$ constante de acoplamiento y $\sigma(\vec{w}, p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ es el tensor de esfuerzos con $\sigma(\vec{w}, p) = -pI_n + 2\mu\varepsilon(\vec{w})$, con I_n matriz identidad de $n \times n$, μ viscosidad y $\varepsilon(\vec{w})_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i})$.

2.3. Problema directo y condiciones de borde

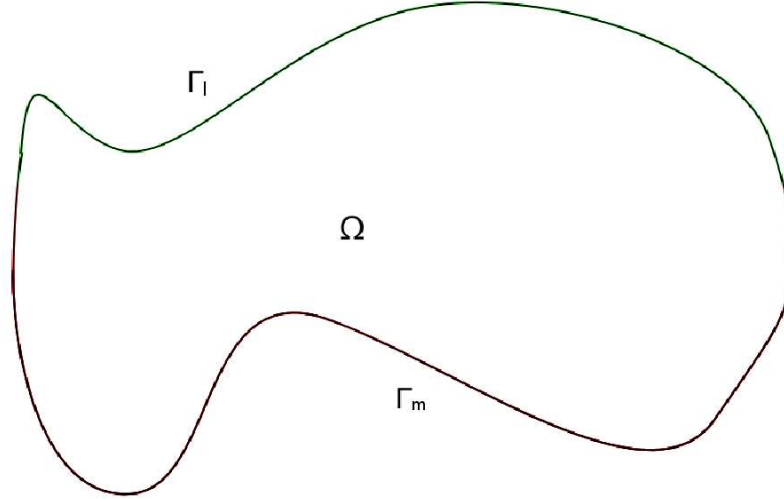


Figura 2.1: Dominio Ω

Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ un abierto, conexo, acotado y $\partial\Omega = \Gamma_l \cup \Gamma_m$ con Γ_l y Γ_m curvas conexas y suaves, tal que $|\Gamma_l \cap \Gamma_m| = 0$. Entonces el problema consiste que en Ω se mueve un flujo de aire (fase continua) que intercatúa con un material particulado (fase discreta) que proviene de Γ_m , el cual para el aire

representa un muro (condición Dirichlet) que emite este material particulado. Γ_l es una superficie que no cumple las condiciones típicas de frontera (Dirichlet o Neumann), es la frontera donde se conocen todos los valores de las velocidades y concentraciones.

Por lo tanto el problema directo a resolver, suponiendo conocidas todas las condiciones de borde, además de D_d , β y \vec{g} :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial(\alpha_c \rho_c \vec{u})}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)(\alpha_c \rho_c \vec{u}) = \alpha_c \nabla \cdot \sigma(\vec{u}, p) + \alpha_c \rho_c \vec{g} - \beta(\vec{u} - \vec{v}) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial(\alpha_d \rho_d \vec{v})}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)(\alpha_d \rho_d \vec{v}) = \alpha_d \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) + \alpha_d \rho_d \vec{g} + \beta(\vec{u} - \vec{v}) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial(\alpha_c \rho_c)}{\partial t} + \nabla(\alpha_c \rho_c) \cdot \vec{u} = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial(\alpha_d \rho_d)}{\partial t} + \nabla(\alpha_d \rho_d) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla(\alpha_d \rho_d)) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot \vec{v} = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot \vec{u} = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \end{array} \right. \quad (2.7)$$

Condiciones sobre $\Gamma_l \times (0, T)$:

$$\vec{u} = \vec{u}_l \quad \vec{v} = \vec{v}_l \quad (2.8)$$

$$\rho_d = \rho_{dl} \quad \rho_c = \rho_{cl} \quad (2.9)$$

$$\alpha_d = \alpha_{dl} \quad \alpha_c = \alpha_{cl} \quad (2.10)$$

$$p = p_0 \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

Condiciones sobre $\Gamma_m \times (0, T)$:

$$\vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \vec{v} \cdot \hat{\tau} = 0 \quad (2.13)$$

$$D_d \frac{\partial(\alpha_d \rho_d)}{\partial n} = q \quad \frac{\partial(\alpha_c \rho_c)}{\partial n} = 0 \quad (2.14)$$

$$\vec{u} = 0 \quad (2.15)$$

$$(2.16)$$

Donde \hat{n} es la normal exterior a Ω .

Capítulo 3

Estudio del problema estacionario

En esta sección se van a hacer algunas simplificaciones y se va a definir el problema inverso a estudiar para este modelo.

3.1. Simplificación del problema

En un comienzo se harán las siguientes hipótesis que se irán relajando a medida que se avanza en el estudio del problema.

- (H1) Como se verá más adelante en la motivación del problema se verá que el acoplamiento de las partículas con el fluido es muy bajo por lo que se supondrá que $\vec{u} = \vec{v}$ y que $\frac{\alpha_d}{\alpha_c} \approx 0$.
- (H2) El sistema no varía en el tiempo, es decir es un problema estacionario.

3.1.1. Problema estacionario no acoplado

En esta sección se supondrán ciertas las hipótesis (H1) y (H2). Entonces si se cumple (H1), $\vec{v} = \vec{u}$, sumando las ecuaciones (2.5) y (2.6) se obtiene que

$$\frac{\partial((\alpha_d\rho_d + \alpha_c\rho_c)\vec{v})}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)((\alpha_d\rho_d + \alpha_c\rho_c)\vec{v}) = (\alpha_d + \alpha_c)\nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) + (\alpha_d\rho_d + \alpha_c\rho_c)\vec{g} \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (3.1)$$

Recordando que la densidad mixta $\rho_m = \alpha_d\rho_d + \alpha_c\rho_c$, se tiene que

$$\frac{\partial(\rho_m\vec{v})}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m\vec{v}) = \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) + \rho_m\vec{g} \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (3.2)$$

Y considerando flujo incompresible $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ el problema se reduce a un sistema de Navier-Stokes para un sistema no acoplado con densidad ρ_m , ya que $\rho_m \approx \rho_c$. Incorporando las hipótesis (H1) y (H2) el sistema se reduce a:

$$(\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) = \rho_m \vec{g} \text{ en } \Omega \quad (3.3)$$

Para simplificar aún más el problema no se consideran los efectos de la gravedad. Por lo tanto el sistema a resolver es el siguiente:

$$\begin{cases} (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) = 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{v} = 0 & \text{en } \Omega \end{cases} \quad (3.4)$$

Por último la ecuación de conservación de masa para la fase dispersa bajo estas hipótesis:

$$\nabla C \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C) \text{ en } \Omega \quad (3.5)$$

con $C := \alpha_d \rho_d$.

3.1.2. Problema inverso

El objetivo es poder conocer el valor del flujo q_m^* en Γ_m a partir de mediciones sobre Γ_l (ver figura 2.1). Entonces si se supone conocidos sobre Γ_l :

$$\begin{aligned} C &= C_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n} &= q_l \\ \vec{v} &= \vec{v}_l \end{aligned} \quad (3.6)$$

El problema se puede escribir como:

Encontrar $q_m^* \in L^2(\Gamma_m)$ tal que (C, \vec{v}, p) resuelva

$$\begin{cases} (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) = 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{v} = 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla C \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C) & \text{en } \Omega \\ \vec{v} = \vec{v}_l, & C = C_l & p = p_0 & \text{sobre } \Gamma_l \\ \vec{v} = 0, & D_d \frac{\partial C}{\partial n} = q_m^* & & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.7)$$

t.q. C satisfaga $D_d \frac{\partial C}{\partial n} = q_l$ en Γ_l .

3.1.3. Funcional J y sus propiedades

Para encontrar q_m^* , se define el funcional

$$J : L^2(\Gamma_m) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$J(q) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right|^2 ds,$$

donde $C(q)$ es la concentración en Ω con flujo q en Γ_m . Notar que (\vec{v}, p) no depende del flujo q , por lo que la velocidad \vec{v} y la presión p se pueden resolver independiente de la concentración C y al flujo q :

$$\begin{cases} (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) & = & 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{v} & = & 0 & \text{en } \Omega \\ \vec{v} = \vec{v}_l & & p = p_0 & \text{sobre } \Gamma_l \\ \vec{v} = 0 & & & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.8)$$

El objetivo es poder encontrar $q_m^* \in L^2(\Gamma_m)$ t.q. se tenga que:

$$\begin{cases} \nabla C(q_m^*) \cdot \vec{v} & = & \nabla \cdot (D_d \nabla C(q_m^*)) & \text{en } \Omega \\ C(q_m^*) & = & C_l & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_m^*) & = & q_m^* & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.9)$$

Además $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_m^*) = q_l$ en Γ_l . Lo que implica que q_m^* es un cero del funcional J y es el que minimiza el mismo. Por lo tanto el problema se puede pensar como el siguiente problema de optimización:

Encontrar $q_m^* \in L^2(\Gamma_m)$ t.q.:

$$J(q_m^*) = \min_{q_m \in L^2(\Gamma_m)} J(q_m) = \min_{q_m \in L^2(\Gamma_m)} \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_m) - q_l \right|^2 ds$$

Entonces se quiere buscar el mínimo del funcional J , para ello existen varias técnicas dependiendo de las propiedades de J , como se mostrará J es convexa por lo que para estos casos es natural usar el método de gradiente conjugado. Para demostrar la convexidad de J , primero, se verá el comportamiento de C en función de q .

Estudio de la linealidad de $C(q)$

Al observar el sistema (3.9) y si se supone que $C_l = 0$, es claro que C es lineal con respecto a q , i.e. $C(q + \lambda r) = C(q) + \lambda C(r)$ con $q, r \in L^2(\Gamma_l)$ y $\lambda \in \mathbb{R}$. El problema es si $C_l \neq 0$, puesto que se pierde la linealidad con respecto a q , pero esta no linealidad de $C(q)$ tiene las propiedades suficientes

para demostrar la convexidad de J . En efecto, considerando $C(q)$ y $C(r)$ soluciones de (3.9) con condición de borde Neumann q y r sobre Γ_l respectivamente. Al sumar ambas ecuaciones se obtiene que $C(q) + C(r)$ es solución de:

$$\begin{cases} \nabla(C(q) + C(r)) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla(C(q) + C(r))) & \text{en } \Omega \\ C(q) + C(r) = 2C_l & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial}{\partial n} (C(q) + C(r)) = q + r & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.10)$$

Con lo que se puede concluir, dado la unicidad del sistema, que $C(q + r) = C(q) + C(r) - C(0)$. Ahora si comparamos el sistema que satisface $C(\lambda r)$ con el que satisface $\lambda C(r)$:

$$\begin{cases} \nabla C(\lambda r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C(\lambda r)) & \text{en } \Omega \\ C(\lambda r) = C_l & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(\lambda r) = \lambda r & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\begin{cases} \nabla \lambda C(r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \lambda C(r)) & \text{en } \Omega \\ \lambda C(r) = \lambda C_l & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \lambda C}{\partial n}(r) = \lambda r & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.12)$$

Se llega a la conclusión que $C(\lambda r) = \lambda C(r) - (\lambda - 1)C(0)$.

Por lo tanto

$$C(q + \lambda r) = C(q) + \lambda(C(r) - C(0)) \quad (3.13)$$

Convexidad de J

Para estudiar la convexidad de J , primero hay que analizar la convexidad de C con respecto a q , usando (3.13) se obtiene que

$$C(tq_1 + (1-t)q_2) = C(tq_1) + (1-t)C(q_2) - (1-t)C(0) = tC(q_1) - (t-1)C(0) + (1-t)C(q_2) - (1-t)C(0)$$

entonces,

$$C(tq_1 + (1-t)q_2) = tC(q_1) + (1-t)C(q_2), \forall t \in (0, 1), \forall q_1, q_2 \in L^2(\Gamma_l)$$

Con lo que se obtiene que C es convexa y con ello se concluye la convexidad de J . En efecto,

$$J(tq_1 + (1-t)q_2) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n} (tq_1 + (1-t)q_2) - q_l \right|^2 ds$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \left(t \frac{\partial C}{\partial n}(q_1) + (1-t) \frac{\partial C}{\partial n}(q_2) \right) - q_l \right|^2 ds \\
 &\leq \frac{t}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_1) - q_l \right|^2 ds + \frac{(1-t)}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_2) - q_l \right|^2 ds \\
 &= tJ(q_1) + (1-t)J(q_2)
 \end{aligned}$$

Mínimo global J

Al ser J convexa tiene un mínimo que es global y vale cero, pero si suponemos que se alcanza en dos flujos distintos, es decir $q_m^1 \neq q_m^2$ y $J(q_m^1) = J(q_m^2) = 0$. Luego, se tendrá que $C_0(q_m^1 - q_m^2) := C(q_m^1 - q_m^2) - C(0) = C(q_m^1) - C(q_m^2)$, entonces $C_0(q_m^1 - q_m^2) |_{\Gamma_l} = 0$ y $D_d \frac{\partial C_0}{\partial n}(q_m^1 - q_m^2) |_{\Gamma_m} = 0$. Pero por las condiciones físicas del sistema, como lo son la difusión (alta) y que $C \geq 0$ en Ω , si en Γ_m existe un flujo distinto de cero no se pueda alcanzar una concentración $C_0(q_m^1 - q_m^2) |_{\Gamma_l} = 0$ y con flujo $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_m^1 - q_m^2)$ nulo en el borde Γ_l . Por lo que se llega a una contradicción, entonces existe sólo un flujo $q_m^* \in L^2(\Gamma_m)$ t.q. $J(q_m^*) = 0$.

3.2. Método del Gradiente Conjugado

El método del gradiente conjugado es un método que se utiliza para encontrar el mínimo de funciones convexas, el cual genera una sucesión que converge al mínimo [4]. Esta sucesión se genera de la siguiente manera $q_{k+1} = q_k + \varepsilon_k d_k$, tal que $J(q_{k+1}) < J(q_k)$ con $d_k = -DJ(q)$, donde $DJ(q)$ es la derivada de Gateaux de J y ε escogido de manera adecuada para que el funcional J evaluado en q_{k+1} sea el menor posible.

3.2.1. Derivada de Gateaux de J

La derivada de Gateaux se define como

$$\langle DJ(q), r \rangle := \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{J(q + \eta r) - J(q)}{\eta},$$

se define también

$$\delta C_q(r) := \langle DC(q), r \rangle,$$

fácilmente se puede mostrar, usando 3.13 que $\delta C_q(r) = C(r) - C(0)$.

Entonces,

$$J(q + \eta r) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C(q + \eta r)}{\partial n} - q_l \right|^2 ds$$

$$\begin{aligned}
 J(q + \eta r) &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} + \eta D_d \left(\frac{\partial C(r)}{\partial n} - \frac{\partial C(0)}{\partial n} \right) - q_l \right|^2 ds \\
 &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left(\left| D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} - q_l \right|^2 + \eta^2 D_d^2 \left| \frac{\partial C(r)}{\partial n} - \frac{\partial C(0)}{\partial n} \right|^2 + 2\eta \left(D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} - q_l \right) D_d \left(\frac{\partial C(r)}{\partial n} - \frac{\partial C(0)}{\partial n} \right) \right) ds
 \end{aligned}$$

lo que implica

$$\frac{J(q + \eta r) - J(q)}{\eta} = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left(\eta D_d^2 \left| \frac{\partial}{\partial n} (C(r) - C(0)) \right|^2 + 2 \left(D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} - q_l \right) D_d \frac{\partial}{\partial n} (C(r) - C(0)) \right) ds$$

por lo tanto

$$\langle DJ(q), r \rangle = \int_{\Gamma_l} \left(D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} - q_l \right) D_d \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds.$$

Pero el objetivo es poder encontrar $DJ(q)$ explícitamente, es decir encontrar una expresión de la forma

$$\langle DJ(q), r \rangle = \int_{\Gamma_m} \phi r ds,$$

donde $DJ(q) := \phi|_{\Gamma_m}$ y ϕ es una función a encontrar.

A continuación se buscan condiciones sobre ϕ para que se cumpla esta igualdad.

Problema dual

Para encontrar condiciones sobre ϕ , primero se debe identificar el sistema que satisface $\delta C_q(r)$, pero esto no es difícil de obtener teniendo claro que $\delta C_q(r) = C(r) - C(0)$ (ver 3.13).

Por esto el sistema que satisface $\delta C_q(r)$ es

$$\begin{cases} \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} &= \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) && \text{en } \Omega \\ \delta C_q(r) &= 0 && \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} &= r && \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.14)$$

Sea ahora $\phi \in H^1(\Omega)$, entonces si la primera ecuación de (3.14) se multiplica por ϕ y luego se integra en todo Ω se obtiene

$$\int_{\Omega} (\phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} - \phi \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r))) dx = 0 \quad (3.15)$$

integrando por partes el primer término,

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} dx = \int_{\partial \Omega} \delta C_q(r) \phi \vec{v} \cdot \hat{n} ds - \int_{\Omega} \delta C_q(r) \nabla \cdot (\phi \vec{v}) dx$$

Usando que $\nabla \cdot (\phi \vec{v}) = \phi \nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \phi = 0 + \vec{v} \cdot \nabla \phi$

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} dx = \int_{\Gamma_l} \delta C_q(r) \phi \vec{v} \cdot \hat{n} ds + \int_{\Gamma_m} \delta C_q(r) \phi \vec{v} \cdot \hat{n} ds - \int_{\Omega} \delta C_q(r) \vec{v} \cdot \nabla \phi dx$$

Además $\vec{v} = 0$ en Γ_m (ver 3.8) y $\delta C_q(r) |_{\Gamma_l} = 0$ (ver 3.14) se concluye que

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} dx = - \int_{\Omega} \delta C_q(r) \vec{v} \cdot \nabla \phi dx$$

Por otro lado, integrando por partes 2 veces el segundo término de (3.15)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \phi \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) dx &= \int_{\partial \Omega} D_d \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds - \int_{\Omega} D_d \nabla \phi \cdot \nabla \delta C_q(r) dx \\ &= \int_{\partial \Omega} D_d \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds - \int_{\partial \Omega} D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} \delta C_q(r) ds + \int_{\Omega} \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) \delta C_q(r) dx \end{aligned}$$

Utilizando las ecuaciones de borde para $\delta C_q(r)$ de la ecc. (3.14) se tiene la igualdad

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) dx = \int_{\Gamma_l} D_d \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds - \int_{\Gamma_m} \left(D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} \delta C_q(r) - \phi \right) ds + \int_{\Omega} \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) \delta C_q(r) dx$$

Reemplazando estas identidades en la ecuación (3.14)

$$- \int_{\Omega} \delta C_q(r) (\vec{v} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi)) dx - \int_{\Gamma_l} D_d \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds + \int_{\Gamma_m} \left(D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} \delta C_q(r) - \phi r \right) ds = 0 \quad (3.16)$$

Si a $\phi \in H^1(\Omega)$ le pedimos que satisfaga el sistema:

$$\begin{cases} \vec{v} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) &= 0 & \text{en } \Omega \\ \phi &= q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0 & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.17)$$

Entonces, la ecuación (3.16) se reduce a

$$\int_{\Gamma_l} \left(D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right) D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(r) ds = \int_{\Gamma_m} \phi r ds \quad (3.18)$$

El problema (3.17) se conoce como **problema dual**, asociado a $C(q)$.

Por lo tanto

$$\langle DJ(q), r \rangle = \int_{\Gamma_l} \left(D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right) D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(r) ds = \int_{\Gamma_m} \phi r ds \quad (3.19)$$

Algoritmo de búsqueda del mínimo usando gradiente conjugado

Conociendo explícitamente el valor de $\langle DJ(q), r \rangle$ se puede construir el método del gradiente para el funcional J .

Si se conoce $q_k \in L^2(\Gamma_m)$, el siguiente flujo $q_{k+1} \in L^2(\Gamma_m)$ es

$$q_{k+1} = q_k + \varepsilon_k d_k$$

con $d_k = -DJ(q) = -\phi|_{\Gamma_m}$, entonces

$$J(q_{k+1}) = J(q_k + \varepsilon_k d_k) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k + \varepsilon_k d_k) - q_l \right|^2 ds$$

$$J(q_{k+1}) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon_k \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right|^2 ds$$

Se sabe que $\exists \varepsilon_k > 0$ t.q. $J(q_{k+1}) < J(q_k)$ si $DJ(q) \neq 0$, por lo que hay que buscar el óptimo, es decir, que minimice:

$$f(\varepsilon) := \frac{1}{2} \int_{\Gamma_l} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right|^2 ds.$$

Como f es cuadrática, para encontrar el mínimo de f sólo hay que derivar e igualar a cero.

$$f'(\varepsilon_k) = \int_{\Gamma_l} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon_k \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right) \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) ds = 0$$

Por lo tanto

$$\varepsilon_k = - \frac{\int_{\Gamma_l} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) - q_l \right) \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) ds}{\int_{\Gamma_l} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right)^2 ds}$$

Además si se considera que $\delta C_q(d_k) = C(d_k) - C(0)$ entonces

$$\varepsilon_k = - \frac{\int_{\Gamma_l} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) - q_l \right) \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) ds}{\left\| \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) \right\|_{L^2(\Gamma_l)}^2}$$

Por lo que el algoritmo para encontrar una sucesión $\{q_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subseteq L^2(\Gamma_m)$ t.q.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = q^*,$$

donde q^* es solución de (3.9) se puede escribir de la siguiente manera:

1. Escoger $q_0 \in L^2(\Gamma_m)$.

2. Resolver

$$\begin{cases} \nabla C(q_k) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C(q_k)) & \text{en } \Omega \\ C(q_k) = C_l & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) = q_k & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.20)$$

usando $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_l}$ calcular $J(q_k)$ si $J(q_k) < \eta$, detener el algoritmo. Donde $\eta > 0$ criterio de parada.

3. Resolver el problema dual

$$\begin{cases} \vec{v} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi_k) = 0 & \text{en } \Omega \\ \phi_k = q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \phi_k}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.21)$$

4. Resolver

$$\begin{cases} \nabla \varphi_k \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) & \text{en } \Omega \\ \varphi_k = 0 & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \varphi_k}{\partial n} = -\phi_k & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (3.22)$$

usar $D_d \frac{\partial \varphi_k}{\partial n} |_{\Gamma_l}$ y $\phi_k |_{\Gamma_m}$ para calcular ε_k , definir $q_{k+1} = q_k - \varepsilon_k \phi_k |_{\Gamma_m}$ y volver a 2.

Capítulo 4

Pruebas numéricas para el problema estacionario

Luego de encontrar el algoritmo es necesario estudiar como funciona éste mediante un ensayo numérico. En este capítulo se mostraran algunas pruebas realizadas para el caso estacionario.

El dominio utilizado para esta prueba es una semicircunferencia con centro en el origen y de radio 100 m, donde la parte curva representa el muro (Γ_m) y la parte recta (Γ_l) es el lugar donde se hacen las mediciones, ver figura (4.1) :

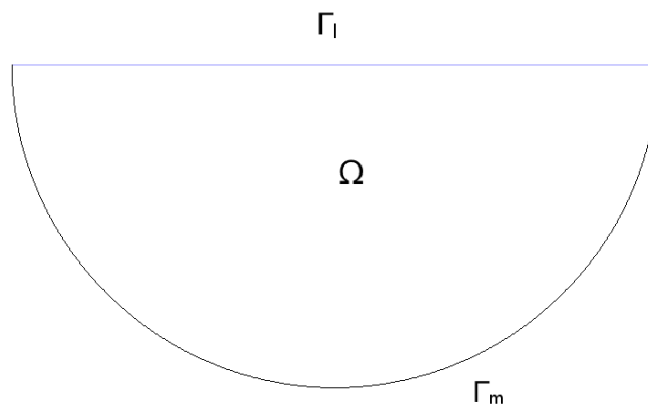


Figura 4.1: Dominio Ω

La malla es cuadriculada y refinada entorno al borde. Es de gran importancia este refinamiento en las cercanías del borde puesto que mejora la aproximación del valor del flujo en los borde. Ver figura (4.2):

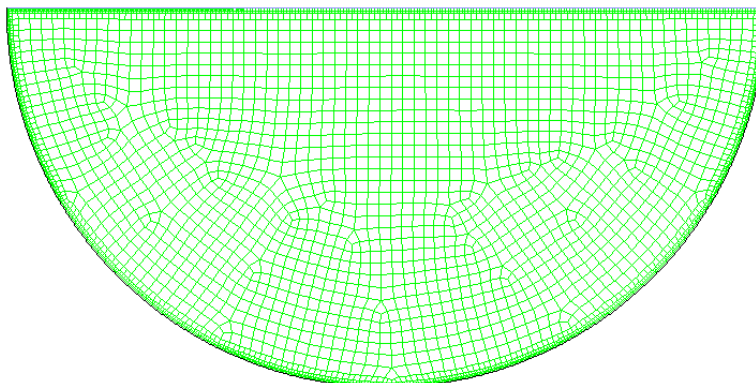


Figura 4.2: Malla en Ω

4.1. Problema directo

En esta prueba el problema directo es el siguiente: El sistema para la velocidad:

$$\begin{cases} (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) & = & 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{v} & = & 0 & \text{en } \Omega \\ \vec{v}(x, y) & = & \frac{1}{500}(x^2, -5x) & \text{sobre } \Gamma_l \\ \vec{v}(x, y) & = & (0, 0) & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (4.1)$$

y para la concentración:

$$\begin{cases} \nabla C \cdot \vec{v} & = & \nabla \cdot (D_d \nabla C) & \text{en } \Omega \\ C(x, y) & = & 200 - x & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(x, y) & = & 500 & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (4.2)$$

Se resuelven los sistemas y se exporta en dos archivos por separados uno para Γ_l y otro para Γ_m los datos de velocidad (\vec{v}), concentración (C) y flujo ($D_d \frac{\partial C}{\partial n}$). Con los datos en Γ_l se intenta recuperar, usando el algoritmo visto en el capítulo II, los datos en Γ_m . En particular el valor de $D_d \frac{\partial C}{\partial n}$.

La figura (4.3) muestra la solución de la velocidad del sistema (4.1) y la solución de la concentración del sistema (4.2).

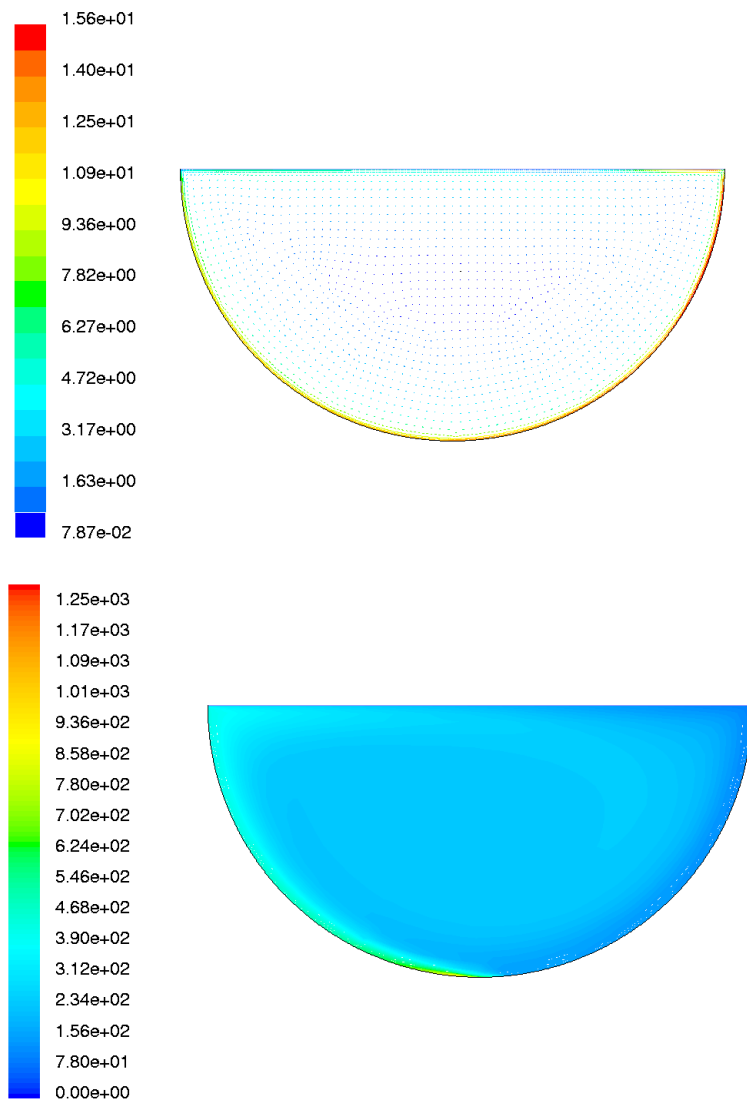


Figura 4.3: Arriba velocidad en Ω , abajo concentración en Ω

4.2. Resultados numéricos

Hay varios aspectos que hay que mirar para analizar los resultados, como por ejemplo el comportamiento del funcional J , el error entre el flujo medido en Γ_l (q_l) y el flujo al cual converge el algoritmo ($D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_l}$) y el error entre el flujo medido en Γ_m y el flujo al cual converge el algoritmo.

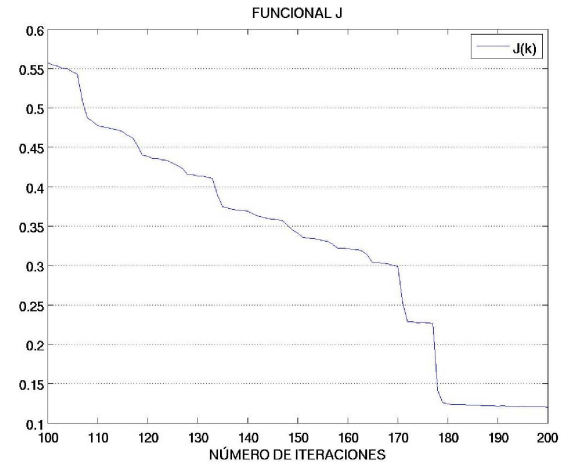
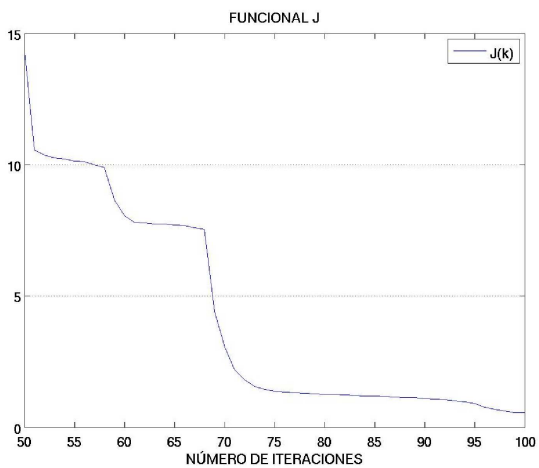
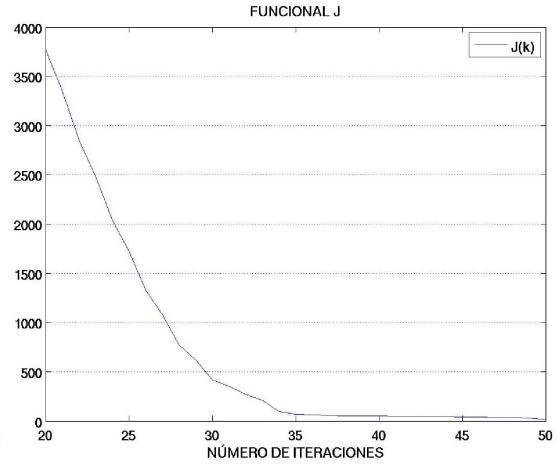
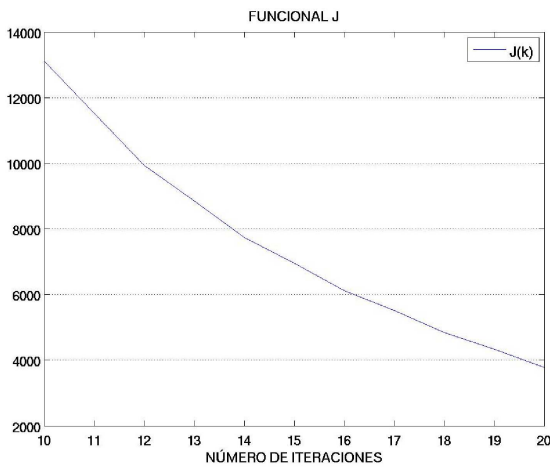
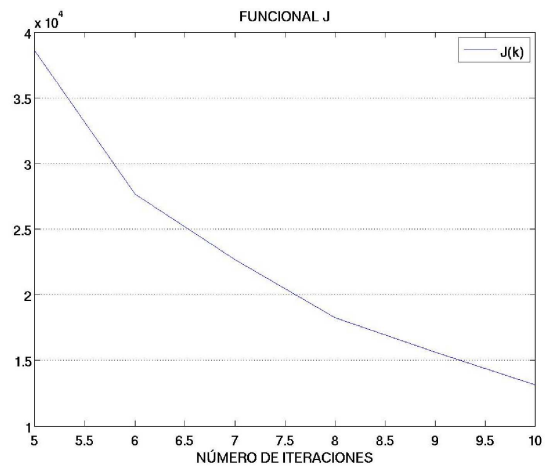
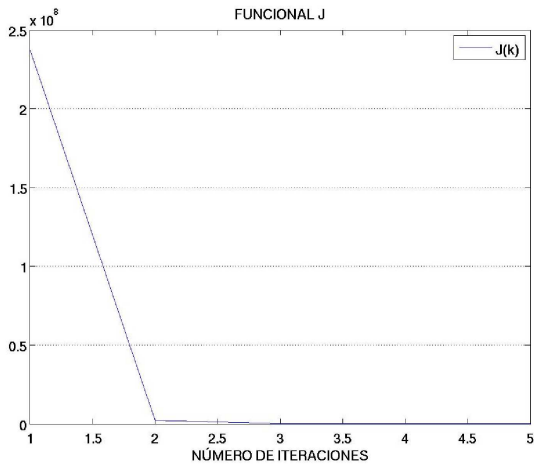
4.2.1. Funcional J

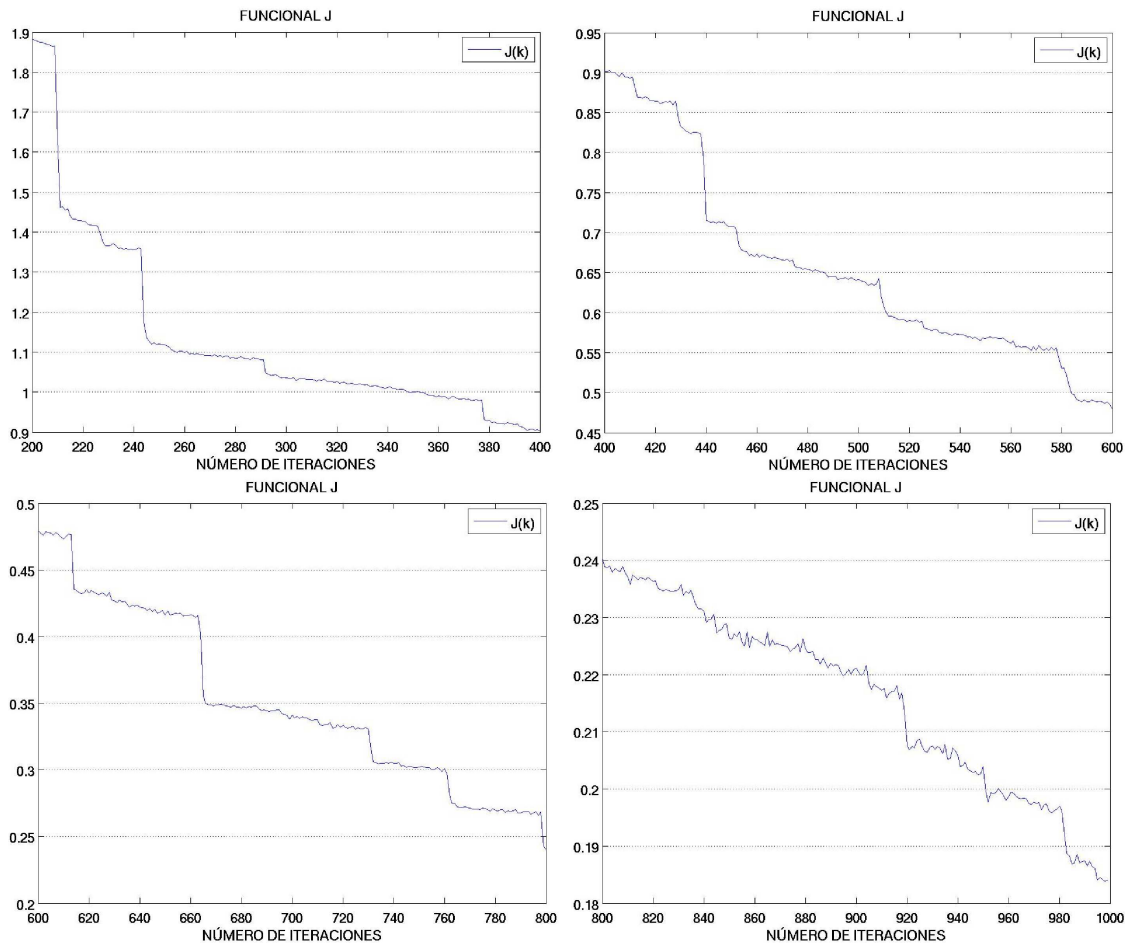
En los siguientes gráficos se ve puede ver el comportamiento del funcional J que comienza en $2,4 \times 10^8$, para disminuir luego de 1000 iteraciones hasta un valor cercano a $1,17 \times 10^{-2}$. En la siguiente tabla queda claro el comportamiento del algoritmo de máximo descenso, comienza a descender velozmente, incluso en menos de 100 iteraciones ya se encuentra en menos de $10,0 \times 10^{-1}$. Pero luego la velocidad de convergencia disminuye, esto se debe a que, al encontrarse cerca del mínimo, el paso es cada vez más pequeño.

Iteración	valor J	Iteración	valor J	Iteración	valor J
1	2.3742e+08	10	1.3124e+04	100	5.5726e-01
2	2.2956e+06	20	3.7754e+03	200	1.2023e-01
3	3.2643e+05	30	4.1895e+02	300	6.6221e-02
4	6.3535e+04	40	4.9980e+01	400	5.7603e-02
5	3.8595e+04	50	1.4398e+01	500	4.0990e-02
6	2.7641e+04	60	8.0599e+00	600	3.0647e-02
7	2.2666e+04	70	3.0687e+00	700	2.1782e-02
8	1.8234e+04	80	1.2637e+00	800	1.5367e-02
9	1.5631e+04	90	1.1047e+00	900	1.4127e-02
10	1.3124e+04	100	5.5726e-01	1000	1.1738e-02

Al mirar los datos de la tabla se podría suponer que el funcional siempre baja, lo que sucede es que siempre existe una tendencia a la baja, ya entre las iteraciones 210 y 220 (ver los siguientes gráficos que muestran el comportamiento de J) se puede ver que el funcional sube un poco o se mantiene para luego descender bruscamente. Estas alzas en el valor de J son causados por errores numéricos cuando se pasa al siguiente paso de la iteración. Lo importante es notar que el algoritmo siempre busca el valor mínimo.

Capítulo 4: Pruebas numéricas para el problema estacionario

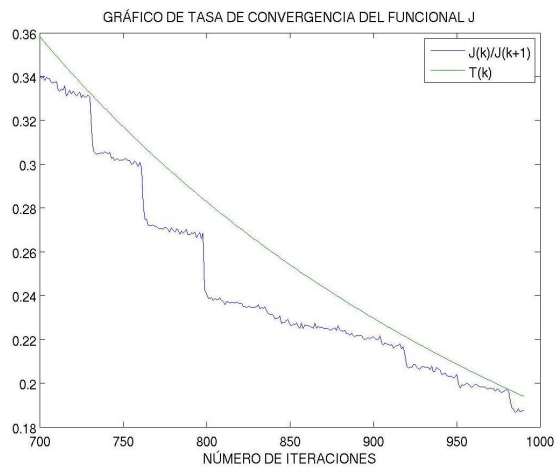
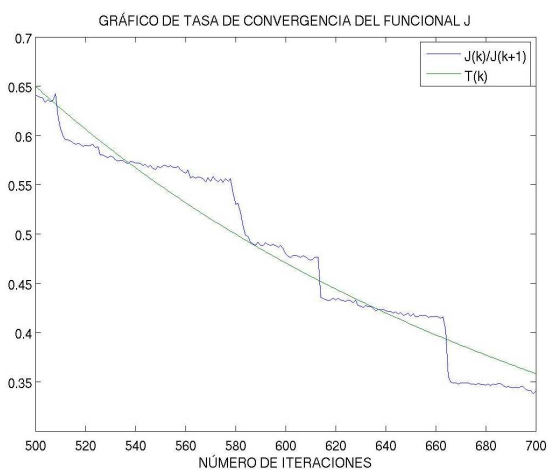
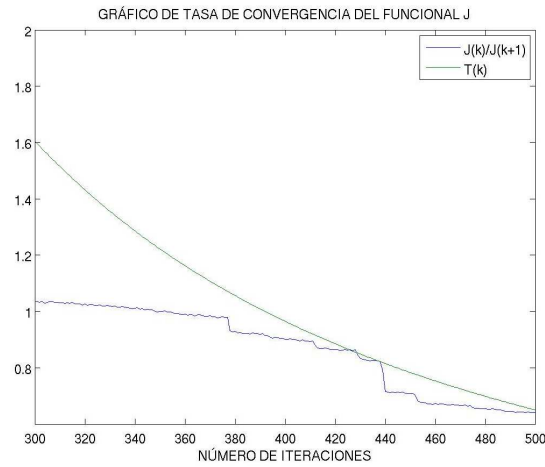
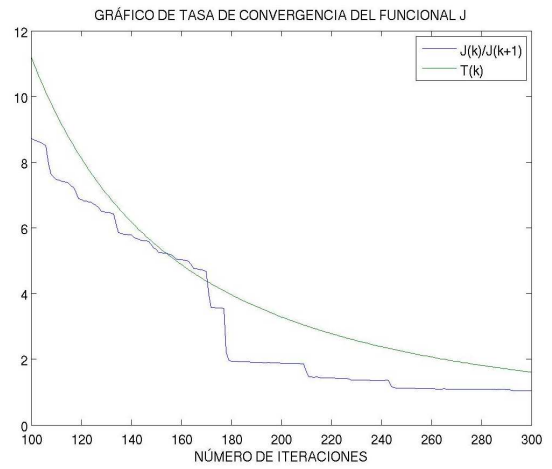
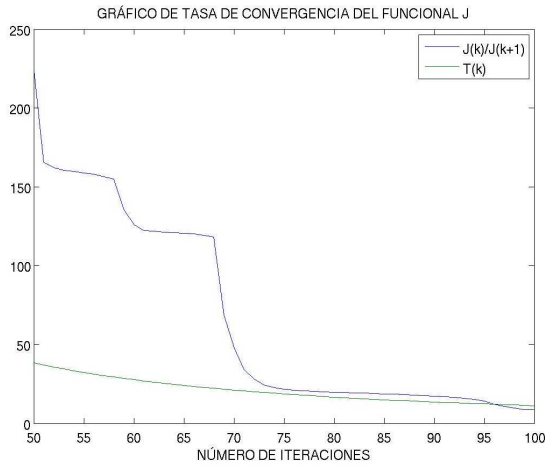




Tasa de convergencia de J

Cuando se estudia la tasa de convergencia se estudia el comportamiento de la función $W(k) = \frac{J(k)}{J(k+1)}$, el objetivo es poder encontrar el orden de la función. Realizando pruebas numéricas se llegó a la conclusión de que la función $W(k)$ se comporta como $\frac{B}{x^\alpha}$ donde $B > 0$ y $\alpha \in [1, 2]$, usando un método simple de interpolación se llegó a que $B = 77086$ y $\alpha = 1,88$. En la siguiente figura aparecen los gráficos con las funciones $W(k)$ y $T(k) = \frac{77086}{k^{1,88}}$.

Capítulo 4: Pruebas numéricas para el problema estacionario



4.2.2. Error en Γ_l

Una forma análoga de estudiar el comportamiento de J es estudiar la convergencia de $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en todo Γ_l , recordar que J es la norma en $L^2(\Gamma_l)$ de esta función. Como es de esperar, la función $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ converge a cero si J tiende a cero.

Lo interesante de analizar es donde se concentra el error. Se puede observar que el error se encuentra concentrado en el sector izquierdo, es decir desde aproximadamente $x < 0$. Esto es causado por el comportamiento del viento, como se ve en la figura 4.3 el viento se lleva gran parte de las partículas que provienen de Γ_m por el borde izquierdo, por lo que en lado derecho no existe o es poca la información que se puede obtener de las partículas provenientes de Γ_m . En otras palabras el valor medido en el sector derecho casi no depende del valor del flujo en Γ_m , por lo que se va a mantener practicamente constante a través de las iteraciones con valores cercanos a q_l .

Los errores en la intersección de Γ_l y Γ_m son atribuibles a un problema de continuidad de las condiciones de borde, puesto que en Γ_l se entrega una condición de valor de la concentración y en Γ_m una condición de flujo.

En las figuras 4.4 y 4.5 se los gráficos del flujo para determinadas iteraciones.

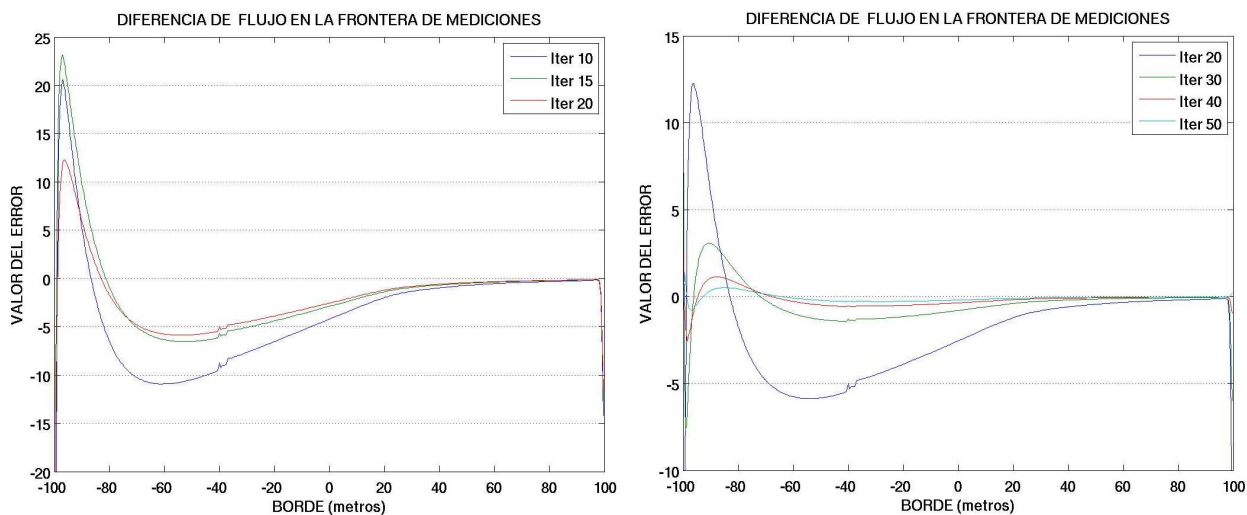


Figura 4.4: Valor del Error $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en Γ_l .

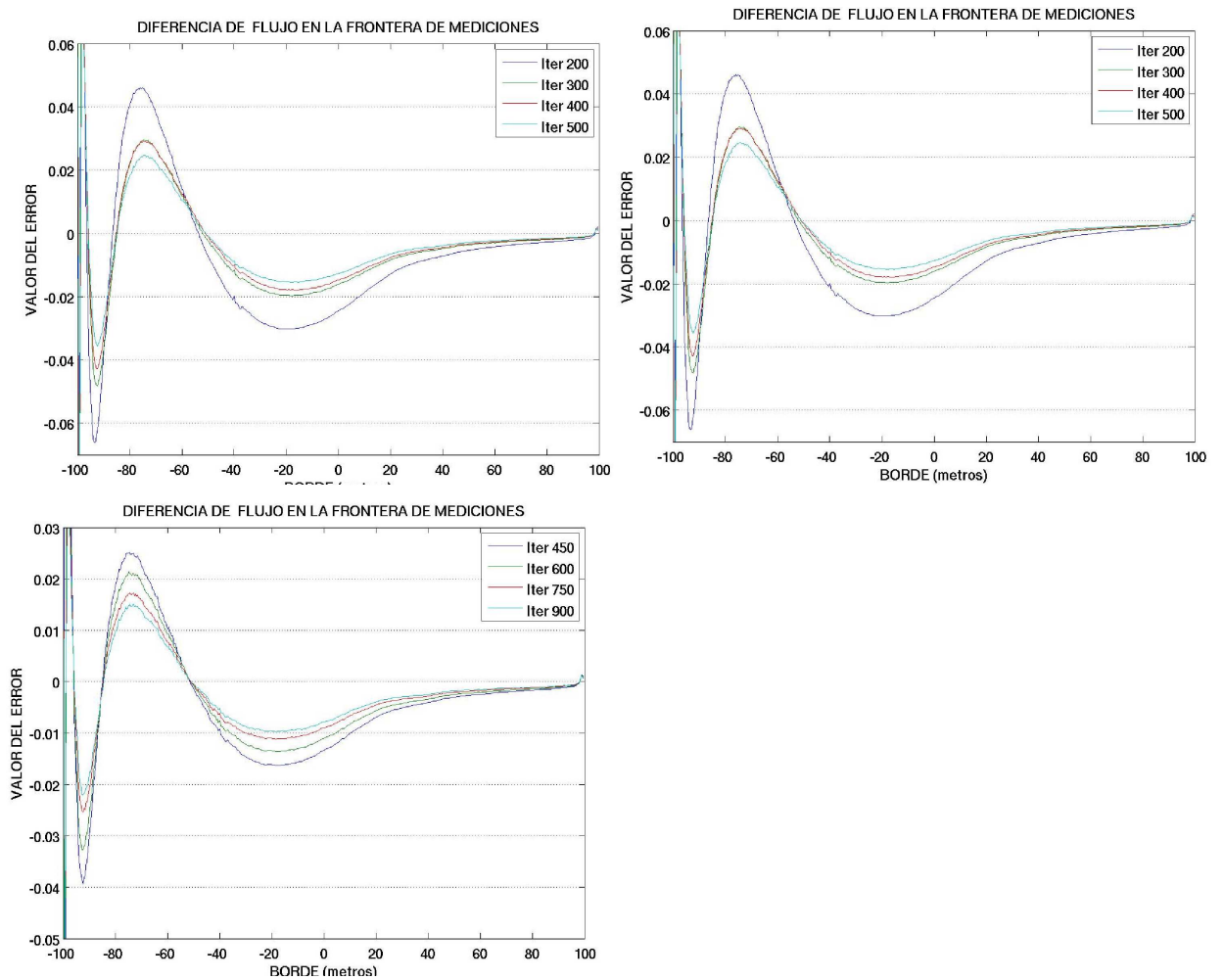


Figura 4.5: Valor del Error $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en Γ_l .

4.2.3. Estimación del flujo en Γ_m

Luego de analizar el compartamiento en Γ_l , hay que ver si efectivamente se puede obtener una buena estimación del flujo en Γ_m . En los siguientes gráficos se puede apreciar el acercamiento al valor del flujo entregado por el algoritmo al valor entregado en el problema directo (ecc. 4.2).

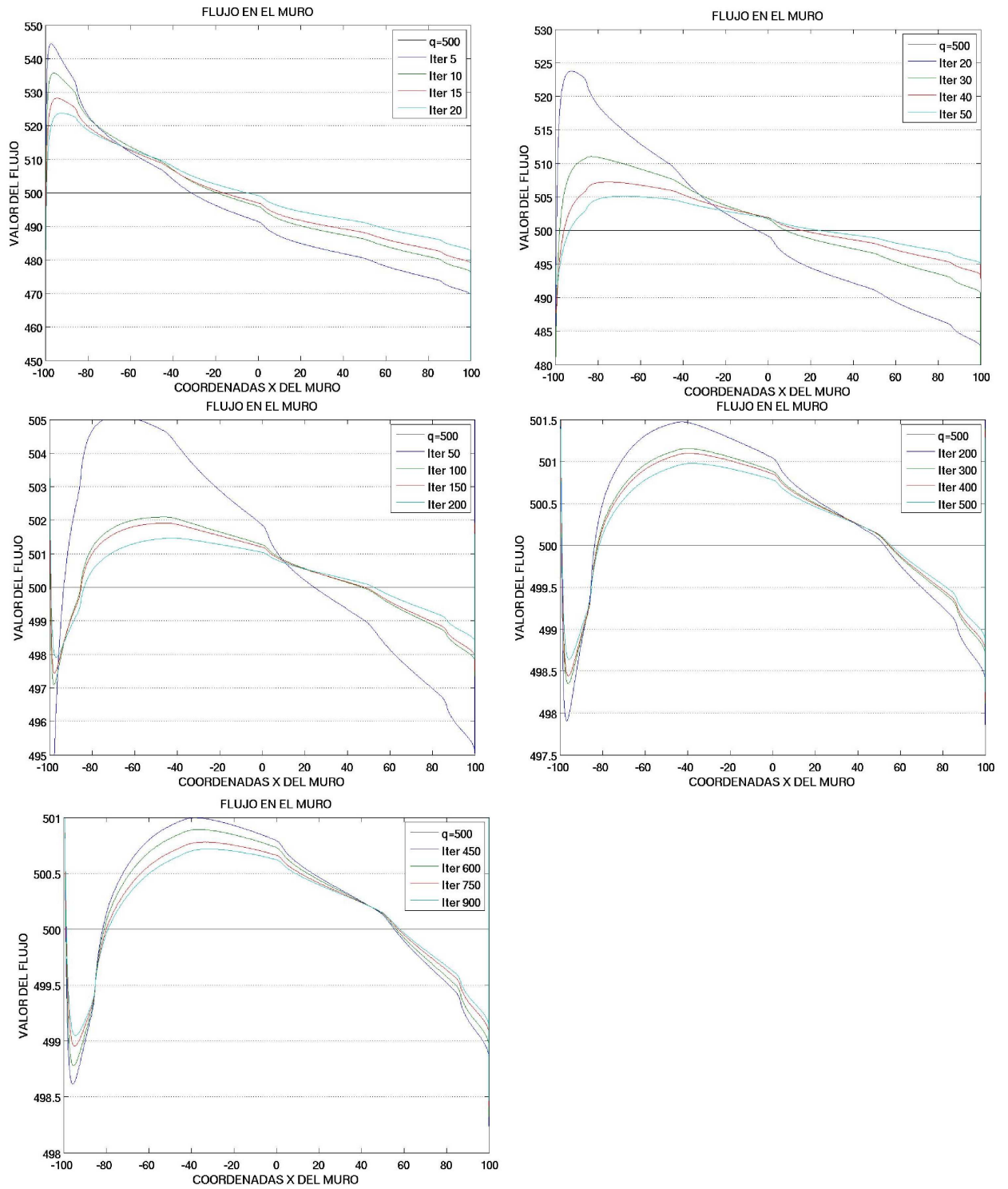


Figura 4.6: Valor del flujo q_k en Γ_m .

Capítulo 5

Estudio del problema no estacionario

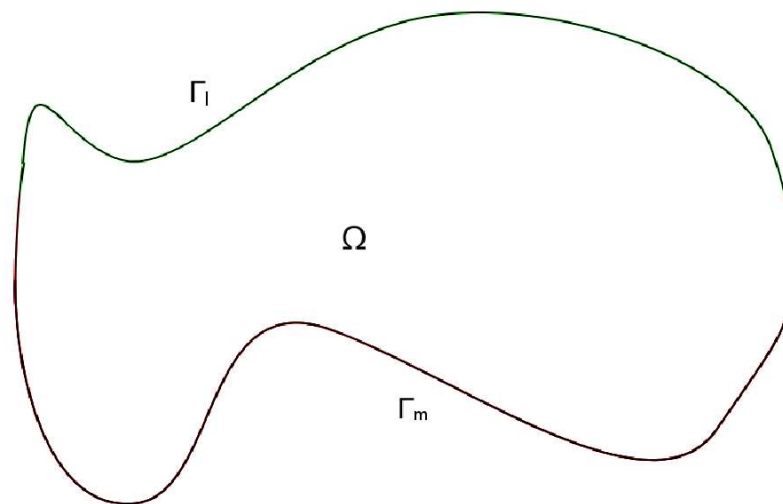


Figura 5.1: Dominio Ω

El caso en evolución es bastante similar en lo que se refiere a la teoría e implementación del caso estacionario, por lo que cuando lo amerite se hará referencia a este caso para las demostraciones del caso no estacionario y algunas secciones sólo son un reescribimiento de la parte anterior.

5.1. Simplificación del problema

Ahora, se estudiará el caso no estacionario, por lo que ahora se consideran sólo la siguiente hipótesis.

- (H1) Como se verá más adelante en la motivación del problema se verá que el acoplamiento de las partículas con el fluido es muy bajo por lo que se supondrá que $\vec{u} = \vec{v}$ y que $\frac{\alpha_d}{\alpha_c} \approx 0$.

5.1.1. Problema no estacionario no acoplados

En esta sección se supondrá cierta la hipótesis (H1) y además se considerará que los efectos de la gravedad son despreciables. Por lo que el sistema de ecuaciones para la velocidad es:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) & = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot \vec{v} & = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \vec{v}(x, y) & = \vec{v}_l(x, y) \quad \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ \vec{v}(x, y) & = (0, 0) \quad \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \\ \vec{v}(0, \vec{x}) & = \vec{v}_{ini}(\vec{x}) \quad \text{en } \Omega \end{array} \right. \quad (5.1)$$

El sistema de ecuaciones del problema directo no estacionario para la concentración de material particulado es:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t} C - \nabla \cdot (D_d \nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C & = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(\vec{v}, 0) & = C_{ini} \quad \text{en } \Omega \\ C & = C_0 \quad \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n} & = q_m^* \quad \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.2)$$

Con $D_d = D_d(\vec{x}, t)$, $C = C(\vec{x}, t)$ etc. donde $(\vec{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$. Es importante hacer una observación sobre la densidad ρ , que como se vio en el capítulo 1 $\rho = \alpha_d \rho_d + \alpha_c \rho_c$, pero se está haciendo la suposición de que $\alpha_c \approx 1$, entonces se asume que $\rho_m = \rho_c$ por lo que los sistemas (5.1) y (5.2) son no acoplados.

5.1.2. Problema inverso

El objetivo es poder conocer el valor del flujo q_m^* en $\Gamma_m \times (0, T)$ a partir de mediciones sobre $\Gamma_l \times (0, T)$. Entonces, se supone conocidos sobre Γ_l :

$$\begin{aligned}
 C(\vec{x}, t) &= C_l(\vec{x}, t) \\
 D_d(\vec{x}, t) \frac{\partial C}{\partial n}(\vec{x}, t) &= q_l(\vec{x}, t) \\
 \vec{v}(\vec{x}, t) &= \vec{v}_l(\vec{x}, t)
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Recordar que el subíndice l indica mediciones sobre Γ_l . Por lo tanto el problema se puede pensar como el siguiente problema de optimización:

Encontrar $q_m^* \in L^2(\Gamma_m) \times L^2((0, T))$ tal que $C(q_m^*)$ resuelva

$$\begin{cases}
 \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (D_d \nabla C) + \vec{v} \cdot \text{grad } C &= 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\
 C(0) &= C_{ini} & \text{en } \Omega \\
 C &= C_l & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\
 D_d \frac{\partial C}{\partial n} &= q_m^* & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T)
 \end{cases} \tag{5.4}$$

y t.q. C satisfaga $D_d \frac{\partial C}{\partial n} = q_l$ en $\Gamma_l \times (0, T)$.

5.1.3. Funcional J_T y sus propiedades

Para encontrar este q_m^* se intenta encontrar $q_m \in L^2(\Gamma_m) \times L^2((0, T))$ tal que minimice el siguiente funcional:

$$J_T(q) := \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Gamma_l} \left| D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right|^2 ds dt$$

entonces,

$$J_T(q_m^*) := \min_{q \in L^2(\Gamma_m) \times L^2((0, T))} J_T(q)$$

Y al igual que en el caso estacionario se quiere buscar el mínimo del funcional J_T , para ello existen varias técnicas dependiendo de las propiedades de J_T , como se mostrará J_T es convexa por lo que para estos casos es natural usar el método de gradiente conjugado. Para demostrar la convexidad de J , primero, se verá el comportamiento de C en función de q .

Estudio de la linealidad de $C(q)$

Al observar el sistema (5.2) y suponiendo que $C_l \equiv 0$, es claro que C es lineal con respecto a q , i.e. $C(q + \lambda r) = C(q) + \lambda C(r)$ con $q, r \in L^2(\Gamma_l) \times (0, T)$ y $\lambda \in \mathbb{R}$. El problema es si $C_l \neq 0$, puesto que se pierde la linealidad con respecto a q , pero esta no linealidad de $C(q)$ tiene las propiedades suficientes para demostrar la convexidad de J . En efecto, si se considera $C(q)$ y $C(r)$ soluciones de (5.2) con condición de borde Neumann q y r sobre Γ_l respectivamente.

Al sumar ambas ecuaciones se obtiene que $C(q) + C(r)$ es solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(C(q)+C(r))}{\partial t} + \nabla(C(q) + C(r)) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla(C(q) + C(r))) \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(q) + C(r) = 2C_{ini} \quad \text{en } \Omega \\ C(q) + C(r) = 2C_l \quad \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial}{\partial n}(C(q) + C(r)) = q + r \quad \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Con lo que se puede concluir, dado la unicidad del sistema, que $C(q + r) = C(q) + C(r) - C(0)$. Ahora si comparamos el sistema que satisface $C(\lambda r)$ con el que satisface $\lambda C(r)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t}(\lambda r) + \nabla C(\lambda r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C(\lambda r)) \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(\lambda r) = C_l \quad \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ C(\lambda r)(\vec{x}, 0) = C_{ini} \quad \text{en } \Omega \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(\lambda r) = \lambda r \quad \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \frac{\partial C}{\partial t}(r) + \nabla \lambda C(r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \lambda C(r)) \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \lambda C(r)(\vec{x}, 0) = \lambda C_{ini} \quad \text{en } \Omega \\ \lambda C(r) = \lambda C_l \quad \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial \lambda C}{\partial n}(r) = \lambda r \quad \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.7)$$

Se llega a la conclusión que $C(\lambda r) = \lambda C(r) - (\lambda - 1)C(0)$.

Por lo tanto

$$C(q + \lambda r) = C(q) + \lambda(C(r) - C(0)) \quad (5.8)$$

Convexidad de J_T

Debido a que C para el caso no estacionario tiene las mismas propiedades con respecto a q que el caso estacionario, la convexidad de J_T se demuestra igual que en capítulo II y se usa el mismo argumento para mostrar que q_m^* es el único valor que hace nula a J_T .

5.2. Método del Gradiente Conjugado

El cálculo de la derivada de Gateaux de J_T como del algoritmo es análoga al caso estacionario, por lo que, en esta sección, se reducirán los cálculos.

5.2.1. Derivada de Gateaux de J_T

La derivada de Gateaux se define como

$$\langle DJ_T(q), r \rangle := \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{J_T(q + \eta r) - J_T(q)}{\eta},$$

para reducir nomenclatura se define también

$$\delta C_q(r) := \langle DC(q), r \rangle.$$

Entonces,

$$\langle DJ_T(q), r \rangle = \int_0^T \int_{\Gamma_l} (D_d \frac{\partial C(q)}{\partial n} - q_l) D_d \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds dt.$$

Pero el objetivo es poder encontrar $DJ_T(q)$ explícitamente, es decir encontrar una expresión de la forma

$$\langle DJ_T(q), r \rangle = \int_0^T \int_{\Gamma_m} \phi r ds dt,$$

donde $DJ_T(q) := \phi|_{\Gamma_m}$ y ϕ es una función a encontrar.

A continuación se buscan condiciones sobre ϕ para que se cumpla esta igualdad.

5.2.2. Problema dual

Para encontrar condiciones sobre ϕ , primero se debe identificar el sistema que satisface $\delta C_q(r)$, pero esto no es difícil de obtener teniendo claro que $\delta C_q(r) = C(r) - C(0)$ (ver 5.5).

Por esto el sistema que satisface $\delta C_q(r)$ es

$$\begin{cases} \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial t} + \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \delta C_q(r)(\vec{x}, 0) = 0 & \text{en } \Omega \\ \delta C_q(r) = 0 & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} = r & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (5.9)$$

Sea ahora $\phi \in H^1(\Omega) \times L^2((0, T))$, entonces si la primera ecuación de (5.9) se multiplica por ϕ y luego se integra en todo Ω y se integra también de 0 a T , se obtiene

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left(\phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial t} + \phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} - \phi \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) \right) dx dt = 0 \quad (5.10)$$

Aplicando Fubini e integrando por partes el primer término:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial t} dx dt = \int_{\Omega} \int_0^T \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial t} dt dx$$

$$= - \int_{\Omega} \int_0^T \delta C_q(r) \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dx + \int_{\Omega} (\phi(T) \delta C_q(r)(T) - \phi(0) \delta C_q(r)(0)) dx$$

Pero por la condición inicial de $\delta C_q(r) = 0$, la expresión se reduce a

$$= \int_{\Omega} \phi(T) \delta C_q(r)(T) dx - \int_0^T \int_{\Omega} \delta C_q(r) \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dt$$

Los otros términos quedan:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \phi \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} dx dt = - \int_0^T \int_{\Omega} \delta C_q(r) \vec{v} \cdot \nabla \phi dx dt$$

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \phi \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) dx dt &= \int_0^T \int_{\Gamma_l} D_d \phi \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} ds dt - \int_0^T \int_{\Gamma_m} \left(D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} \delta C_q(r) - \phi \right) ds dt \\ &+ \int_0^T \int_{\Omega} \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) \delta C_q(r) dx dt \end{aligned}$$

Reemplazando estas identidades en la ecuación (5.10)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \phi(T) \delta C_q(r)(T) dx - \int_0^T \int_{\Omega} \delta C_q(r) \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) \right) dx dt \\ - \int_0^T \int_{\Gamma_l} D_d \frac{\partial \delta C_q(r)}{\partial n} \phi ds dt + \int_0^T \int_{\Gamma_m} \left(D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} \delta C_q(r) - \phi r \right) ds dt = 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

Si ahora $\phi \in H^1(\Omega)$ le pedimos que satisfaga el sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi) &= 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \phi(\vec{x}, T) &= 0 & \text{en } \Omega \\ \phi &= q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0 & \text{sobre } \Gamma_m \end{cases} \quad (5.12)$$

Entonces, la ecuación (5.11) se reduce a

$$\int_0^T \int_{\Gamma_l} \left(D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right) D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(r) ds dt = \int_0^T \int_{\Gamma_m} \phi r ds dt \quad (5.13)$$

Por lo tanto

$$\langle DJ_T(q), r \rangle = \int_0^T \int_{\Gamma_l} \left(D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q) - q_l \right) D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(r) ds dt = \int_0^T \int_{\Gamma_m} \phi r ds dt \quad (5.14)$$

5.2.3. Algoritmo de búsqueda del mínimo usando gradiente conjugado

Conociendo explícitamente el valor de $\langle DJ_T(q), r \rangle$ se puede construir el método del gradiente para el funcional J_T . Si se conoce $q_k \in L^2(\Gamma_m) \times (0, T)$, el siguiente flujo $q_{k+1} \in L^2(\Gamma_m) \times (0, T)$ es

En este caso el paso óptimo es:

$$\varepsilon_k = - \frac{\int_0^T \int_{\Gamma_l} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) - q_l \right) \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) ds dt}{\left\| \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) \right\|_{L^2(\Gamma_l) \times L^2((0, T))}^2}$$

Por lo que el algoritmo para encontrar una sucesión $\{q_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subseteq L^2(\Gamma_m)$ t.q.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = q^*,$$

donde q^* es solución de (5.4) se puede escribir de la siguiente manera:

1. Escoger $q_0 \in L^2(\Gamma_m) \times L^2((0, T))$.
2. Resolver

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t}(C_k) + \nabla C(q_k) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C(q_k)) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(q_k)(\vec{x}, 0) = C_{ini} & \text{en } \Omega \\ C(q_k) = C_l & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) = q_k & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{cases} \quad (5.15)$$

Usando $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_l \times (0, T)}$ calcular $J_T(q_k)$ si $J_T(q_k) < \eta$, detener el algoritmo. Donde $\eta > 0$ es el criterio de parada.

3. Resolver el problema dual

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot (D_d \nabla \phi_k) = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \phi_k(\vec{x}, T) = 0 & \text{en } \Omega \\ \phi_k = q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial \phi_k}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{cases} \quad (5.16)$$

4. Resolver

$$\begin{cases} \frac{\partial \delta C_q}{\partial t} + \nabla \delta C_q \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q) & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \delta C_q(\vec{x}, 0) = C_{ini} & \text{en } \Omega \\ \delta C_q = 0 & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n} = -\phi_k & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{cases} \quad (5.17)$$

usar $\delta C_q |_{\Gamma_l \times (0, T)}$ y $\phi_k |_{\Gamma_m \times (0, T)}$ para calcular ε_k , definir $q_{k+1} = q_k - \varepsilon_k \phi_k |_{\Gamma_m}$ y volver a 2.

Notar que el sistema (5.16), el problema dual, es un problema retrógrado, por lo que puede traer grandes problemas al momento de la implementación del algoritmo. Para evitar esta dificultad se usa el cambio de variable $\hat{\phi}(t) = \phi(T - t)$, $\forall t \in (0, T)$. Con esto el sistema (5.16) queda:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{\partial \hat{\phi}_k}{\partial t} + \vec{v}(T-t) \cdot \nabla \hat{\phi}_k + \nabla \cdot (D_d(T-t) \nabla \hat{\phi}_k) & = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \hat{\phi}_k(\vec{x}, 0) & = 0 & \text{en } \Omega \\ \hat{\phi}_k & = (q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k))(T-t) & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ D_d(T-t) \frac{\partial \hat{\phi}_k}{\partial n} & = 0 & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.18)$$

Capítulo 6

Pruebas numéricas para el problema no estacionario

Luego de encontrar el algoritmo es necesario estudiar como funciona este mediante un ensayo numérico. En este capítulo se mostrará algunas pruebas realizadas para el caso en evolución. Se verá que la dependencia de la convergencia con respecto a la cantidad de pasos de tiempo es significativa, para eso en los distintos casos se tomó el mismo problema, es decir, mismas condiciones de borde e inicial, pero con $T=10s$, $T=20s$, $T=30s$ y $T=50s$.

El dominio y malla utilizados para esta prueba es el mismo de la pruebas estacionarias, ver figura (4.1).

En estas prueba el problema directo es el siguiente:

El sistema para la velocidad, con difusión constante $D_d = 100$ y densidad $\rho_m = 1$:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) & = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \nabla \cdot \vec{v} & = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \vec{v}(x, y) & = \frac{1}{1000}(x^2, -2x) & \text{sobre } \Gamma_l \times (0, T) \\ \vec{v}(x, y) & = (0, 0) & \text{sobre } \Gamma_m \times (0, T) \\ \vec{v}(0, \vec{x}) & = \vec{0} & \text{en } \Omega \end{array} \right. \quad (6.1)$$

y para la concentración:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(C) + \nabla C \cdot \vec{v} & = \nabla \cdot (D_d \nabla C) & \text{en } \Omega \\ C(x, y) & = 400 - x & \text{sobre } \Gamma_l \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(x, y) & = 1000 & \text{sobre } \Gamma_m \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Se resuelven los sistemas y se exporta en dos archivos por separados uno para Γ_l y otro para Γ_m los

datos de velocidad (\vec{v}), concentración (C) y flujo ($D_d \frac{\partial C}{\partial n}$). Con los datos en Γ_l se intenta recuperar, usando el algoritmo visto en el capítulo IV, los datos en Γ_m . En particular el valor de $D_d \frac{\partial C}{\partial n}$.

6.1. 1 paso, $T=10s$

A continuación los gráficos de las soluciones de la velocidad (ec. (6.1)) y de la concentración (ec. (6.2)) ver figura (6.1).

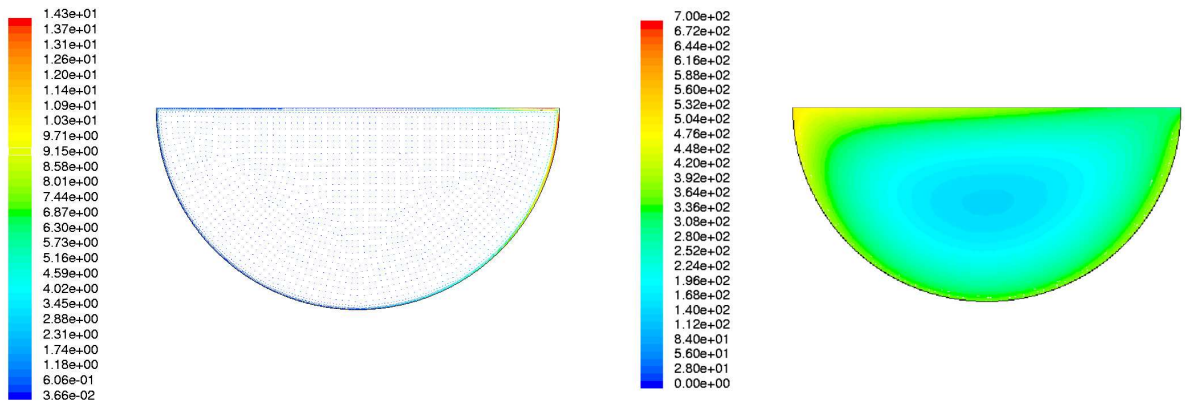


Figura 6.1: Izquierda velocidad en Ω , derecha concentración en Ω con $T = 10s$

6.1.1. Resultados numéricos

Los resultados en el caso no estacionario no son tan alentadores como en el caso estacionario. Hay que entender que los problemas en donde se involucra el tiempo son degenerativo, es decir la solución numérica se va alejando de la solución teórica a medida que se avanza en tiempo.

Los valores del flujo del problema directo en Γ_l están entorno a 1000, por lo que si el algoritmo llegase a una solución donde el flujo en ese borde difiere en 50 al del problema directo se considerará aceptable. Esto va a implicar que si el funcional J_T se encuentra entorno a 10^6 se considere como un valor aceptable para detener el algoritmo:

$$2 \cdot J_T(q_k) = \int_0^T \int_{\Gamma_l} \left| q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) \right|^2 ds dt = \int_0^{10} \int_{-100}^{100} 50^2 ds dt = 10 \cdot 200 \cdot 2500 = 5 \cdot 10^6 \quad (6.3)$$

Hay varios aspectos que hay que mirar para analizar los resultados, como por ejemplo el comportamiento del funcional J_T , el error entre el flujo medido en Γ_l (q_l) y el flujo al cual converge el algoritmo ($D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_l}$) y el error entre el flujo medido en Γ_m y el flujo al cual converge el algoritmo.

Funcional J_T

En los siguientes gráficos se ve puede ver el comportamiento del funcional J_T , el cual claramente disminuye pero a una tasa mucho más lenta que para el caso estacionario, de hecho en este ya en la iteración 50 el funcional se encuentra en valor cercano a 10 en cambio en este caso se encuentra alrededor de 10^6 , que por un lado es aceptable, pero queda claro que el algoritmo es mucho más lento en el caso de evolución.

Iteración	valor J	Iteración	valor J	Iteración	valor J
1	5.8090e+08	12	1.3185e+07	32	4.1773e+06
2	1.2612e+08	14	1.1136e+07	34	3.8610e+06
3	6.7009e+07	16	9.5797e+06	36	3.5782e+06
4	4.5730e+07	18	8.3657e+06	38	3.3237e+06
5	3.4302e+07	20	7.3965e+06	40	3.0928e+06
6	2.7889e+07	22	6.6088e+06	42	2.8816e+06
7	2.3517e+07	24	5.9573e+06	44	2.6876e+06
8	2.0325e+07	26	5.4094e+06	46	2.5085e+06
9	1.7990e+07	28	4.9410e+06	48	2.3423e+06
10	1.6026e+07	30	4.5344e+06	50	2.1876e+06

En este caso el funcional, al menos en las primeras 50 iteraciones, siempre disminuye, no será así para distinta cantidad de pasos que mostrarán una dependencia de la cantidad de estos. Las figuras (6.2) y (6.3) muestran los gráficos del funcional.

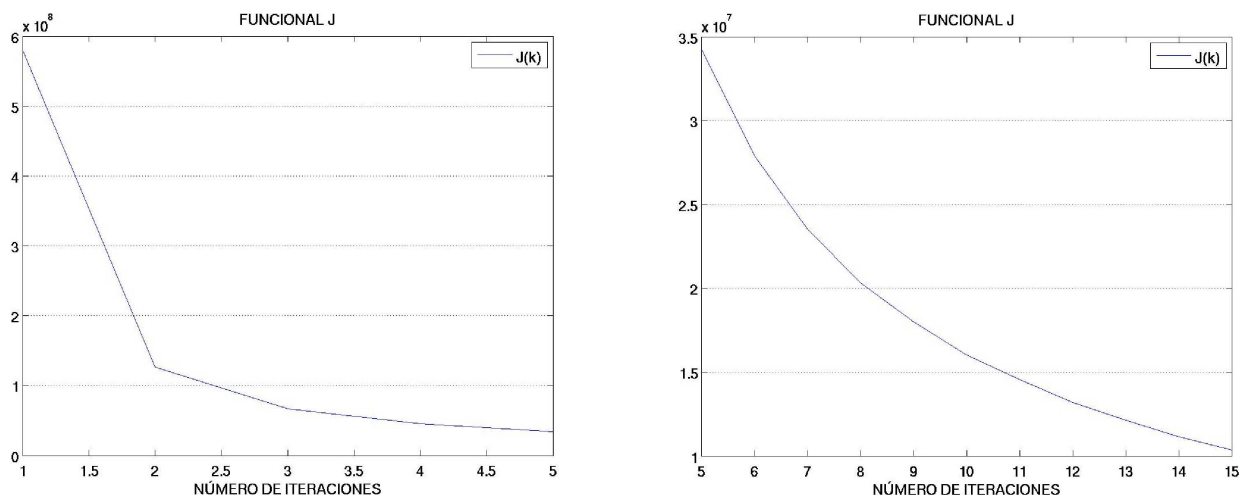


Figura 6.2: Funcional J_T para $T=10s$

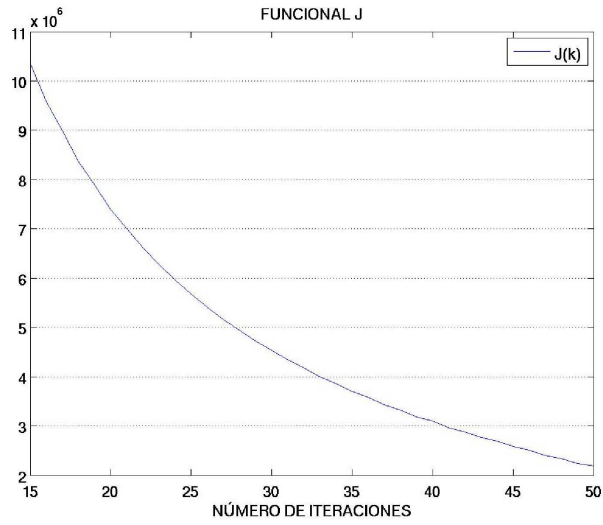
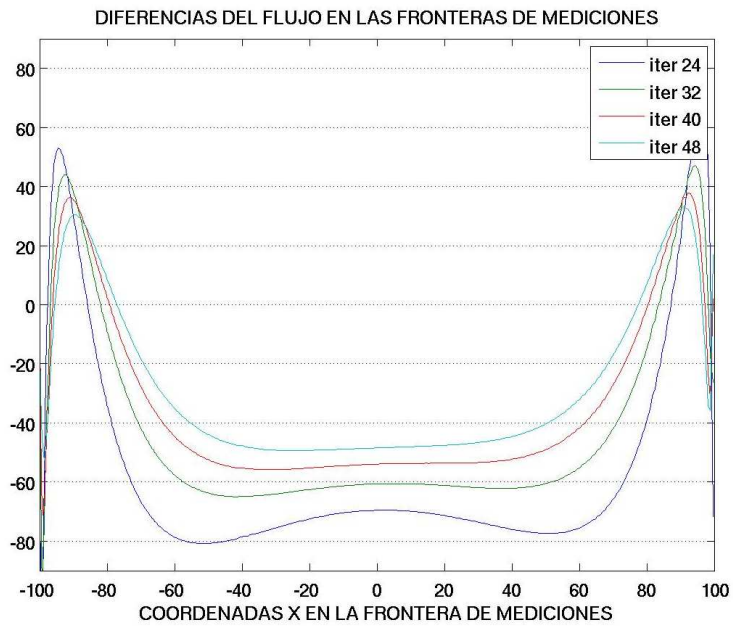


Figura 6.3: Funcional J_T para $T=10s$

Error en Γ_l

Al observar el siguiente gráfico se puede ver claramente como la función $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ converge a cero y que la curva que representa la iteración 50 se encuentra al interior del intervalos $[-50, 50]$.



Estimación del flujo en Γ_m

El gráfico (6.4) muestra que la estimación del flujo en Γ_m no es tan buena, dado que el valor de J_T no es pequeño, lo importante es ver que efectivamente q_k se encuentra en torno a 1000 y que a medida que se itera cada vez se acerca más al valor real 1000.

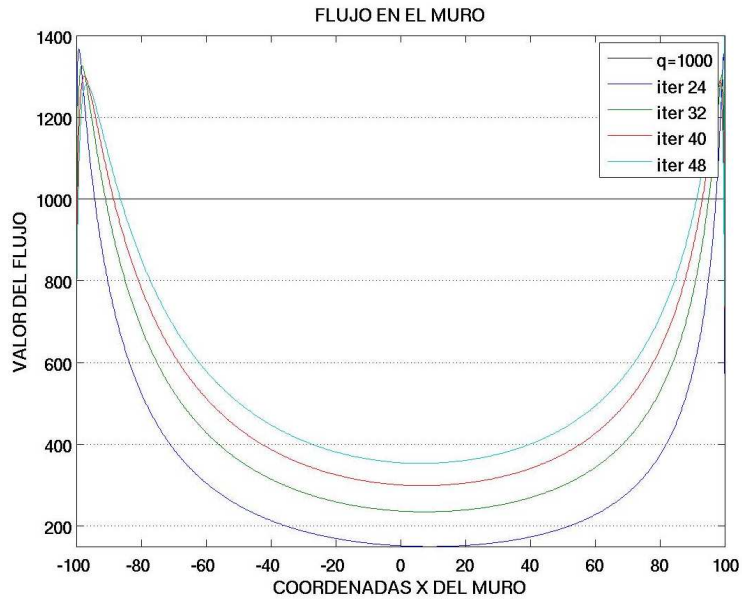


Figura 6.4: Flujo q_k en la coordena x de Γ_m con $T=10s$

La figura (6.5) muestra el progreso de la concentración en Ω en iteraciones de 10 en 10.

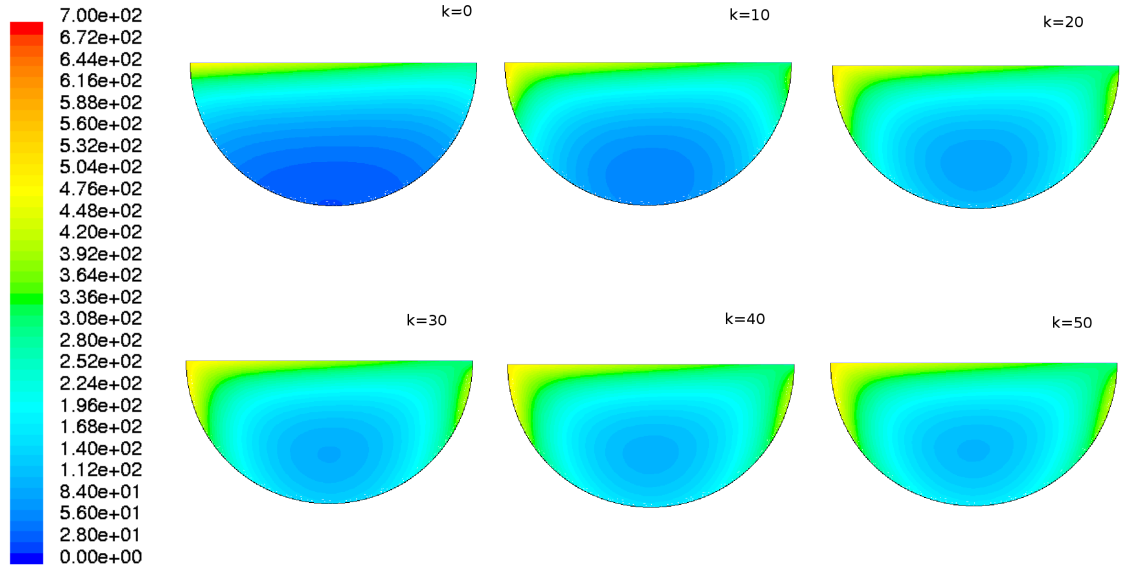


Figura 6.5: Concentración $C(q_k)$ en Ω para $k \in \{0, 10, 20, 30, 40, 50\}$ con $T = 10s$

6.2. 2 pasos, $T=20s$

Los gráficos de las soluciones de la velocidad (ec. (6.1)) y de la concentración (ec. (6.2)) para $T = 20s$ se encuentran en las figuras (6.7) y (6.6) respectivamente.

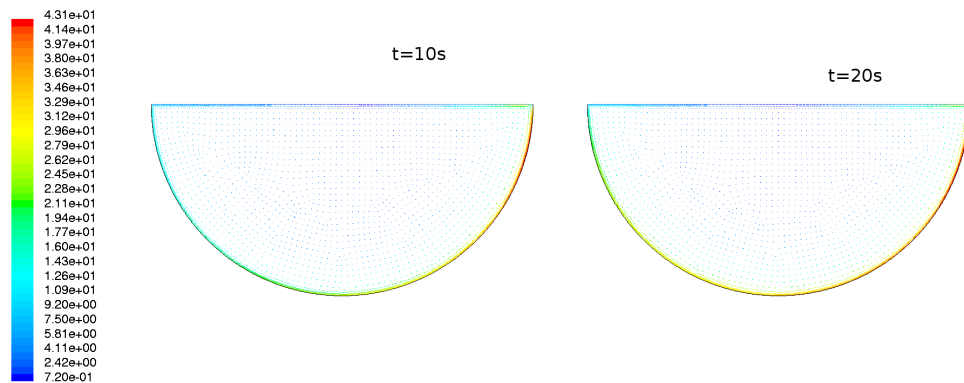


Figura 6.6: Velocidad en Ω con $T=20s$

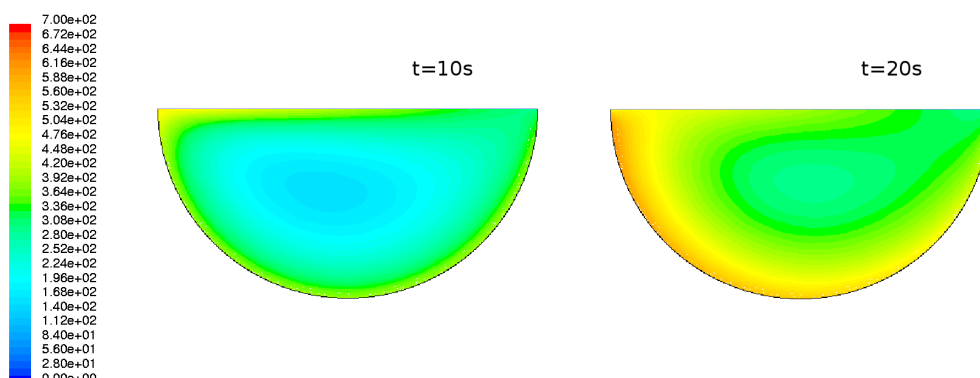


Figura 6.7: Concentracion en Ω con $T=20s$

6.2.1. Resultados numéricos

En los casos cuando de más de un paso, se va a encontrar un comportamiento anómalo tanto en J_T , como en la estimación del flujo. Al ir observando los datos y los gráficos se explicará con más detalle.

Funcional J_T

El funcional J_T sube y baja alternadamente (figura (6.8)), pero si uno gráfica los valores alternados en 2, es decir los puntos $1 + 2k$ y los puntos $2 + 2k$ se puede apreciar como la curva que representa los valores pares desciende. La otra, descendió pero luego comenzó a oscilar entorno a 10^7 que en este caso es el valor de J_T aceptable (ver (6.3) con $T=20s$).

La siguiente tabla muestra el comportamiento de J_T en las primeras 30 iteraciones.

Iteración	valor J	Iteración	valor J	Iteración	valor J
1	2.3740e+09	11	1.4877e+07	21	1.5609e+07
2	8.3095e+09	12	1.8850e+08	22	1.4492e+08
3	1.0002e+08	13	1.4409e+07	23	9.2615e+06
4	6.8453e+08	14	1.8590e+08	24	1.3683e+08
5	4.4009e+07	15	1.3756e+07	25	8.9682e+06
6	4.2312e+08	16	1.8291e+08	26	1.1646e+08
7	1.7210e+07	17	1.2496e+07	27	1.7592e+07
8	2.7183e+08	18	1.7594e+08	28	9.1722e+07
9	1.5475e+07	19	1.5726e+07	29	2.4503e+07
10	2.1499e+08	20	1.6085e+08	30	8.6402e+07

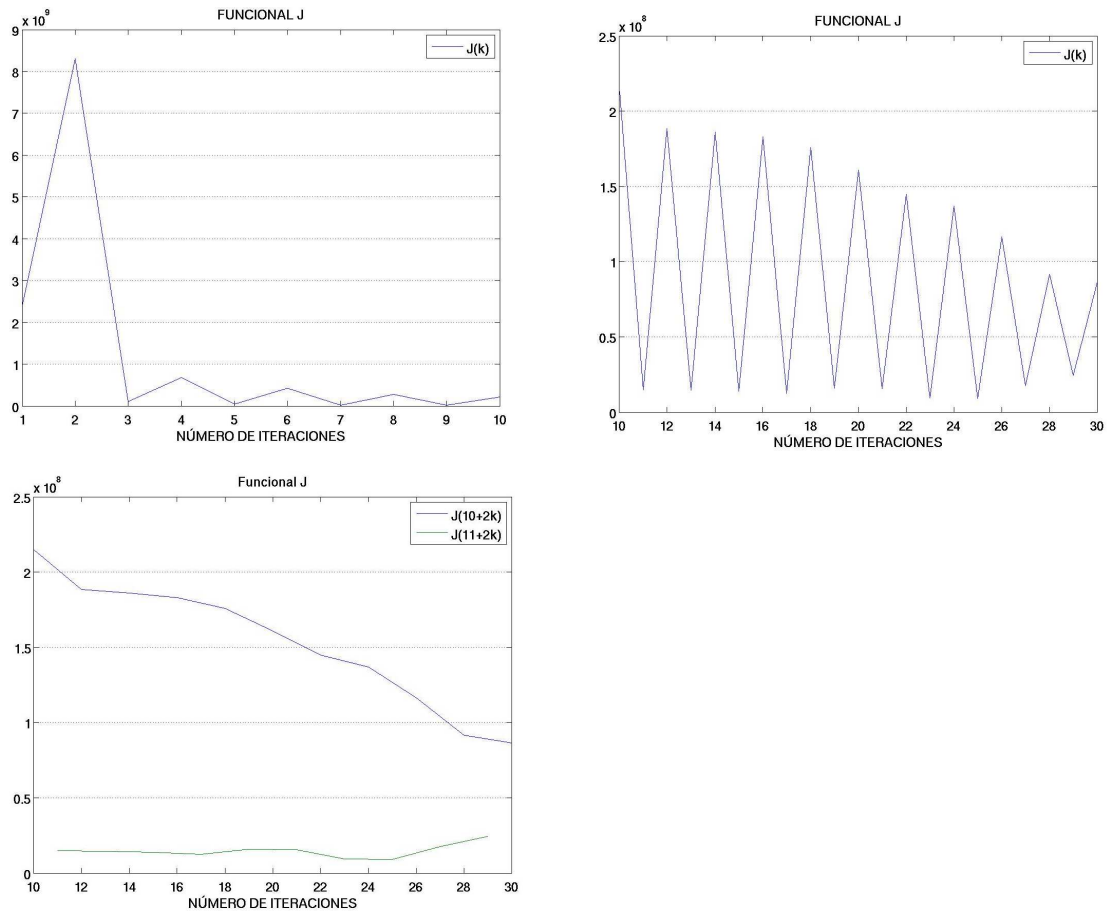


Figura 6.8: Funcional J_T con $T=20s$

Error en Γ_l

Para un mejor análisis, los errores se separaron en 2, los errores para $t = 10s$ en un gráfico y los errores para $t = 20s$ en otro, ver figura (6.9). La convergencia a cero, si uno mira los gráficos por separado no es tan directa como en el caso con $T = 10s$, ya que comienza a oscilar entorno a cero y cuando se acerca a cero por un lado de la curva se aleja en otro. Lo importante es ver que en promedio las curvas se van acercan a la función nula.

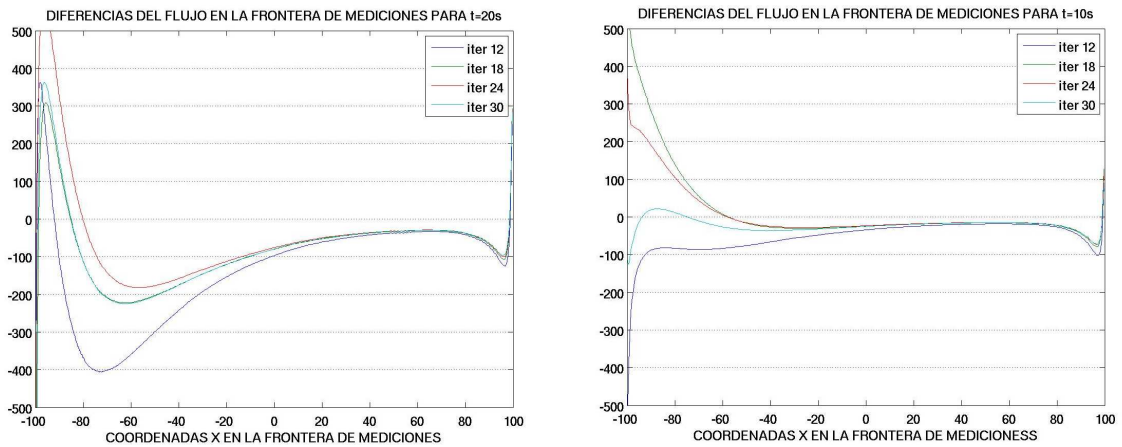


Figura 6.9: Error $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en Γ_l con $T=20s$

Estimación del flujo en Γ_m

La figura (6.10) muestra que la estimación del flujo en Γ_m para $t = 10s$ y $t = 20s$. Estos gráficos muestran que el error se concentra en lado derecho del dominio, algo similar que en el caso estacionario. Como el viento entorno a Γ_m es tangente y se mueve en sentido del reloj, el material particulado se concentra en el sector izquierdo de Γ_l , lo que provoca que no se pueda detectar con precisión los valores del flujo en la sección derecha del borde.

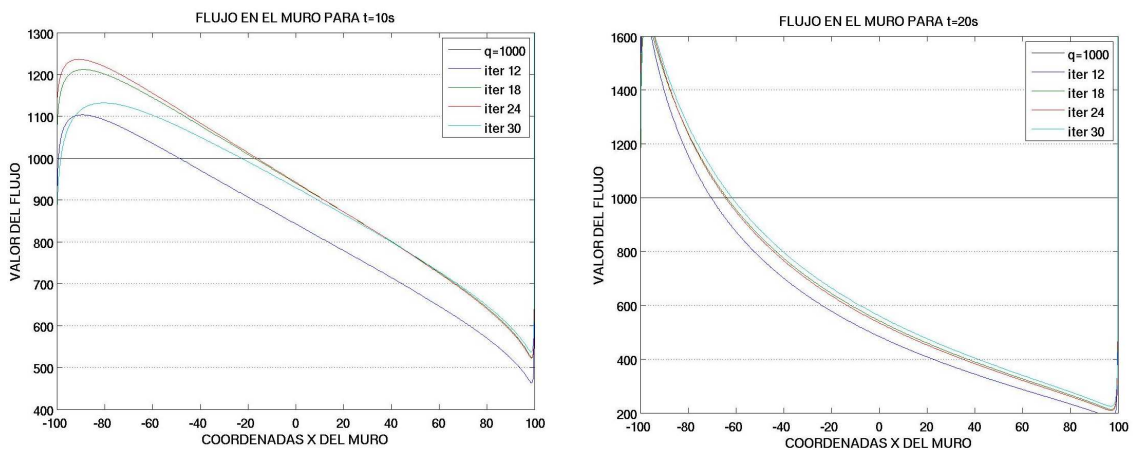
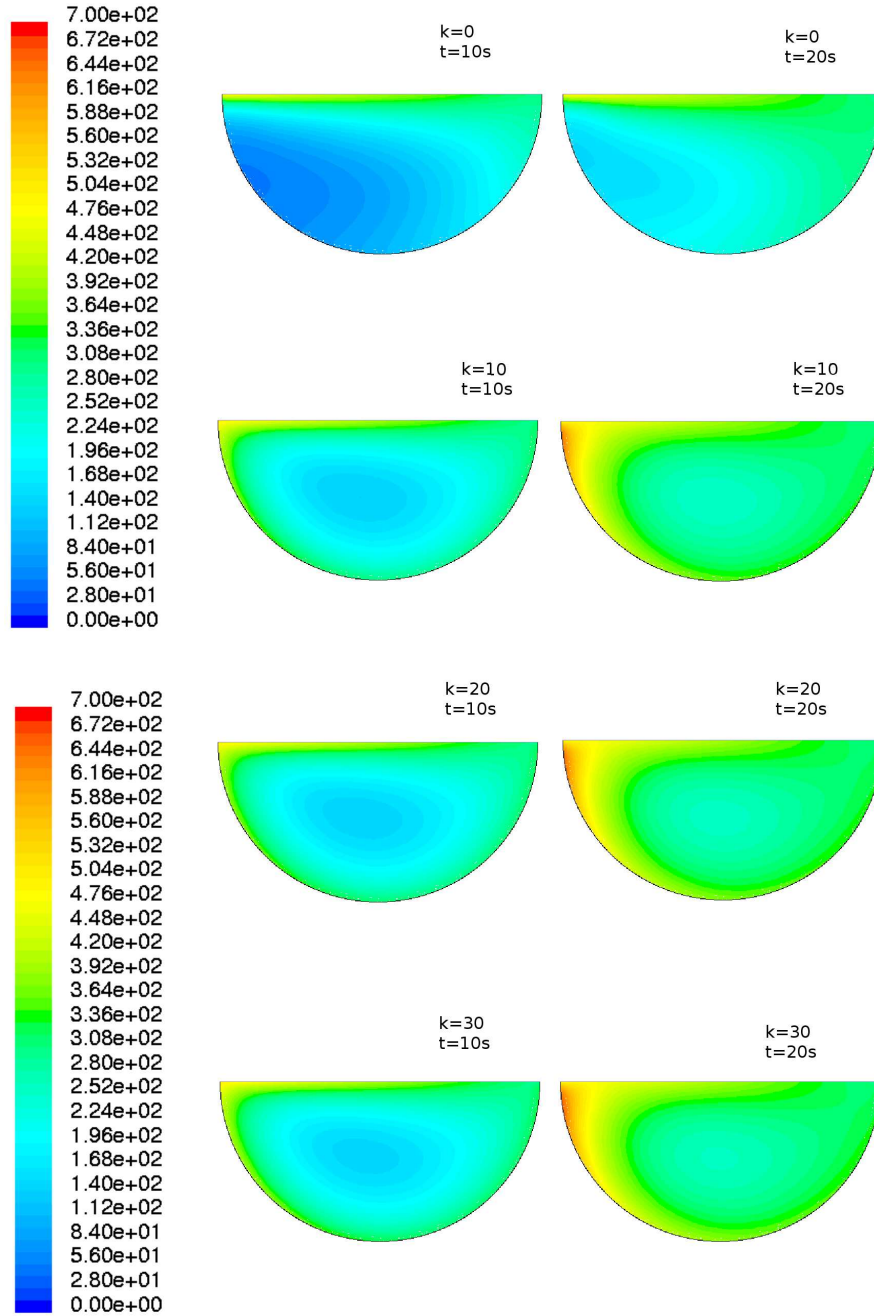


Figura 6.10: Flujo q_k en la coordena x de Γ_m con $T=20s$

En las siguientes figuras se muestran el progreso de la concentración en Ω en iteraciones de 10 en 10.



6.3. 3 pasos, $T=30s$

Los gráficos de las soluciones de la velocidad (ec. (6.1)) y de la concentración (ec. (6.2)) para $T = 30s$ se encuentran en las figuras (6.11) y (6.12) respectivamente.

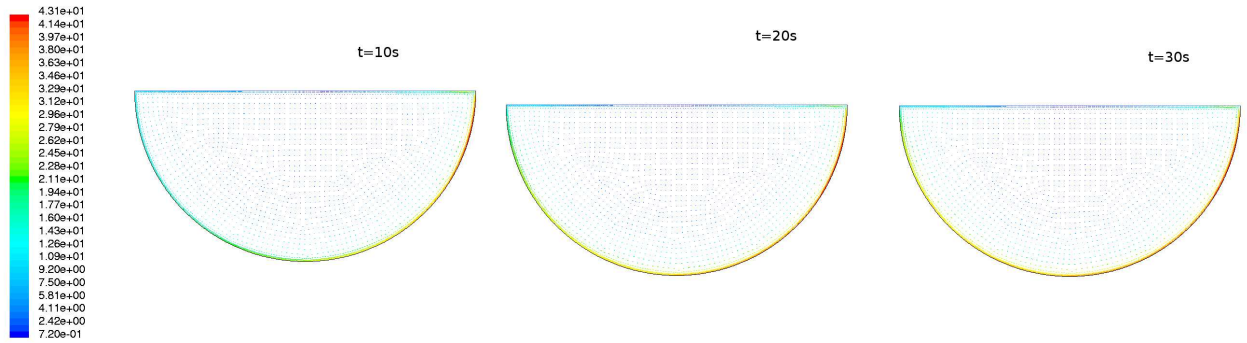


Figura 6.11: Velocidad en Ω con $T=30s$.

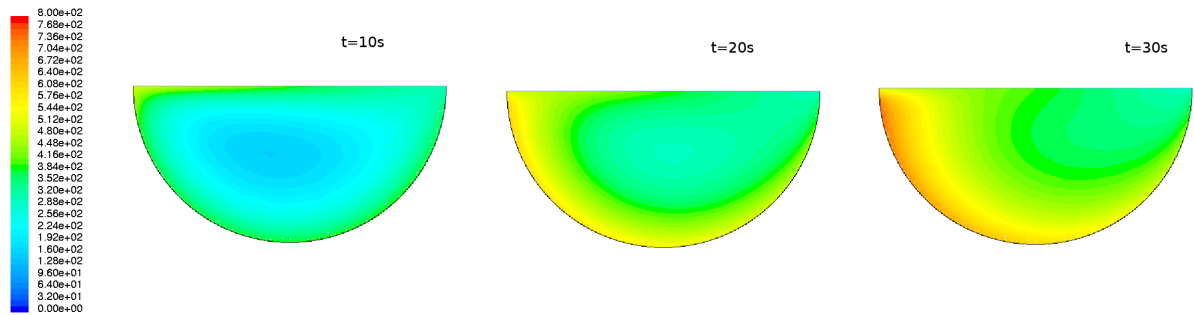


Figura 6.12: Concentración en Ω con $T=30s$.

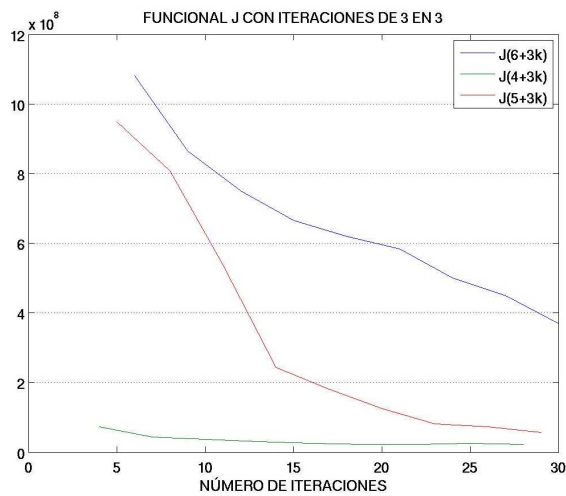
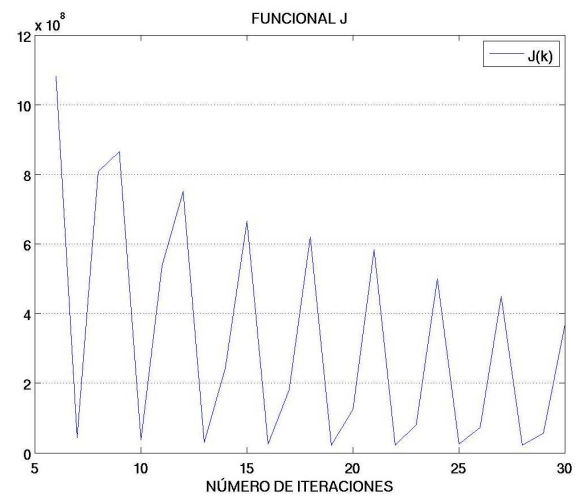
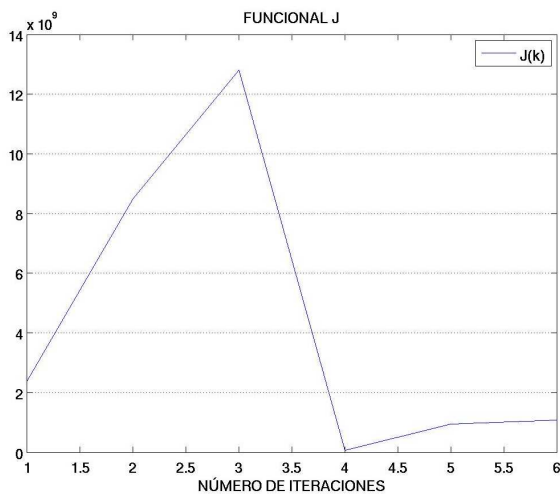
6.3.1. Resultados numéricos

Funcional J_T

Las anomalías continúan en el funcional J_T , este oscila pero ahora de tres en tres iteraciones es más si uno observa la tabla de manera vertical, se ve claramente la disminución de J_T cada 3 iteraciones.

Iteración	valor J	Iteración	valor J	Iteración	valor J
1	2.3679e+09	2	8.4848e+09	3	1.2801e+10
4	7.3584e+07	5	9.4927e+08	6	1.0821e+09
7	4.2723e+07	8	8.0817e+08	9	8.6561e+08
10	3.6060e+07	11	5.3740e+08	12	7.5054e+08
13	3.0398e+07	14	2.4336e+08	15	6.6517e+08
16	2.5040e+07	17	1.8077e+08	18	6.1899e+08
19	2.2059e+07	20	1.2515e+08	21	5.8289e+08
22	2.1968e+07	23	8.0525e+07	24	4.9952e+08

La figura a continuación contiene los gráficos de J_T y muestra las iteraciones por separado. En esta última figura se aprecia como por una parte disminuye y por otro lado se mantiene oscilando entorno a $2 \cdot 10^7$, el valor razonable de J_T en este caso es de $1,5 \cdot 10^7$ (ver ecuación (6.3) con $T=30s$).



Error en Γ_l

Para un mejor análisis, los errores se separaron en 3, los errores para $t = 10s$ en un gráfico, los errores para $t = 20s$ en otro y los errores para $t = 30s$ en el último, ver figura (6.11). La convergencia a la función nula no es tan obvia ya que incluso para $t = 10s$ el error en la iteración 20 es mayor al de las otras iteraciones que son iteraciones anteriores. Pero cuando uno mira los gráficos para $t = 20s$ y $t = 30s$ el error en la iteración 20 es mucho menor a las otras iteraciones, por lo que se puede entender como especie de compensación, puesto que para disminuir el error en $t = 20s$ y $t = 30s$ aumentó el error en $t = 10s$, aunque el total disminuyó.

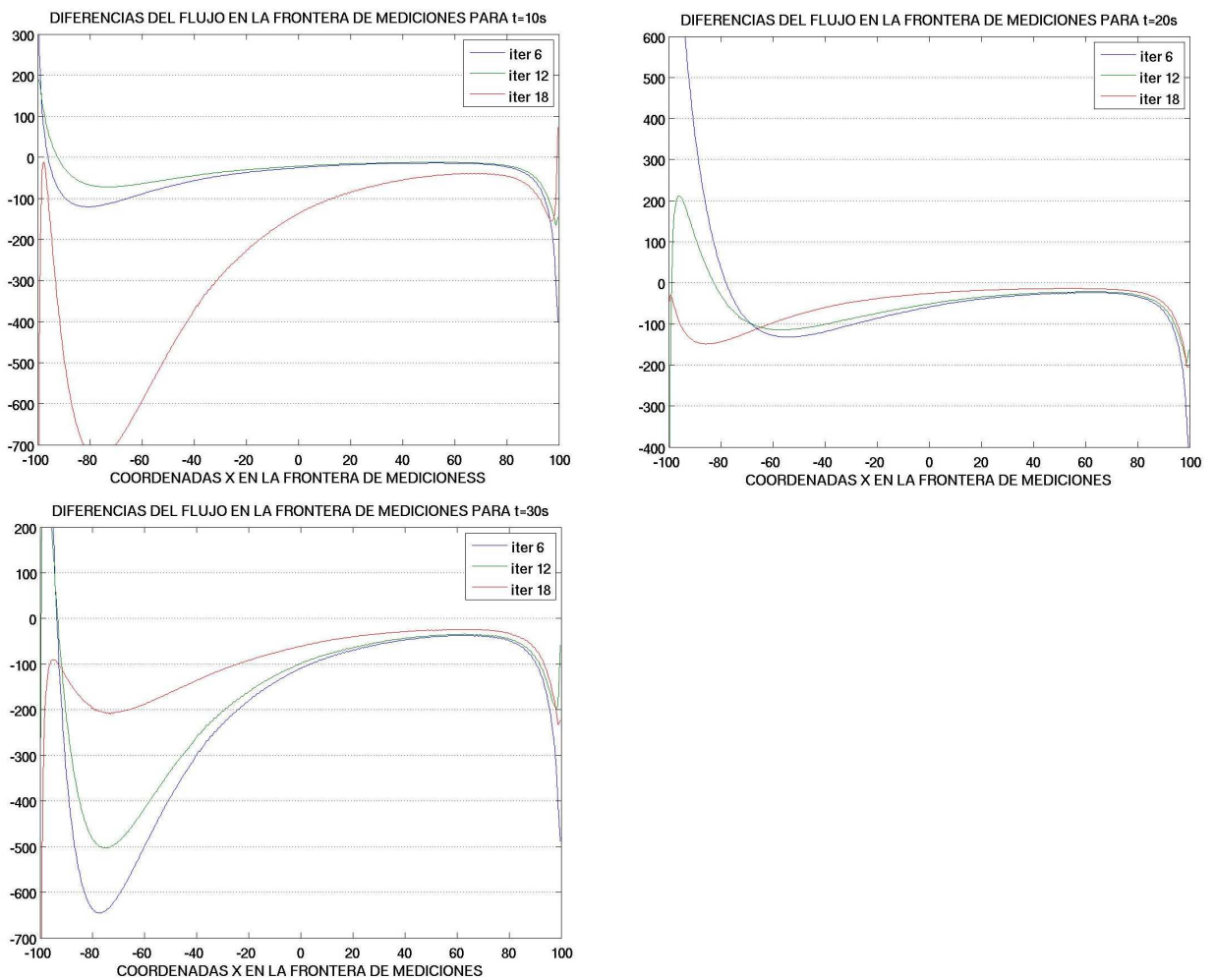


Figura 6.13: Error $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en Γ_l con $T=30s$

Estimación del flujo en Γ_m

La figura (6.14) muestra que la estimación del flujo en Γ_m para $t = 10s$, $t = 20s$ y $t = 30s$. Al igual que en $T = 20s$ el error se concentra en lado derecho del dominio, pero ahora existe un problema mayor ya que no queda claro que la tendencia sea acercarse a un flujo de 1000. De hecho en este caso la solución divergió en la iteración 30, a pesar de que J_T se mantuvo controlado (ver Funcional J_T para $T = 30s$).

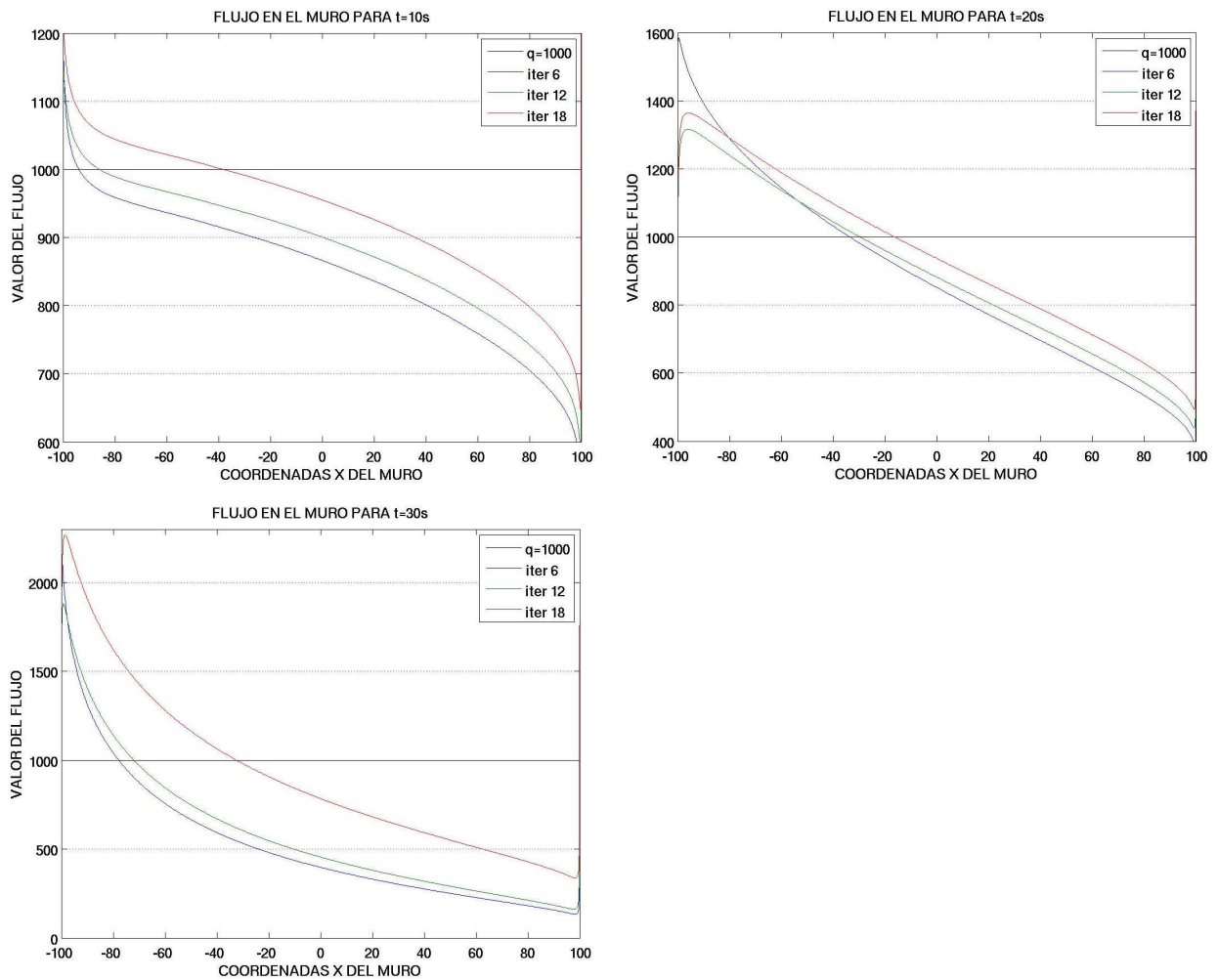
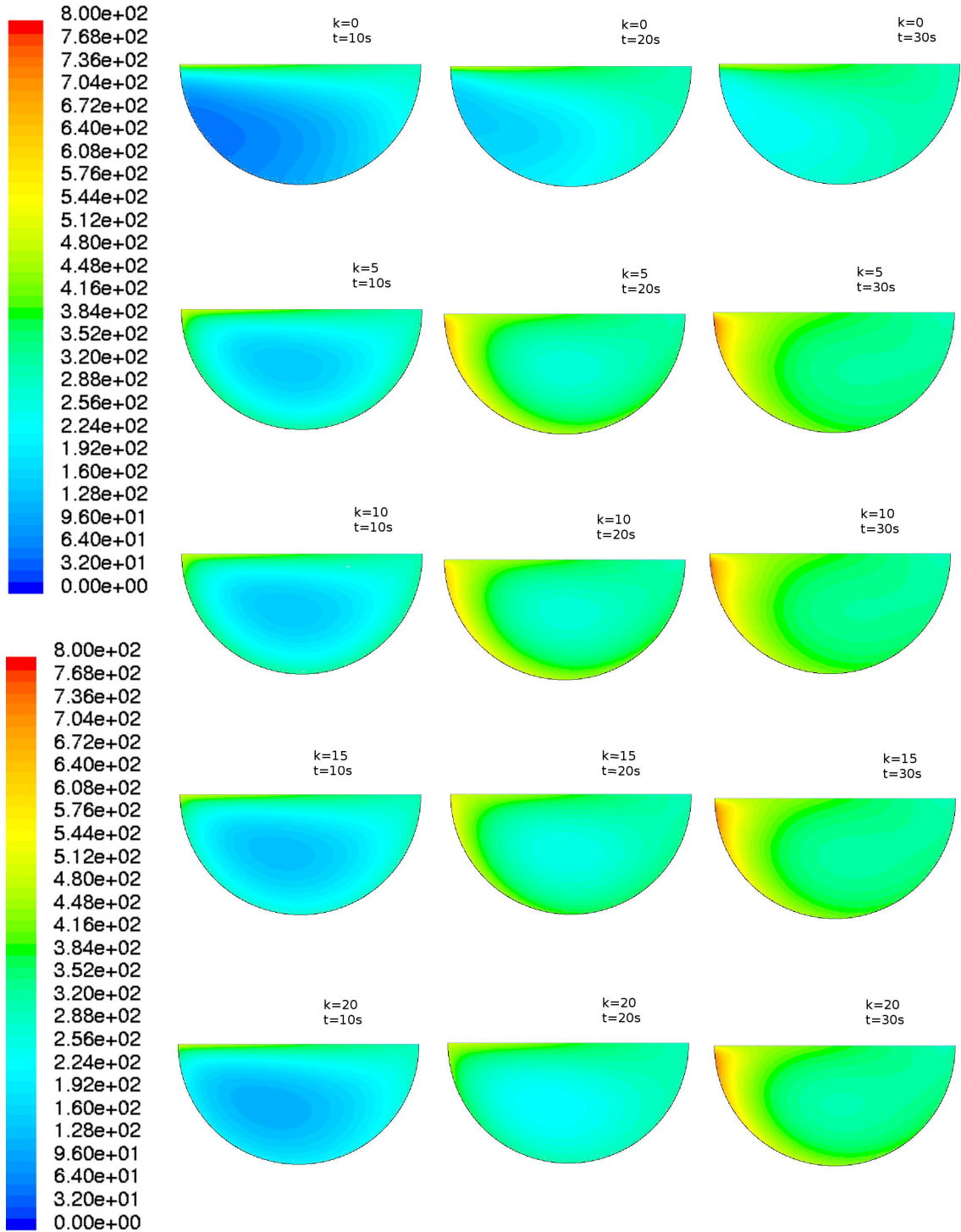


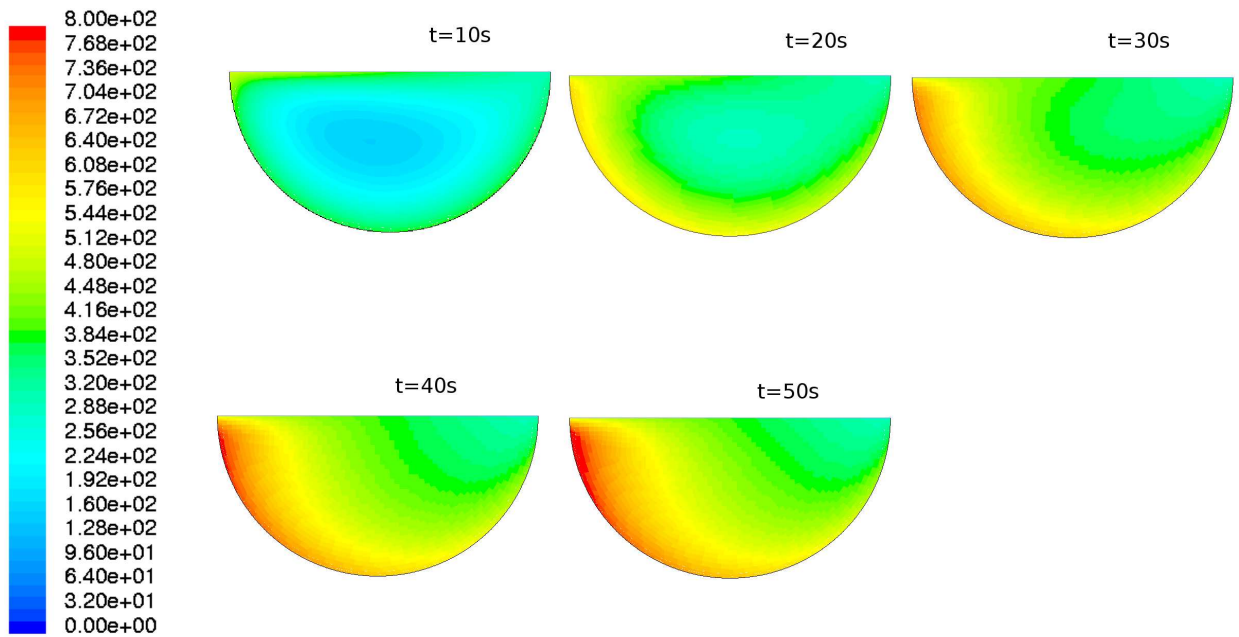
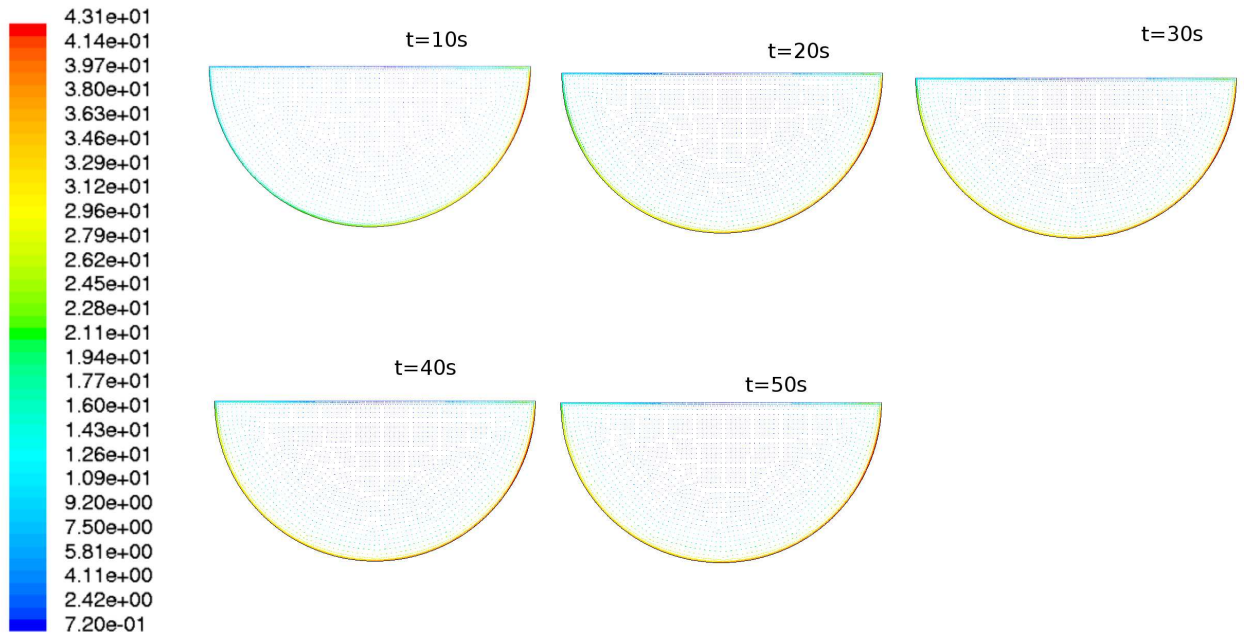
Figura 6.14: Flujo q_k en la coordena x de Γ_m con $T=30s$

Los siguientes gráficos muestran el progreso de la concentración en Ω en iteraciones de 5 en 5.



6.4. 5 pasos, $T=50s$

Los gráficos a continuación muestran las soluciones de la velocidad (ec. (6.1)) y de la concentración (ec. (6.2)) para $T = 50s$.



6.4.1. Resultados numéricos

Funcional J_T

La tendencia del funcional J_T a tener oscilaciones dependiendo de la cantidad de pasos continúa, ahora de 5 en 5, ver figura (6.15) y la siguiente tabla:

Ite.	valor J	Ite.	valor J	Ite.	valor J	Ite.	valor J	Ite.	valor J
1	2.8290e09	2	8.1903e09	3	1.3093e10	4	1.4698e10	5	1.6547e10
6	6.4653e08	7	3.6290e08	8	1.3389e09	9	1.4655e09	10	3.1236e09
11	5.6680e08	12	3.3846e08	13	1.1956e09	14	1.4253e09	15	2.8639e09
16	4.8082e08	17	3.2547e08	18	1.1011e09	19	1.4821e09	20	2.5656e09
21	3.6924e08	22	3.1519e08	23	9.6760e08	24	1.4809e09	25	2.2709e09
26	2.9151e08	27	3.5267e08	28	8.2881e08	29	1.3619e09	30	2.0087e09
31	1.9544e08	32	3.4653e08	33	8.1438e08	34	1.2519e09	35	1.7202e09

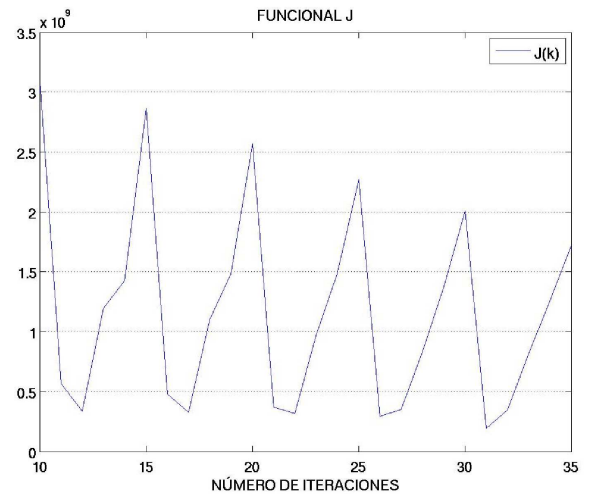
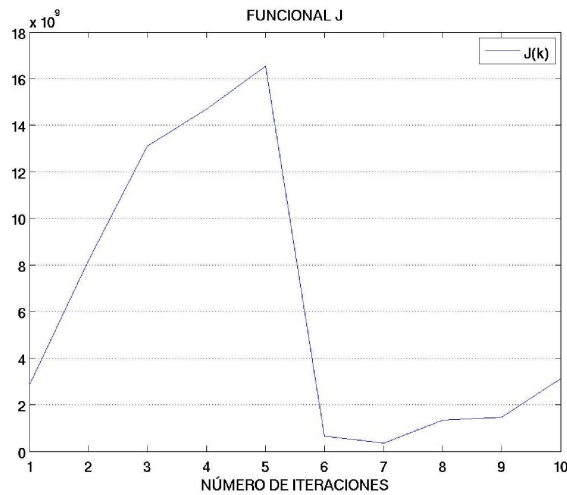


Figura 6.15: Funcional J_T .

Las figuras (6.15) y (6.16) muestran la tendencia a la disminución del funcional a un valor cercano a 10^8 . Para este caso un valor razonable de J_T sería en este caso es de $2,5 \cdot 10^7$ (ver ecuación (6.3) con $T=30s$), el valor de 10^8 podría considerarse muy alto, pero por la cantidad de errores numéricos que se producen a este nivel de cálculos se considera aceptable estos valores para realizar un análisis del comportamiento del algoritmo.

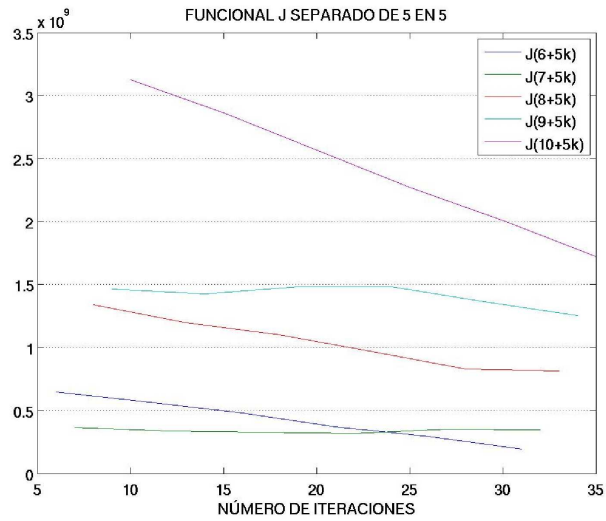
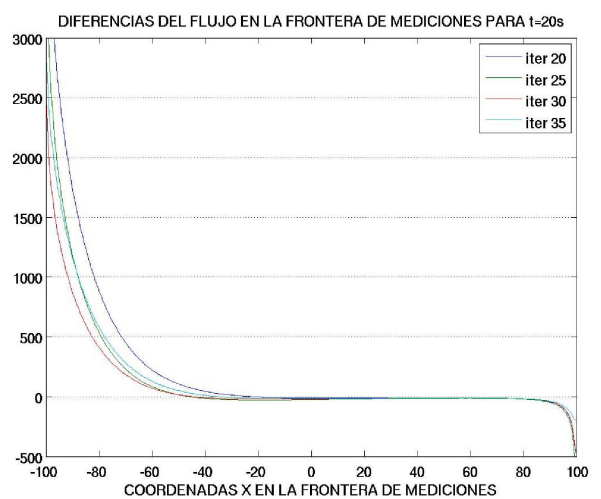
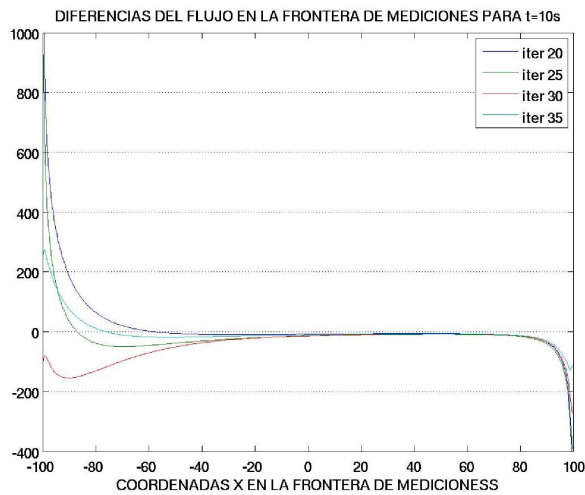


Figura 6.16: Funcional J_T .

Error en Γ_l

Las siguientes figuras muestran que sucede algo similar al caso con $T=30s$, pareciera que para algunos t (en este caso $t = 20s$ y $t = 50s$), el error no disminuye sino por el contrario aumenta, pero cuando aumenta en esos t en otros disminuye ($t = 10s$ y $t = 30s$), haciendo que el total vaya disminuyendo.



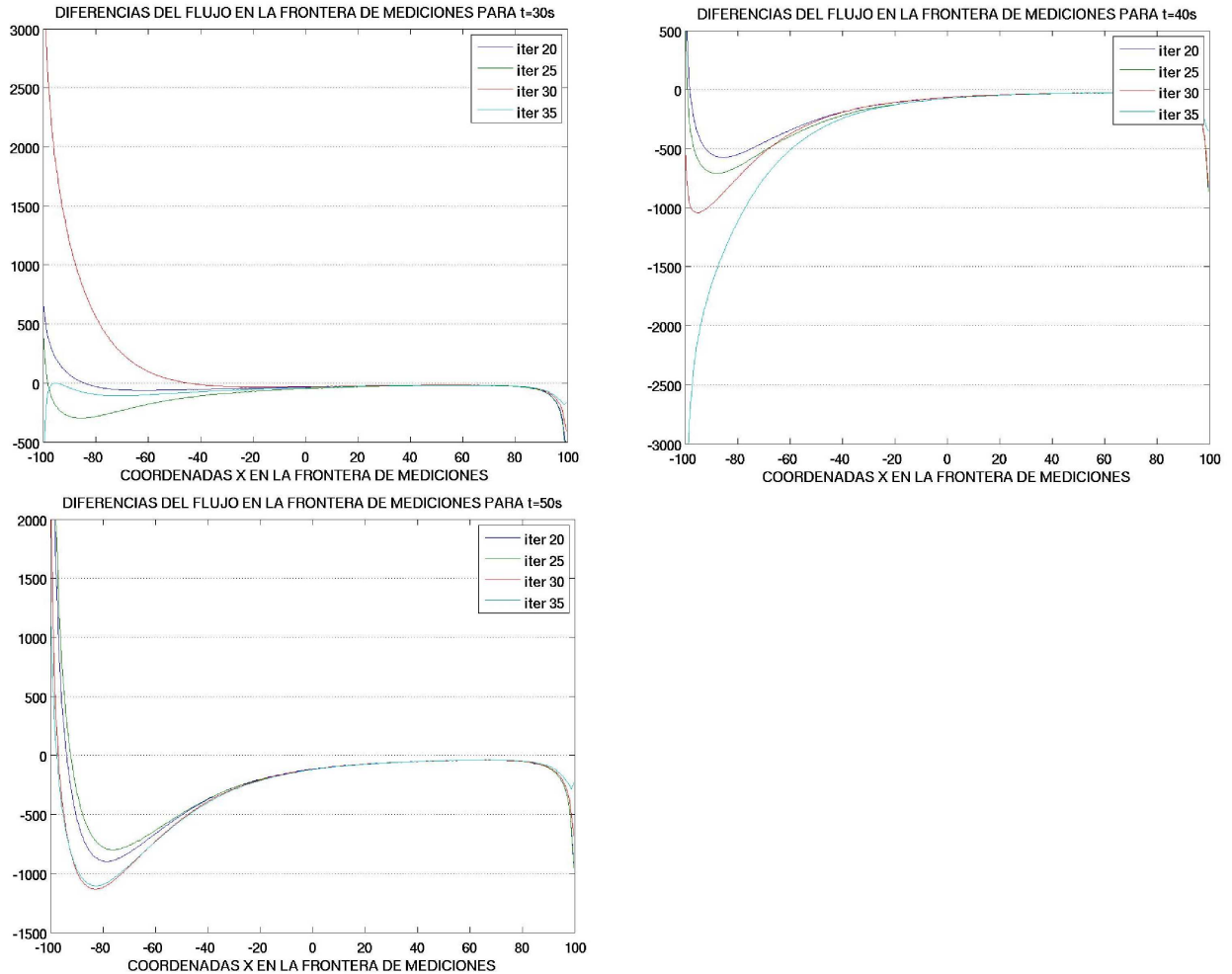
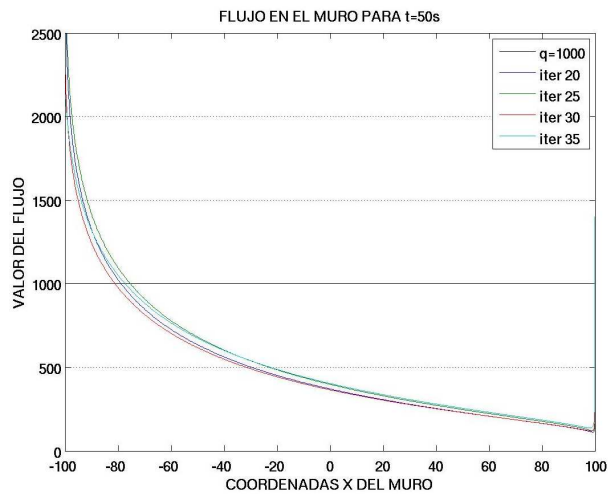
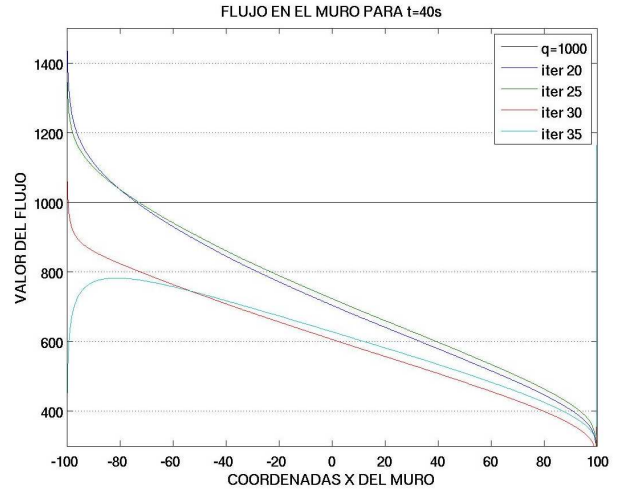
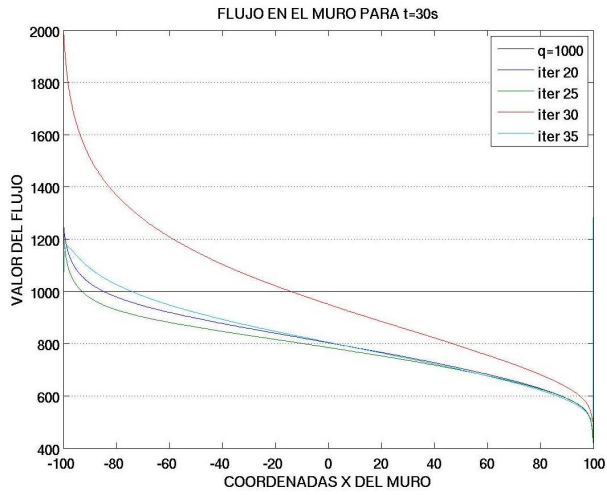
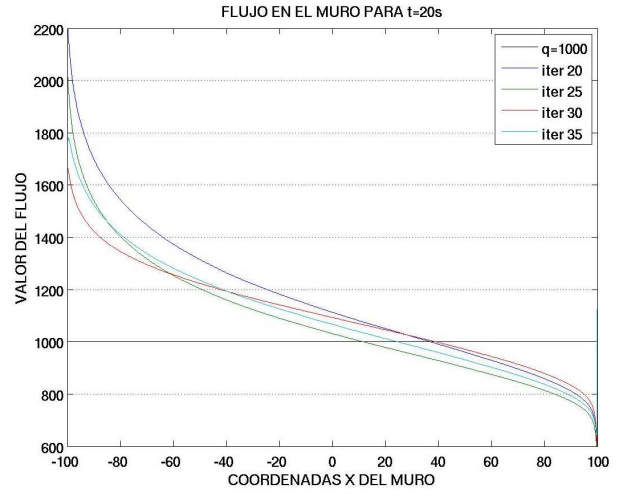
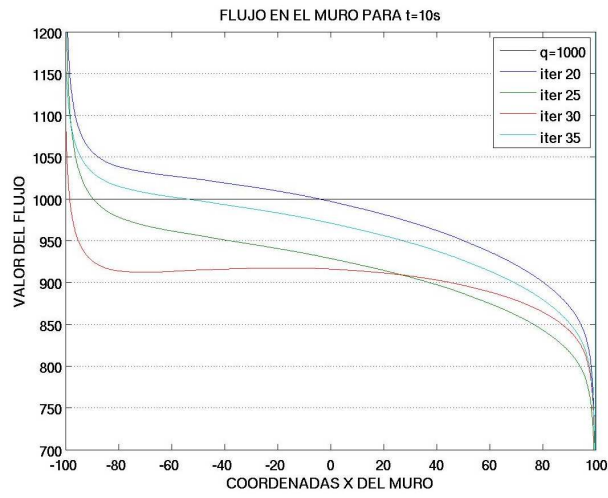


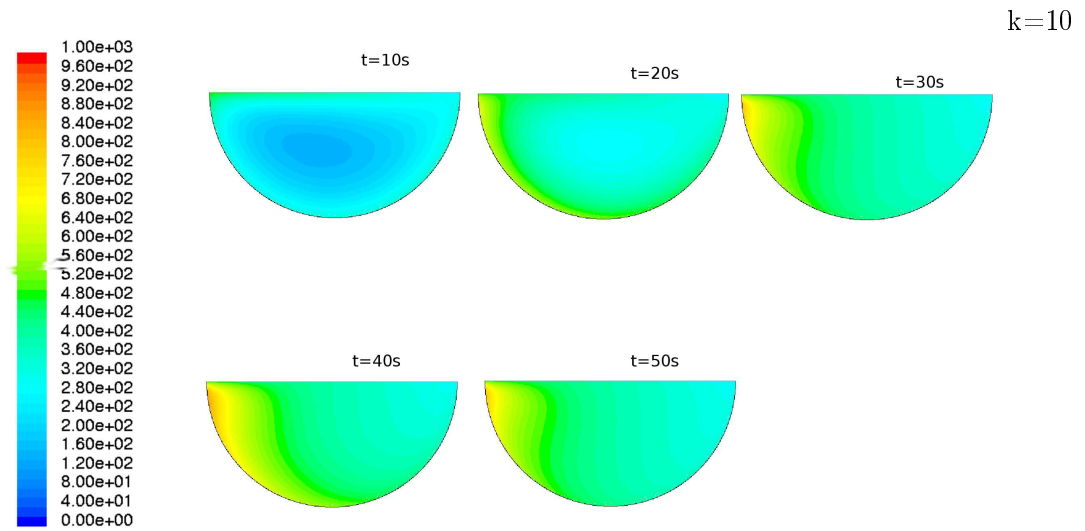
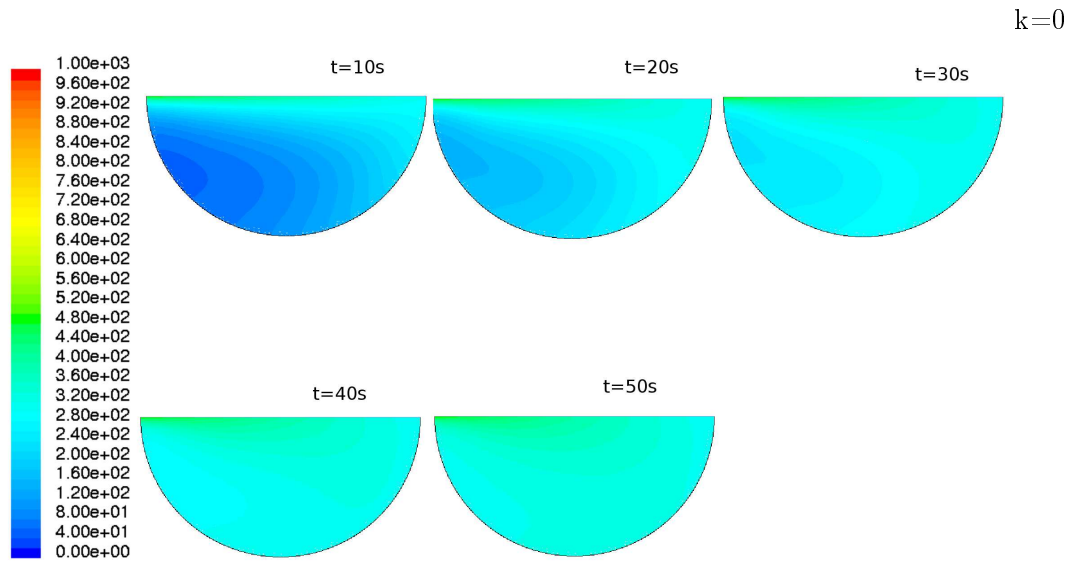
Figura 6.17: Error $q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k)$ en Γ_l con $T=50s$

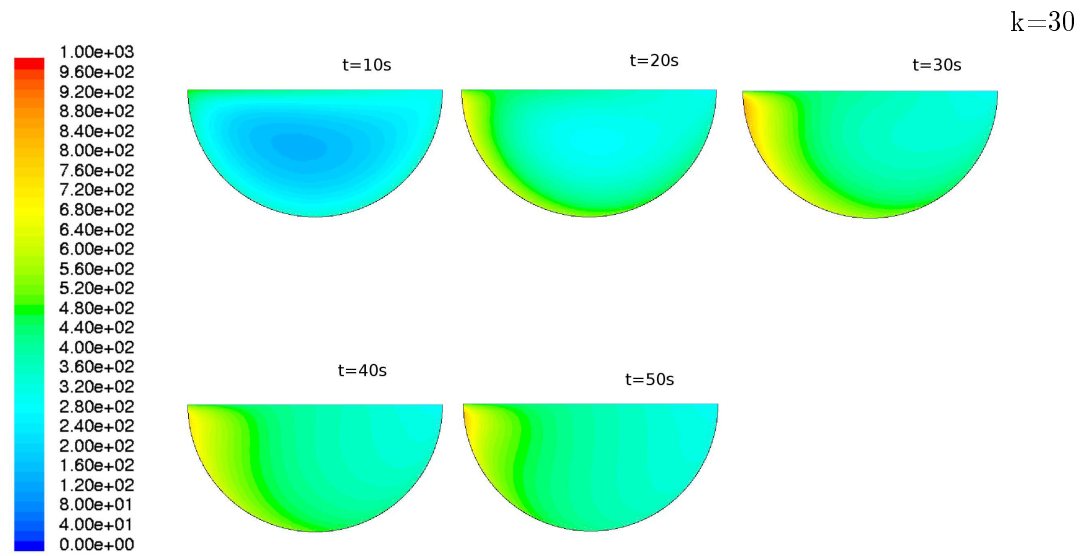
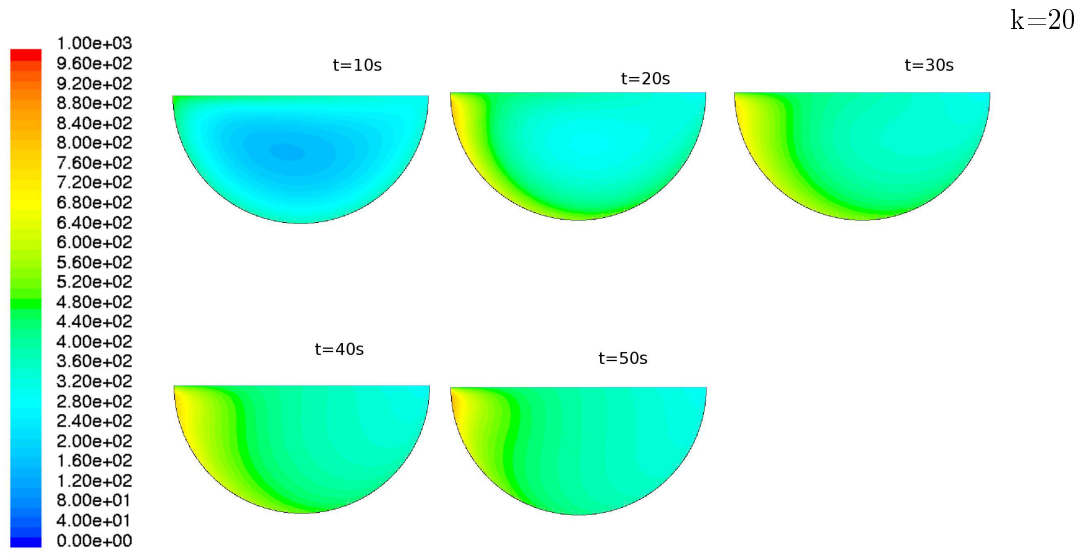
Estimación del flujo en Γ_m

La figura a continuación se observa la estimación del flujo en Γ_m para $t = 10s$, $t = 20s$, $t = 30s$, $t = 40s$ y $t = 50s$. Aquí se aprecia la tendencia de las soluciones, en la cual donde mas lento se aproxima es en el sector derecho de Γ_m , al igual que en los otros casos. Además, muestra coerencia con los gráficos anteriores (6.17), puesto que en los pasos 1 y 3 hay un mayor acercamiento a la constante 1000 mientras que en los otros pasos hay incluso un alejamiento.



Los siguientes gráficos muestran el progreso de la concentración en Ω en iteraciones de 10 en 10.





6.5. Análisis general del error

Como se vio en los distintos ejemplos del caso no estacionario, la convergencia del método es bastante irregular, por decirlo menos. En estos casos, donde los valores del error absoluto son bastante grandes es mejor realizar un análisis de los errores relativos. La siguiente tabla muestra el error relativo en la última iteración de q_k y de $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_l}$ en comparación con los datos del problema directo:

T	$\frac{\ q_k - q_m^*\ }{\ q_m^*\ }$	$\frac{\sqrt{2*J(q_k)}}{\ q_l\ }$	n
10	3.916e-1	3.348e-2	50
20	4.149e-1	9.470e-2	30
30	4.062e-1	3.063e-1	20
50	4.030e-1	3.135e-1	35

La tercera columna muestra que J es relativamente pequeño lo que mejora las expectativas de encontrar el flujo en Γ_m , aunque el error en Γ_l aumenta cuando T aumenta. Lo importante a destacar es que el error relativo en Γ_m se mantiene entorno a un mismo nivel y hace suponer que no se puede reducir mucho más el error, al menos en este caso. Una pregunta válida es si los valores entregados por el algoritmo se pueden considerar aceptables, la respuesta es afirmativa si lo que se quiere es sólo obtener una tendencia del comportamiento. Al mirar los gráficos que muestran el flujo en Γ_m todos los flujos entregados por el algoritmo intersectan al flujo q_m^* (en estas pruebas $q_m^* \equiv 1000$), además como se puede conocer la velocidad en $\Omega \times (0, T)$ se puede suponer a priori que el valor del flujo en el sector derecho de Γ_m es difícilmente predecible, puesto que el viento entorno a Γ_m se dirige de derecha a izquierda.

Otro aspecto a considerar es el comportamiento de J_T , teóricamente este funcional debiera siempre descender si se usa el algoritmo gradiente conjugado, lo que claramente no sucede en todos los casos de los ejemplos de este capítulo, salvo el caso en que $T = 10s$. En los gráficos de J_T se puede ver claramente que existe una dependencia de esta anomalía con el valor de T , esto se puede explicar pensando que cuando se pasa de q_k a q_{k+1} la dirección entregada por el algoritmo se enfoca a reducir la diferencia con q_l en el tiempo t ($t \in \{0, 10, \dots, T\}$) en el cual existe la mayor diferencia. Esto produce, debido a errores numéricos, que el total (el valor de J_T) sea mayor que en la iteración anterior, salvo en la iteración donde se vuelve a enfocar en el mismo tiempo t .

Capítulo 7

Aplicación del problema inverso

7.1. Motivación

La contaminación ambiental en faenas de la gran minería es prácticamente inevitable, en particular, las minas a rajo abierto usualmente generan una gran cantidad de polvo en suspensión aún cuando no existan tronaduras en ese momento, lo cual puede generar graves problemas a la salud de los trabajadores de la mina y a las personas que habiten en las cercanías de ésta. Es por eso que ya hace bastante tiempo se ha querido regular el tema tal como lo muestra la siguiente cita:

“Considerando: Que la Constitución Política de la República garantiza a los habitantes el derecho a vivir en un ambiente libre de contaminación y, por consiguiente, constituye deber del Estado velar para que este derecho no sea afectado y tutelar la preservación de la naturaleza. Que los estudios realizados por el Ministerio de Minería revelan que más del 90% de las emisiones de anhídrido sulfuroso en el país provienen de instalaciones mineras, existiendo la necesidad de reglamentar la operación de estas fuentes, con el propósito de evitar la contaminación del aire. Que para ello es menester realizar estudios destinados a medir la calidad del aire, instalar redes permanentes de monitoreo de calidad del aire y desarrollar planes de descontaminación atmosférica en las áreas donde no hay condiciones para dar inmediato cumplimiento a esta reglamentación ambiental.”(pág. 1 [5])

Para tratar de solucionar este problema se colocaron cuatro estaciones de mediciones de partículas PM10 ubicadas en los cuatro puntos cardinales al borde superior del rajo, estas estaciones entregan cada 30 minutos el valor de la concentración de las partículas, también se tiene información de la velocidad del viento en una zona a un par de kilómetros del rajo. El objetivo es poder identificar como es el flujo de contaminantes en el rajo, ya que se debe reducir la cantidad de contaminantes producidos.

Las partículas PM10 son partículas que se encuentran en suspensión en el aire con un tamaño igual o inferior a 10 micrones.

En el presente capítulo se mostrará como se resolvió el problema de predecir el flujo de material particulado usando el problema inverso visto en los capítulos anteriores.

7.2. Esquema del rajo y algunas hipótesis

Se representa la mina y sus alrededores por 2 dominios Ω y Ω_F , esquematizados en la figura (7.1). Donde Ω es el mina misma y donde sus bordes son el rajo Γ_i y Γ_e que es la unión mediante una línea imaginaria de 2 estaciones de monitoreo que se encuentran en los bordes del rajo. El dominio Ω_F representa la parte externa a la mina, sus bordes son Γ_e , Γ_{in} y Γ_{out} , lugares donde se monitorea el viento, Γ_{top} representa el cielo y Γ_{la} es la superficie terrestre que no se considera como parte de la mina.

Se desea determinar la fuente de material particulado, en particular el flujo de partículas generado al interior del rajo Γ_i , a partir de los datos experimentales de la concentración de PM10 (C) y velocidad del viento (\vec{v}), medidos en el borde superior del rajo (Γ_e) y lejos de él (Γ_{in}) respectivamente. Por simplicidad se resolverá el problema 2D.

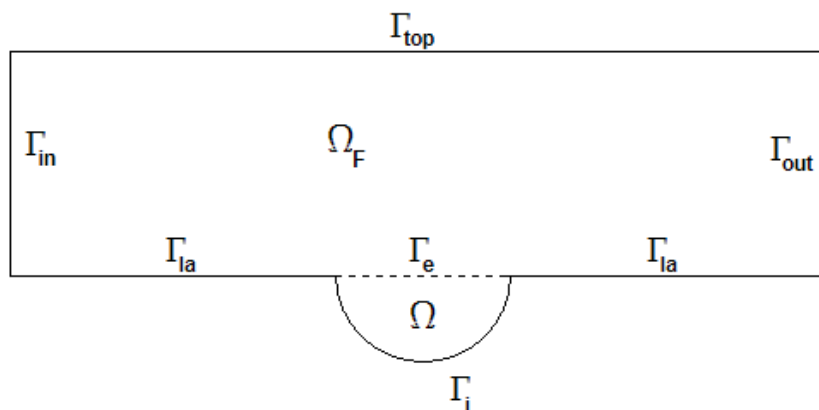


Figura 7.1: Esquema de una mina de rajo abierto en 2d

Una primera suposición es asumir que se conoce la concentración en un plano que une las estaciones,

el que se denominará tapa del rajo(Γ_e). Otra suposición es que es conocido el flujo fuera del rajo (Γ_{la}) y la velocidad ahí como en Γ_i es nula. Además se considerará que la velocidad del viento en Γ_{top} tiene derivada normal nula. Por último se considera que el fluido es isotérmico.

7.3. Ecuaciones de movimientos y problema directo

Las ecuaciones de movimiento isotérmicas para el fluido en $\Omega \cup \Omega_F$ son [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c) + \nabla \cdot (\rho_c \alpha_c \vec{u}) = 0 \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c \vec{u}) + (\vec{u} \cdot \nabla)(\rho_c \alpha_c \vec{u}) = -\alpha_c \nabla p + \alpha_c \nabla \tau + \rho_c \alpha_c \vec{g} - \beta_V (\vec{u} - \vec{v}) \quad (7.2)$$

y para las partículas:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_d \rho_d) + \nabla \cdot (\rho_d \alpha_d \vec{v}) = \nabla \cdot (D_d \nabla \alpha_d \rho_d) \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_d \rho_d \vec{v}) + (\vec{v} \cdot \nabla)(\rho_d \alpha_d \vec{v}) = -\alpha_d \nabla p + \alpha_d \nabla \tau + \rho_d \alpha_d \vec{g} + \beta_V (\vec{u} - \vec{v}) \quad (7.4)$$

El nivel de acoplamiento de las ecuaciones para las partículas con las ecuaciones del fluido dependerá de los siguientes números adimensionales:

$$\Pi_{\text{masa}} = \frac{K}{\mathbf{St}_{\text{masa}}} \quad \text{y} \quad \Pi_{\text{mom}} = \frac{K}{1 + \mathbf{St}_{\text{mom}}}.$$

Donde $K = \frac{\alpha_d \rho_d}{(1 - \alpha_d) \rho_c}$, $\mathbf{St}_{\text{masa}} = \frac{\tau_{\text{masa}} u}{L}$ y $\mathbf{St}_{\text{mom}} = \frac{\tau_{\text{mom}} u}{L}$. Si se supone partículas de densidad $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$ inmersas en aire y en el peor de los casos se miden $1000 \text{ } \mu\text{g/m}^3$ en las estaciones de monitoreo, se puede decir que $\alpha_d \sim \frac{1000 \times 10^{-9} \text{ kg/m}^3}{2500 \text{ kg/m}^3} = 4 \times 10^{-10}$ luego, esta suspensión es muy diluida y por lo tanto $K \sim 0$. Esto quiere decir que los efectos de acoplamiento son despreciables y por ello las partículas siguen el movimiento del fluido. Luego si se desprecia $\alpha_d \sim 0$, el sistema de ecuaciones queda:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c) + \nabla \cdot (\rho_c \vec{v}) = 0 \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c \vec{v}) + \vec{v} \nabla \cdot (\rho_c \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \tau + \rho_c \vec{g} \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(C) + \nabla \cdot (C \vec{v}) = \nabla \cdot (D_d \nabla C) \quad (7.7)$$

$$(7.8)$$

donde $C = \alpha_d \rho_d$.

Si se supone que el viento satisface Navier-Stokes en $\Omega_F \cup \Omega$, entonces el sistema para determinar la velocidad del viento queda:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}) + \vec{v} \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}) - \nabla \cdot \sigma(\vec{v}, p) & = 0 & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ \nabla \cdot \vec{v} & = 0 & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ \vec{v} & = \vec{v}_{in} & \text{sobre } \Gamma_{in} \\ \vec{v} & = \vec{v}_{out} & \text{sobre } \Gamma_{out} \\ \vec{v} & = 0 & \text{sobre } \Gamma_{la} \cup \Gamma_i \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial n} & = \vec{0} & \text{sobre } \Gamma_{top} \end{array} \right. \quad (7.9)$$

y el sistema de ecuaciones para la concentración en $\Omega_F \cup \Omega$:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t} C + \nabla C \cdot \vec{v} - \nabla \cdot (D_d \nabla C) & = 0 & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ C & = 0 & \text{sobre } \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_{top} \\ D \frac{\partial C}{\partial n} & = q_{la} & \text{sobre } \Gamma_{la} \\ D \frac{\partial C}{\partial n} & = q_i^* & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.10)$$

7.4. Aplicación del problema inverso en el caso estacionario

El problema de encontrar el flujo de partículas al interior del rajo se puede escribir como sigue:

Determinar $q_i^* \in L^2(\Gamma_i)$ conociendo $C_f|_{\Gamma_e} = C_e$ y las condiciones de borde de la velocidad como en el sistema (7.9), donde C_f es la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x) \nabla C_f) + \vec{v} \cdot \nabla C_f & = 0 & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ C_f & = 0 & \text{sobre } \Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \\ D(x) \frac{\partial C_f}{\partial n} & = q_{la}(x) & \text{sobre } \Gamma_{la} \\ D(x) \frac{\partial C_f}{\partial n} & = q^*(x) & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.11)$$

Para aplicar el problema inverso estudiado en los capítulos anteriores es necesario conocer en Γ_e la concentración C_e , la velocidad \vec{v}_e y el flujo de la concentración $D \frac{\partial C_e}{\partial n}$. Por hipótesis sólo se conoce C_e , faltan los otros dos.

Para conocer la velocidad en Γ_e se resuelve el sistema (7.9) en todo $\Omega \cup \Omega_F$, despreciando el término de la derivada parcial con respecto a t , y luego se exporta la velocidad en Γ_e , $\vec{v}|_{\Gamma_e} = \vec{v}_e$. Sólo falta conocer la derivada normal de la concentración en Γ_e pero para ello se resuelve las ecuaciones estacionarias de la concentración sólo en Ω_F .

Se considera C_f^0 la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C_f^0) + \vec{v} \cdot \nabla C_f^0 = 0 & \text{en } \Omega_F \\ C_f^0 = 0 & \text{sobre } \Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \\ D(x)\frac{\partial C_f^0}{\partial n} = q_{la} & \text{sobre } \Gamma_{la} \\ C_f^0 = C_e & \text{sobre } \Gamma_e \end{array} \right. \quad (7.12)$$

Ahora se define $f_1 := -D(x)\frac{\partial C_f^0}{\partial n}$ en Γ_e , donde, en este caso, n es la normal exterior a Ω_F .

Sea $J : L^2(\Gamma_i) \rightarrow \mathbb{R}$ definido por: $J(q) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| D(x)\frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right|^2 ds$

donde n la normal exterior a Ω y $C(q)$ la solución única del sistema:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C = 0 & \text{en } \Omega \\ C = C_e & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial C}{\partial n} = q(x) & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.13)$$

Se vio en los capítulos anteriores que J es una función convexa a valores positivos, además $J(q_i^*) = 0$, por lo tanto q_i^* es un mínimo global de J , pero si existe otro mínimo global q_i , este tendrá también que ser cero de J , luego las soluciones C_f^0 y $C(q_i)$ se pegarán bien en Γ_e por lo cual la solución C_f coincidirá con estas funciones en sus respectivos dominios, es decir, $q_i^* = q_i$ lo que implica la unicidad del mínimo. Entonces la condición de primer orden para q^* :

$$\langle J'(q), r \rangle = \int_{\Gamma_e} \left(D(x)\frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right) D(x)\frac{\partial \delta C(r)}{\partial n} ds \quad (7.14)$$

donde $\delta C(r)$ es solución de:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla \delta C) + \vec{v} \cdot \nabla \delta C = 0 & \text{en } \Omega \\ \delta C = 0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial \delta C}{\partial n} = r & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.15)$$

Sabiendo que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$, multiplicando la ecuación de $\delta C(r)$ por ρ e integrando por partes se obtiene:

$$\begin{aligned} 0 &= - \int_{\Omega} \delta C(r)(\nabla \cdot (D(x)\nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho) + \int_{\partial\Omega} \delta C(r)(D(x)\nabla \rho \cdot \hat{n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \rho D(x)\nabla \delta C(r) \cdot \hat{n} \end{aligned}$$

bajo el supuesto que: $\nabla \cdot (D(x)\nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = 0$. Además usando las condiciones de contorno de $\delta C(r)$:

$$0 = \int_{\Gamma_i} \delta C(r) D(x) \frac{\partial \rho}{\partial n} - \int_{\Gamma_i} \rho r - \int_{\Gamma_e} \rho D(x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n}$$

por lo tanto, si se impone que ρ sea solución de:

$$\begin{cases} \nabla \cdot (D(x) \nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = 0 & \text{en } \Omega \\ \rho = f_1 - D(x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x) \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_i \end{cases} \quad (7.16)$$

conociendo explícitamente el valor de $\langle DJ(q), r \rangle$, se puede implementar el método del gradiente para el funcional J . Si se conoce $q_k \in L^2(\Gamma_i)$, el siguiente flujo $q_{k+1} \in L^2(\Gamma_i)$ es

$$q_{k+1} = q_k + \varepsilon_k d_k$$

con $d_k = -DJ(q) = -\rho|_{\Gamma_i}$, entonces

$$J(q_{k+1}) = J(q_k + \varepsilon_k d_k) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k + \varepsilon_k d_k) - q_l \right|^2 ds$$

$$J(q_{k+1}) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon_k \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right|^2 ds$$

Se sabe que existe $\varepsilon_k > 0$ t.q. $J(q_{k+1}) < J(q_k)$ si $DJ(q) \neq 0$, por lo que hay que buscar el que minimice:

$$f(\varepsilon) := \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right|^2 ds$$

Como f es cuadrática, para encontrar el mínimo de f sólo hay que derivar e igualar a cero.

$$f'(\varepsilon_k) = \int_{\Gamma_e} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) + \varepsilon_k \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) - q_l \right) \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) ds = 0$$

Por lo tanto

$$\varepsilon_k = - \frac{\int_{\Gamma_e} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) - q_l \right) \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right) ds}{\int_{\Gamma_e} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(d_k) - \frac{\partial C}{\partial n}(0) \right)^2 ds}$$

Además si se considera que $\delta C_q(d_k) = C(d_k) - C(0)$ entonces

$$\varepsilon_k = - \frac{\int_{\Gamma_e} \left(\frac{\partial C}{\partial n}(q_k) - q_l \right) \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) ds}{\left\| \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(d_k) \right\|_{L^2(\Gamma_e)}^2}$$

Por lo que el algoritmo para encontrar una sucesión $\{q_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subseteq L^2(\Gamma_i)$ t.q.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = q_i^*,$$

donde q_i^* es solución de (7.10) se puede escribir de la siguiente manera:

1. Escoger $q_0 \in L^2(\Gamma_i)$ y $\eta > 0$ criterio de parada.

2. Resolver

$$\begin{cases} \nabla C(q_k) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla C(q_k)) & \text{en } \Omega \\ C(q_k) = C_l & \text{sobre } \Gamma_e \\ D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) = q_k & \text{sobre } \Gamma_i \end{cases} \quad (7.17)$$

Usando $D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) |_{\Gamma_e}$ calcular $J_T(q_k)$ si $J_T(q_k) < \eta$, detener el algoritmo.

3. Resolver el problema dual

$$\begin{cases} \vec{v} \cdot \nabla \rho_k + \nabla \cdot (D_d \nabla \rho_k) = 0 & \text{en } \Omega \\ \rho_k = q_l - D_d \frac{\partial C}{\partial n}(q_k) & \text{sobre } \Gamma_e \\ D_d \frac{\partial \rho_k}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_i \end{cases} \quad (7.18)$$

4. Resolver

$$\begin{cases} \nabla \delta C_q(r) \cdot \vec{v} = \nabla \cdot (D_d \nabla \delta C_q(r)) & \text{en } \Omega \\ \delta C_q(r) = 0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ D_d \frac{\partial \delta C_q}{\partial n}(r) = -\rho_k & \text{sobre } \Gamma_i \end{cases} \quad (7.19)$$

Usar $\delta C_q |_{\Gamma_e}$ y $\phi_k |_{\Gamma_e}$ para calcular ε_k , definir $q_{k+1} = q_k - \varepsilon_k \phi_k |_{\Gamma_m}$ y volver a 2.

7.4.1. Resultados obtenidos

Para probar la eficacia del algoritmo en este dominio, se intento recuperar un flujo dado de 1000 en todo Γ_i , para ello se usó la siguiente malla:

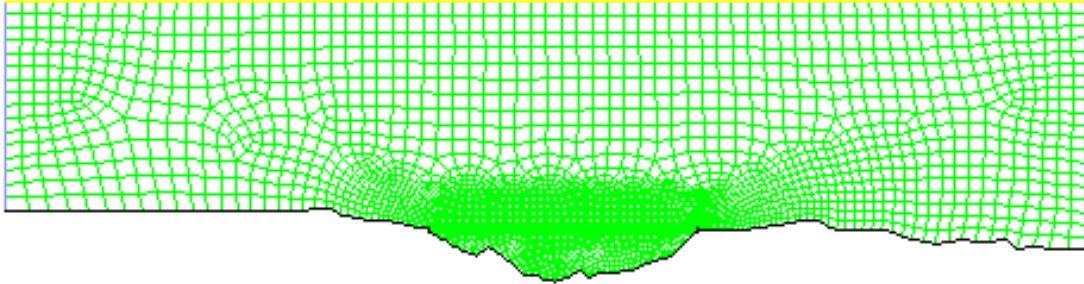


Figura 7.2: Dominio $\Omega \cup \Omega_F$

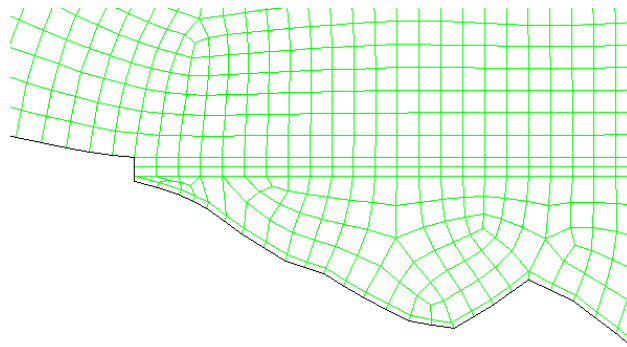


Figura 7.3: Zoom del dominio en la zona del rajo

Para que el método numérico fuese más estable se multiplicó la difusión por un factor $\eta > 0$. Desde ahora en adelante, cuando aparezca $D(x)$ en las ecuaciones se quiere decir $\eta D(x)$. Los resultados se ven en la tabla para $\eta = 100$:

iteración	$\ q_k - 1000\ _{L^2}^2$	$\frac{\ q_k - 1000\ _{L^2}^2}{\ 1000\ _{L^2}^2}$	$J(q_k)$
1	2768140544	0,771758	5102627840
5	654273216	0,182411	789985664
10	295951552	0,082511	98984800
15	553511104	0,154319	22591362

Se aprecia que la solución se aproxima dentro de un 8,3 % en 10 iteraciones y ocurre que efectivamente el funcional $J(q)$ desciende en cada iteración. Notar que hay un aumento del error desde la iteración

10 a la 15, pero eso se debe a que el flujo numericamente no es exactamente 1000.

7.4.2. Resultados con datos experimentales

Realizando algunos experimentos se obtuvo las siguientes concentraciones de PM10 medidas por las cuatro estaciones:

x	$c(x)$
-23498	102
-22088	25
-20109	233
-21347	283

Además se mide una velocidad de 1.86 [m/s]. Dado que en realidad sólo se tienen estas cuatro mediciones es necesario interpolar la concentración pues el algoritmo supone que se conoce en todo el plano Γ_e , así se interpoló linealmente la concentración en la tapa y se obtuvo un flujo q_e , ver figura (7.4).

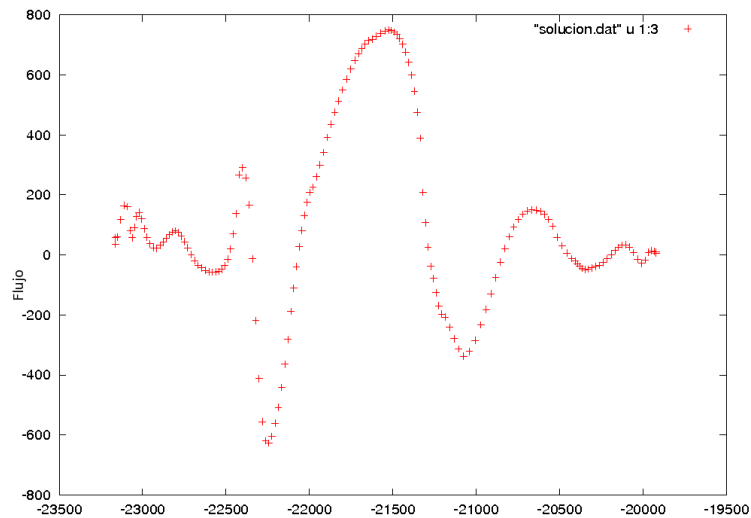


Figura 7.4: Flujo \bar{q} en el raio con $\eta = 100$ y usando una interpolación lineal de los datos

Luego se resolvió el sistema (7.11) con este flujo q_e en Γ_e . El resultado con $\eta = 100$ aparece en el gráfico (7.5).

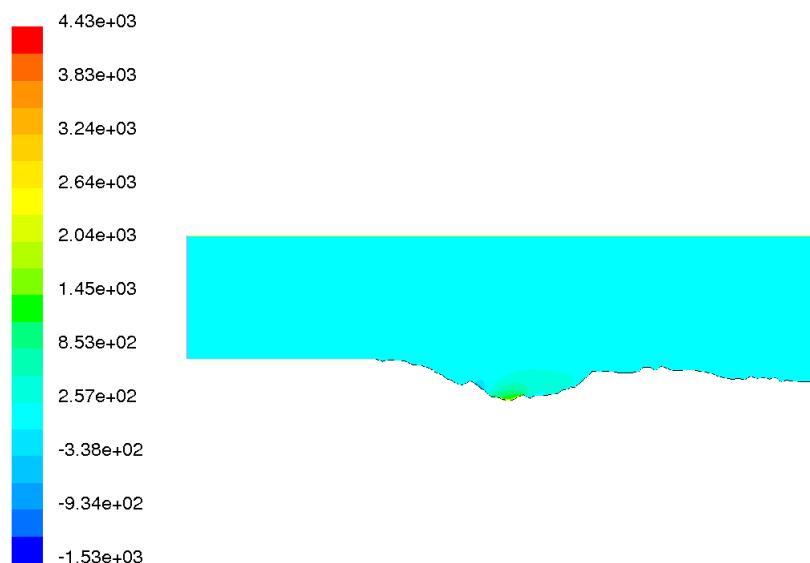
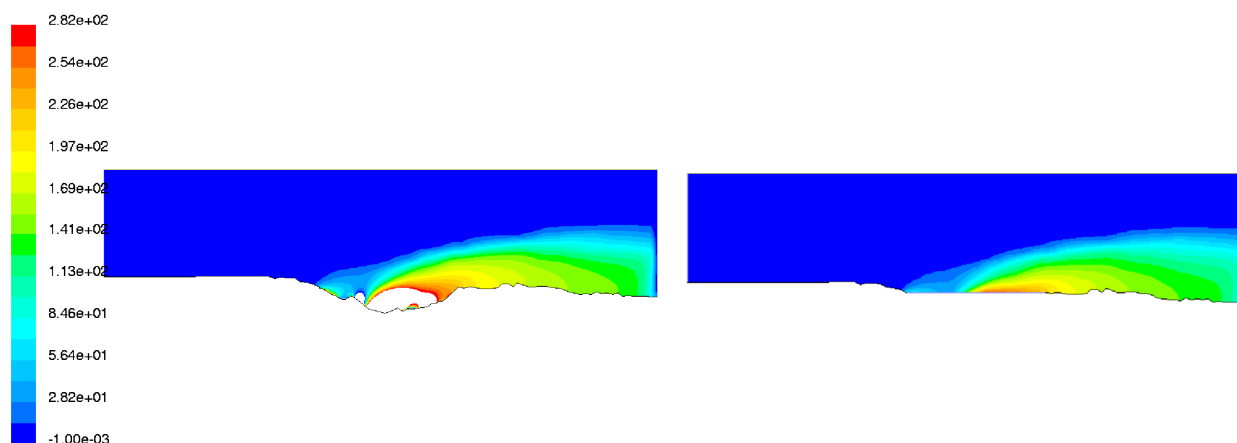


Figura 7.5: Concentración $C(q_e)$ en $\Omega \cup \Omega_F$ con $\eta = 100$

Estos resultados no son los esperados, pues se observan concentraciones negativas. Lo que sí es razonable esperar es que esta solución coincida en Ω_F con la solución de la ecuación (7.12). Se comparó la solución en $\Omega \cup \Omega_F$ usando $q_i \in L^2(\Gamma_i)$ con la solución en Ω_F usando $C(q_i)|_{\Gamma_e}$ (con $\eta = 100$), en Ω_F las soluciones se parecen bastante, los resultados aparecen en la siguiente figura:



Dada la baja velocidad, era razonable intentar disminuir η , en efecto esto fue posible. Para el factor $\eta = 30$, el algoritmo hace disminuir J , es decir funciona, pero para $\eta = 10$ la rutina diverge. Los resultados para $\eta = 30$ fueron similares al caso anterior, el flujo q^* se ve en la figura (7.6).

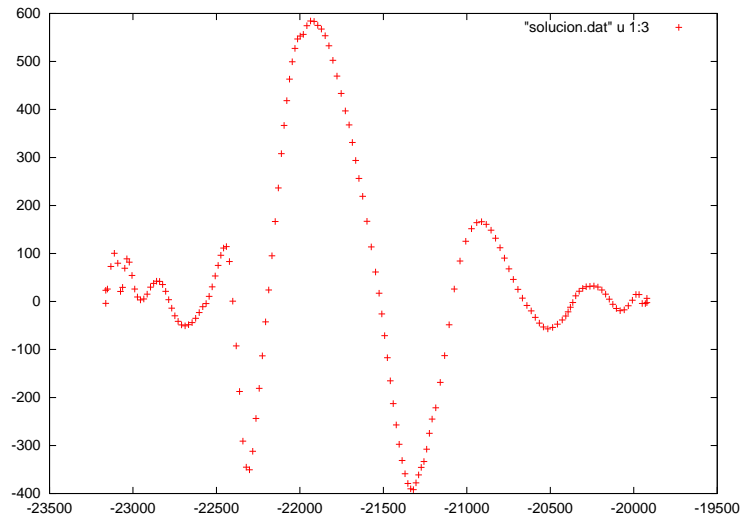
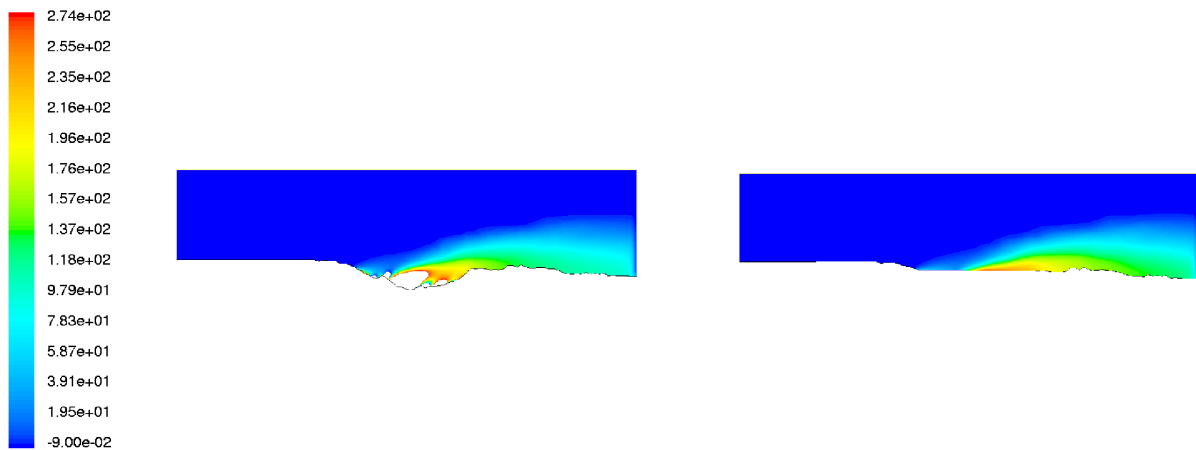


Figura 7.6: Concentración $C(q_e)$ en $\Omega \cup \Omega_F$ con $\eta = 30$

La siguiente figura muestra los resultados para $\eta = 30$. A la izquierda la concentración en $\Omega \cup \Omega_F$ usando $q_i \in L^2(\Gamma_i)$ y a la derecha la concentración en Ω_F usando $C(q_i)|_{\Gamma_e}$:



Todavía se aprecian concentraciones negativas, es decir aún no es un buen resultado. Esto muestra que más que un problema de la magnitud de la difusión es un problema de que la interpolación lineal no es la mejor. Lo que motiva a graficar como es la concentración en la tapa para distintos casos. En la figura (7.7) se muestran las concentraciones sobre la tapa para un $q^* = 1000$ en el rajo y distintos valores de η .

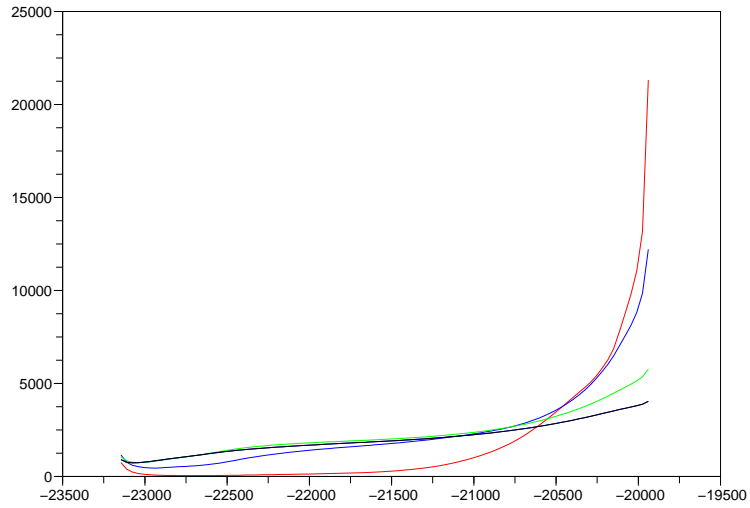
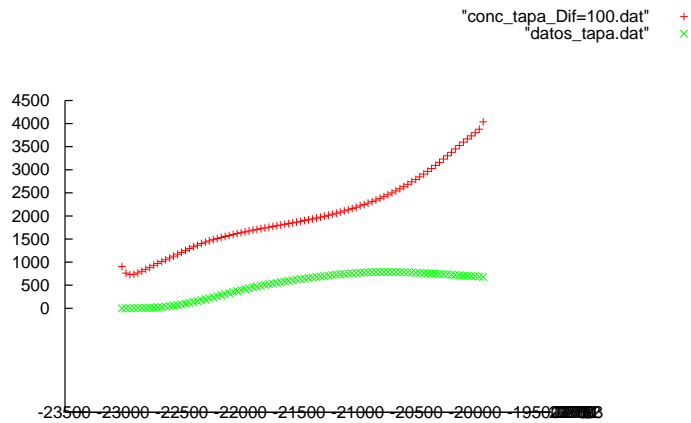


Figura 7.7: Concentración en Γ_e para η 10 (negro), 30 (verde), 50 (azul), 100 (rojo)

En la siguiente figura se visualiza las concentraciones para $\eta = 100$, flujo 1000 constante en el rajo (curva roja), y la otra curva corresponde a concentración en la tapa para $\eta = 100$ y un flujo parabólico entre -22750 y -20750 con un máximo de 600, y cero fuera de este intervalo (curva verde).



Debido a estos resultados se intentó una nueva interpolación, usando sólo tres puntos, y trazando una parábola entre ellos, la cual se ve en la figura (7.8).

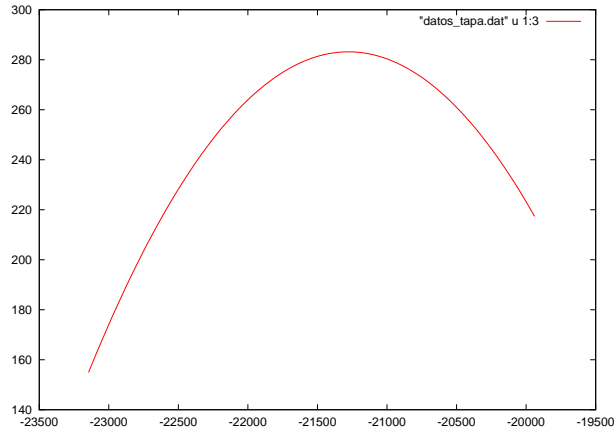


Figura 7.8: Interpolación parabólica, dif 100

Con este nuevo C_0 se corrió de nuevo el algoritmo con $\eta = 100$, logrando buenos resultados, que aparecen en las figuras (7.9), (7.10).

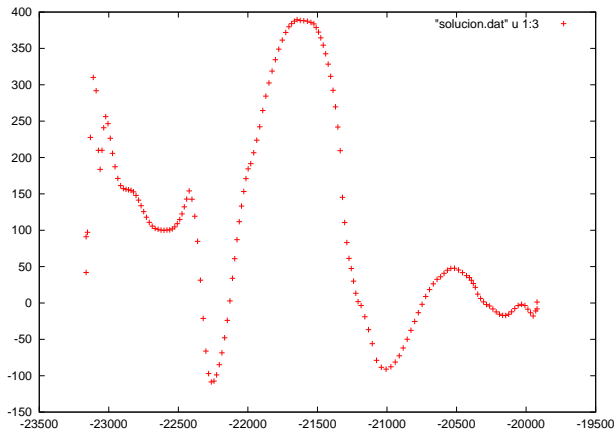


Figura 7.9: Flujo q^* en el rajo, $\eta = 100$

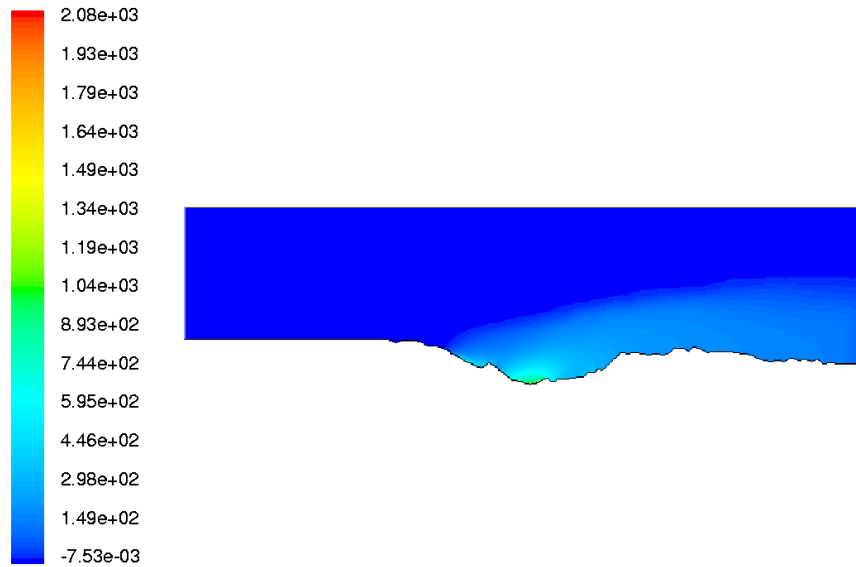


Figura 7.10: Partículas bajo un flujo q^* , $\eta = 100$

Luego se disminuyó η a 30, y se obtuvo los resultados que aparecen en las figuras (7.11), (7.12).

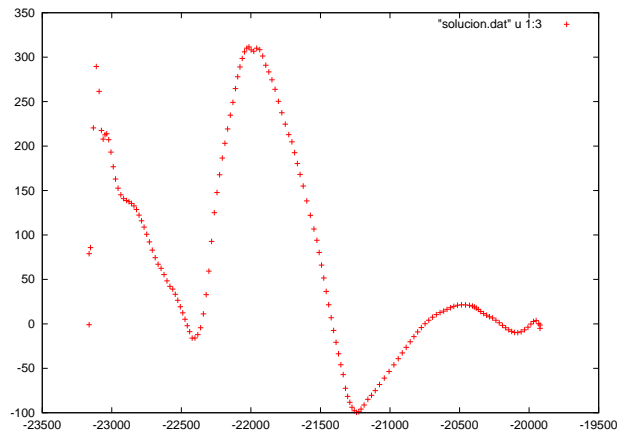


Figura 7.11: Flujo q^* en el rajo, $\eta = 30$

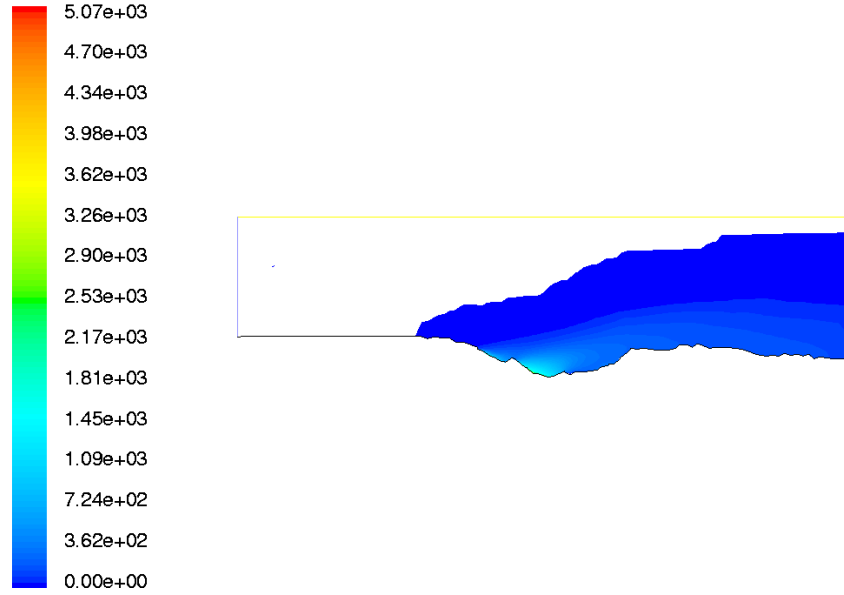


Figura 7.12: Partículas bajo un flujo q^* , $\eta = 30$

7.5. Problema estacionario agregando una fuente

La idea ahora es agregar una fuente pequeña al lado derecho del caso estacionario 2D para poder disminuir el coeficiente que acompaña a la difusión en el algoritmo que lo resuelve, con lo que las ecuaciones quedan:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C_f) + \vec{v} \cdot \nabla C_f = \mu C_f & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ C_f = 0 & \text{sobre } \Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \\ D(x)\frac{\partial C_f}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_{la} \\ D(x)\frac{\partial C_f}{\partial n} = q^*(x) & \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu < 0 \end{array} \right. \quad (7.20)$$

para esto nuevamente consideremos C_f^0 la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C_f^0) + \vec{v} \cdot \nabla C_f^0 = \mu C_f^0 & \text{en } \Omega_F \\ C_f^0 = 0 & \text{sobre } \Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \\ D(x)\frac{\partial C_f^0}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_{la} \\ C_f^0 = C_0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ \mu < 0 \end{array} \right. \quad (7.21)$$

Consideremos $f_1 = -D(x)\frac{\partial C_f^0}{\partial n}$ en Γ_e donde n es la normal exterior a Ω_F . Se define:

$$J : L^2(\Gamma_i) \rightarrow J(q) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| D(x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right|^2 ds$$

donde n la normal exterior a Ω y $C(q)$ la solución única del sistema:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C & = \mu C & \text{en } \Omega \\ C & = C_0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x) \frac{\partial C}{\partial n} & = q(x) & \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu & < 0 & \end{cases} \quad (7.22)$$

Notar que J es una función convexa a valores positivos, además:

$$J(q^*) = 0$$

por lo tanto q^* es un mínimo global de J pero si existe otro mínimo global q_1 , este tendrá también que ser cero de J luego las soluciones C_f^0 y $C(q_1)$ se pegaran bien en Γ_e por lo cual la solución C_f coincidirá con estas funciones en sus respectivos dominios, es decir $q^* = q_1$ lo que implica la unicidad del mínimo.

$$\langle J'(q), r \rangle = \int_{\Gamma_e} \left(D(x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right) D(x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n} ds \quad (7.23)$$

donde $\delta C(r)$ es solución de:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D(x)\nabla \delta C) + \vec{v} \cdot \nabla \delta C & = \mu \delta C & \text{en } \Omega \\ \delta C & = 0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x) \frac{\partial \delta C}{\partial n} & = r & \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu & < 0 & \end{cases} \quad (7.24)$$

Suponiendo que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ y multiplicando la ecuación de $\delta C(r)$ por ρ e integrando por partes se obtiene:

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} \delta C(r) \rho &= - \int_{\Omega} \delta C(r) (\nabla \cdot (D(x)\nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho) + \int_{\partial\Omega} \delta C(r) (D(x)\nabla \rho \cdot \hat{n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \rho D(x) \nabla \delta C(r) \cdot \hat{n} \end{aligned}$$

Con lo cual, imponiendo que:

$$\operatorname{div}(D(x)\nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = -\mu \rho \quad (7.25)$$

y usando las condiciones de contorno de $\delta C(r)$ se obtiene:

$$0 = \int_{\Gamma_i} \delta C(r) (D(x) \frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) - \int_{\Gamma_i} \rho r - \int_{\Gamma_e} \rho D(x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n}$$

Por lo tanto si pedimos que ρ sea solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (D(x)\nabla\rho) + \vec{v} \cdot \nabla\rho = -\mu C \quad \text{en } \Omega \\ \rho = f_1 - D(x)\frac{\partial C(q)}{\partial n} \quad \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial\rho}{\partial n} + \rho\vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu < 0 \end{array} \right. \quad (7.26)$$

Se concluye que:

$$\langle J'(q), r \rangle = \int_{\Gamma_i} \rho r ds \implies J'(q) = \rho |_{\Gamma_i} \quad (7.27)$$

Además notando que $C(q) = \delta C(q) + C(0)$ se tiene:

$$J(q+r) = J(q) + \langle J'(q), r \rangle + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \left| \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n} \right|^2$$

tomando $r = -\varepsilon J'(q)$, se obtiene una parábola en ε , luego el paso óptimo para el método de la dirección de máximo descenso es:

$$\varepsilon_{opt} = \frac{\|J'(q)\|_{L^2(\Gamma_i)}^2}{\int_{\Gamma_e} \left| \frac{\partial \delta C(J'(q))}{\partial n} \right|^2}$$

por lo tanto: $J(q - \varepsilon_{opt} J'(q)) = J(q) - \frac{\varepsilon_{opt}}{2} \|J'(q)\|_{L^2(\Gamma_i)}^2$.

7.5.1. Algoritmo

Nuevamente en este caso, el problema inverso se reduce a un problema de optimización y utilizaremos el mismo algoritmo de la dirección de máximo descenso para resolver, el esquema es el siguiente:

0) Escoger q_0 y $\delta > 0$ criterio de parada del algoritmo.

1) Dado q_k encontrar $C(q_k)$, la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C = \mu C \quad \text{en } \Omega \\ C = C_0 \quad \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial C}{\partial n} = q_k \quad \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu < 0 \end{array} \right. \quad (7.28)$$

2) $d_k := \rho_k |_{\Gamma_i}$ donde ρ_k es solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\text{div}(D(x)\nabla\rho_k) - \vec{v} \cdot \nabla\rho_k = 0 = \mu\rho_k \quad \text{en } \Omega \\ \rho_k = f_1 - D(x)\frac{\partial C(q_k)}{\partial n} \quad \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial\rho_k}{\partial n} + \rho_k\vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu < 0 \end{array} \right. \quad (7.29)$$

3) $\varepsilon_k := \frac{\|d_k\|_{L^2(\Gamma_i)}^2}{\|\frac{\partial \varphi}{\partial n}\|_{L^2(\Gamma_e)}^2}$ donde φ es solución de:

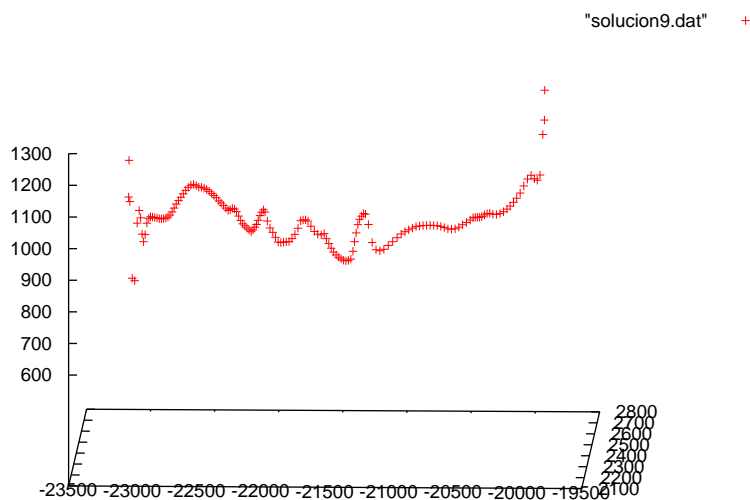
$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D(x)\nabla\varphi) + \vec{v} \cdot \nabla\varphi = \mu\varphi & \text{en } \Omega \\ \varphi = 0 & \text{sobre } \Gamma_e \\ D(x)\frac{\partial\varphi}{\partial n} = d_k & \text{sobre } \Gamma_i \\ \mu < 0 \end{cases} \quad (7.30)$$

4) $q_{k+1} := q_k - \varepsilon_k d_k$

5) Verificar que $J(q_{k+1}) < \delta$, si es así detener la iteración, en caso contrario continuar en el paso (1).

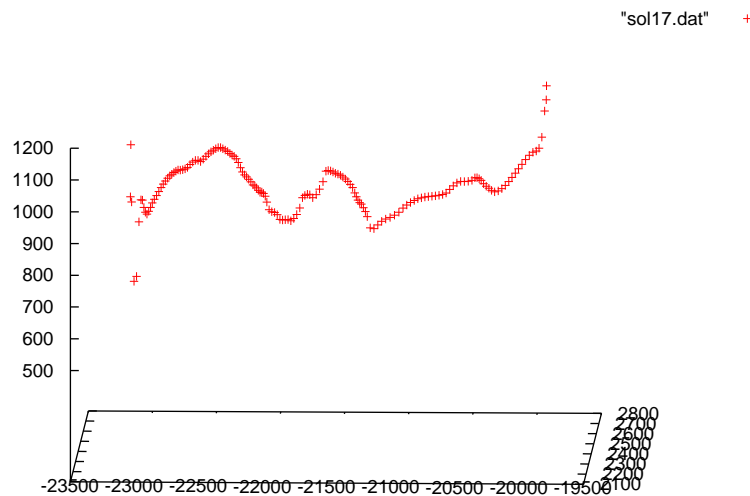
7.5.2. Resultados

Dado que ya se habían hecho pruebas en el no estacionario con $\eta = 75$, se decidió probar con este valor, ahora el problema era determinar el μ adecuado mediante ensayo y error. Las pruebas arrojaron que $\mu = -0,005$ era adecuado llegando a un error del 6,3%, después de 500 iteraciones, entre el flujo estimado q_e y el flujo entregado inicialmente $q^* = 1000$. Cabe notar que este valor corresponde a menos el inverso del paso dt usado para resolver el no estacionario. Aquí podemos ver en un gráfico la solución obtenida:



La solución debiera estar entorno al valor 1000, pues es el valor del flujo q^* usado en problema (7.20), podemos ver que se aproxima salvo en las puntas, lo que ha sido característico en los ensayos numéricos.

Una vez que esto dio resultado se probó con $\eta = 50$ y con $\mu = -0,0025$ se obtuvo un error del 7,7% después de 200 iteraciones, en el gráfico se muestra la solución obtenida:



Nuevamente la solución se mantiene en una franja entorno al valor 1000, aunque se nota el mayor porcentaje de error pues esta solución oscila un poco más que la anterior.

7.6. Problema estacionario con $\eta = 10$.

El objetivo de esta sección es lograr que el algoritmo que resuelve una perturbación del problema estacionario funcione un $\eta = 10$. Para esto se tiene dos estrategias, la primera consiste en perturbar el problema de la siguiente manera, introducir μ 's distintos en las ecuaciones que resuelve el algoritmo, dándole más peso al μ donde la ecuación presente, empíricamente, mayores problemas de convergencia. En el caso en general la ecuación (7.12) resultó ser la más problemática. La segunda estrategia es aumentar el valor absoluto de μ por sobre 100 dejándolo igual en las tres ecuaciones que resuelva el algoritmo.

7.6.1. Resultados

Usando varias combinaciones distintas se logró correr el algoritmo y hasta un cierto número de iteraciones el funcional J disminuye. El problema es que con un η tan bajo como 10 la solución que queda es $q = 0$, dado que f_1 es prácticamente 0.

7.7. Problema inverso de evolución

Dado $T > 0$, se desea a partir de los antecedentes experimentales: concentración de pm10 (C) en la boca del rajo, la velocidad del viento (\vec{v}) $\forall t \in (0, T)$ en el rajo y la concentración en $t = 0$ ($C(\vec{x}, 0) = C_{ini}(\vec{x})$) en el rajo, encontrar el problema inverso, es decir conocer la fuente de material particulado, en particular el flujo de partículas generado al interior del rajo ($q(\vec{x}, t) = \hat{n} \cdot D(\vec{x}, t) \nabla c(\vec{x}, t)$) $\forall t \in (0, T)$.

Se quiere resolver el problema inverso de emisión dentro del rajo. Es decir, dadas las velocidades del viento, la concentración inicial de polvo y la medición en el borde del rajo de la concentración para todo t , encontrar la fuente q de partículas al interior del rajo. Se tiene el siguiente sistema de ecuaciones y condiciones de borde si se supone que el sistema satisface Navier-Stokes, se define Ω_F y Ω tales que:

$$\partial\Omega_F = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{la} \cup \Gamma_e \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_{top}$$

y

$$\partial\Omega = \Gamma_e \cup \Gamma_i$$

Se desea determinar $q^* \in L^2(\Gamma_i) \times (0, T)$ sólo conociendo $C_f|_{\Gamma_e \times (0, T)} = C_0$ donde C_f es la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d}{dt} C_f - \nabla \cdot (D(t, x) \nabla C_f) + \vec{v} \cdot \nabla C_f = 0 & \text{en } (\Omega_F \cup \Omega) \times (0, T) \\ C_f(0) = C_{ini} & \text{en } \Omega_F \cup \Omega \\ C_f = 0 & \text{sobre } (\Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}) \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial C_f}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_{la} \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial C_f}{\partial n} = q^*(t, x) & \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.31)$$

para esto consideremos C_f^0 la solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d}{dt} C_f^0 - \nabla \cdot (D(t, x) \nabla C_f^0) + \vec{v} \cdot \nabla C_f^0 = 0 & \text{en } \Omega_F \times (0, T) \\ C_f^0(0) = C_{ini} & \text{en } \Omega_F \\ C_f^0 = 0 & \text{sobre } (\Gamma_{top} \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}) \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial C_f^0}{\partial n} = 0 & \text{sobre } \Gamma_{la} \times (0, T) \\ C_f^0 = C_0 & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.32)$$

consideremos $f_1 = -D(t, x) \frac{\partial C_f^0}{\partial n}$ en $\Gamma_e \times (0, T)$ donde n es la normal exterior a Ω_F .

Se define

$$J_T : \mathcal{C}((0, T), L^2(\Gamma_i)) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$J_T(q) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Gamma_e} \left| D(t, x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right|^2 ds dt$$

con n la normal exterior a Ω y $C(q)$ la solución única del sistema

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} C - \nabla \cdot (D(t, x) \nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C & = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(0) & = C_{ini} & \text{en } \Omega \\ C & = C_0 & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial C}{\partial n} & = q(t, x) & \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{cases} \quad (7.33)$$

notando que J_T es una función convexa a valores positivos, además

$$J_T(q^*) = 0$$

por lo tanto q^* es un mínimo global de J_T , pero, si existe otro mínimo global q_1 , este tendrá también que ser cero de J_T y por lo tanto la soluciones C_f^0 y $C(q_1)$ se pegarán bien en Γ_e por lo cual la solución C_f coincidirá con estas funciones en sus respectivos dominios, es decir $q^* = q_1$ lo que implica la unicidad del mínimo.

$$\langle J'_T(q), r \rangle = \int_0^T \int_{\Gamma_e} \left(D(t, x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} - f_1 \right) D(t, x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n} ds dt \quad (7.34)$$

donde $\delta C(r)$ es solución de

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \delta C - \nabla \cdot (D(t, x) \nabla \delta C) + \vec{v} \cdot \nabla \delta C & = 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \delta C(0) & = 0 & \text{en } \Omega \\ \delta C & = 0 & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial \delta C}{\partial n} & = r & \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{cases} \quad (7.35)$$

suponiendo que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ y multiplicando la ecuación de $\delta C(r)$ por ρ e integrando por partes se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \delta C \rho \Big|_0^T - \int_0^T \int_{\Omega} \delta C(r) \left(\frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot (D(t, x) \nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho \right) \\ &+ \int_0^T \int_{\partial \Omega} \delta C(r) (D(t, x) \nabla \rho \cdot \hat{n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) - \int_0^T \int_{\partial \Omega} \rho D(t, x) \nabla \delta C(r) \cdot \hat{n} \end{aligned}$$

si

$$\frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot (D(t, x) \nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = 0, \text{ en } \Omega \times (0, T) \quad (7.36)$$

además usando las condiciones de contorno de $\delta C(r)$

$$0 = \int_{\Omega} \delta C(T) \rho(T) + \int_0^T \int_{\Gamma_i} \delta C(r) (D(t, x) \frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) - \int_0^T \int_{\Gamma_i} \rho r$$

$$- \int_0^T \int_{\Gamma_e} \rho D(t, x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n}$$

por lo tanto si pedimos que ρ sea solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot (D(t, x) \nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = & 0 & \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \rho(T) = & 0 & \text{en } \Omega \\ \rho = & f_1 - D(t, x) \frac{\partial C(q)}{\partial n} & \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x) \frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n} = & 0 & \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.37)$$

tenemos

$$\langle J'_T(q), r \rangle = \int_0^T \int_{\Gamma_i} \rho r \, ds \, dt \quad (7.38)$$

con lo cual

$$J'_T(q) = \rho |_{\Gamma_i \times (0, T)} \quad (7.39)$$

Además notando que $C(q + r) = C(q) + \delta C(r)$ se obtiene

$$J_T(q + r) = J_T(q) + \langle J'_T(q), r \rangle + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Gamma_e} \left| D(t, x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n} \right|^2$$

tomando

$$r = -\varepsilon J'_T(q)$$

y gracias a la linealidad de las ecuaciones queda una parábola en ε con lo cual se obtiene que el paso óptimo es

$$\varepsilon_{opt} = \frac{\int_0^T \int_{\Gamma_i} J'_T(q)^2}{\int_0^T \int_{\Gamma_e} \left| D(t, x) \frac{\partial \delta C(J'_T(q))}{\partial n} \right|^2}$$

por lo tanto

$$J_T(q - \varepsilon_{opt} J'_T(q)) = J_T(q) - \frac{\varepsilon_{opt}}{2} \int_0^T \int_{\Gamma_i} J'_T(q)^2$$

7.7.1. Algoritmo para el problema no estacionario

- 0) Escoger q_0 y $\delta > 0$ criterio de parada del algoritmo.

1) Dado q_k encontrar $C(q_k)$, la solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}C - \nabla \cdot (D(t, x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ C(0) = C_{ini} \quad \text{en } \Omega \\ C = C_0 \quad \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x)\frac{\partial C}{\partial n} = q_k \quad \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.40)$$

2)

$$d_k = \rho_k |_{\Gamma_i}$$

donde ρ_k es solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\rho_k + \nabla \cdot (D(t, x)\nabla \rho_k) + \vec{v} \cdot \nabla \rho_k = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \rho_k(T) = 0 \quad \text{en } \Omega \\ \rho_k = f_1 - D(t, x)\frac{\partial C(q_k)}{\partial n} \quad \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x)\frac{\partial \rho_k}{\partial n} + \rho_k \vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.41)$$

3) $\varepsilon_{opt} := \frac{\int_0^T \int_{\Gamma_i} d_k^2}{\int_0^T \int_{\Gamma_e} \left| D(t, x)\frac{\partial \varphi_k}{\partial n} \right|^2}$ donde φ_k es solución de:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\varphi_k - \nabla \cdot (D(t, x)\nabla \varphi_k) + \vec{v} \cdot \nabla \varphi_k = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \varphi_k(0) = 0 \quad \text{sobre } \Gamma \\ \varphi_k = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x)\frac{\partial \varphi_k}{\partial n} = d_k \quad \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.42)$$

4) $q_{k+1} := q_k - \varepsilon_k d_k$

5) Verificar que $J_T(q_{k+1}) < \delta$ si es así detener la iteración, en caso contrario continuar en (1).

7.7.2. La ecuación retrógrada

En este algoritmo, ocurre que la segunda ecuación a resolver es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\rho + \nabla \cdot (D(t, x)\nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \\ \rho(T) = 0 \quad \text{en } \Omega \\ \rho = f_1 - D(t, x)\frac{\partial C(q_k)}{\partial n} \quad \text{sobre } \Gamma_e \times (0, T) \\ D(t, x)\frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \times (0, T) \end{array} \right. \quad (7.43)$$

que tiene como condición de borde temporal $\rho(T) = 0$. Esto genera un problema en la implementación pues el software utilizado (Fluent) solamente resuelve problemas de evolución donde la concentración se supone conocida en el instante inicial, es decir en $t = 0$. Esto obliga a hacer el siguiente cambio de variable

$$\tilde{\rho}(t) = \rho(T - t)$$

que cumple

$$\left\{ \begin{array}{lll} \frac{d}{dt}\tilde{\rho} - \nabla \cdot (D(T - t, x)\nabla\tilde{\rho}) & = & \vec{v}(T - t, x) \cdot \nabla\tilde{\rho} & \text{en } (0, T) \times \Omega \\ \tilde{\rho}(0, x) & = & 0 & \text{en } \Omega \\ \tilde{\rho}(t, x) & = & (f_1 - D\frac{\partial C(q_k)}{\partial n})(T - t, x) & \text{en } (0, T) \times \Gamma_e \\ D(T - t, x)\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial n} + \tilde{\rho}\vec{v}(T - t, x) \cdot \hat{n} & = & 0 & \text{en } (0, T) \times \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.44)$$

Una de las diferencias relevantes con respecto al caso estacionario, es que ya no observamos tantas irregularidades de las soluciones en los bordes del rajo. Esto se debe a que las ecuaciones escalares que se resuelven son del tipo parabólico, es decir una ecuación tipo calor, y es sabido que este tipo de problemas tienen un efecto regularizante. Otra característica interesante es que a partir de cierto instante la solución se vuelve un poco inestable, esto puede deberse a que los problemas de evolución son degenerativos en el tiempo.

7.7.3. Resultados

Lo resultados obtenidos fueron los siguientes:

iteración	$\ q_k - q\ _{L^2}$	$\frac{\ q_k - q\ _{L^2}}{\ q\ _{L^2}}$	$J(q_k)$	$\frac{J(q_k)^{1/2}}{\ f_1\ _L}$
1	1440783,965796	0,467608	13142638723072	142,156877
7	591428,927585	0,191949	87147618304	21,469051
15	539194,405194	0,174996	34474008576	13,503022
21	536856,018538	0,174237	27408451584	12,040024

Esto señala altas variaciones porcentuales de J que indican un avance de nuestra solución hacia el objetivo, y que en la práctica el algoritmo debería detenerse si J aumenta o si no muestra un descenso notorio.

7.8. El problema de estimar la concentración

Se comenzó estudiando el problema de estimación estacionario, se quiere resolver el problema de estimación dentro del dominio, es decir, dadas las velocidades del viento en el dominio y las mediciones puntuales de la concentración de polvo en el borde del rajo, encontrar la fuente q de partículas

al interior del rajo. Se tiene el siguiente sistema de ecuaciones y condiciones de borde si suponemos que el sistema satisface Navier-Stokes: definimos Ω el dominio tal que

$$\partial\Omega = \Gamma_d \cup \Gamma_i \cup \Gamma_n$$

donde Γ_d y Γ_n representan la parte de la frontera con condición Dirichlet y Neumann respectivamente, la frontera Γ_i es donde se desea determinar el flujo de concentración, es decir se desea determinar $q^* \in L^2(\Gamma_i)$ solo conociendo $C_a \in \mathbb{R} \forall a \in P_\varepsilon$ con $P_\varepsilon \subset \Omega$ finito donde C_a es la medición promedio en el punto a es decir dados c_0 y q_1 si C_f es la solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C_f) + \vec{v} \cdot \nabla C_f & = 0 & \text{en } \Omega \\ D(x)\frac{\partial C_f}{\partial n} & = q_1 & \text{sobre } \Gamma_n \\ C_f & = c_0 & \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x)\frac{\partial C_f}{\partial n} & = q^*(x) & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.45)$$

entonces $C_a = (\int_{\Omega \cap B(a,\varepsilon)} C_f) / (\int_{\Omega \cap B(a,\varepsilon)} 1)$ donde $B(a,\varepsilon)$ es la bola de centro a y radio ε en todo esto ε representa el radio de certidumbre de la medición. Definamos

$$J_\varepsilon : L^2(\Gamma_i) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$J_\varepsilon(q) = \sum_{a \in P_\varepsilon} \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a,\varepsilon)} (C(q) - C_a) \right)^2$$

donde

$$1_{B(a,\varepsilon)}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in B(a,\varepsilon) \\ 0 & \sim \end{cases} \quad (7.46)$$

y $C(q)$ la solución única del sistema

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C & = 0 & \text{en } \Omega \\ D(x)\frac{\partial C}{\partial n} & = q_1(x) & \text{sobre } \Gamma_n \\ C & = C_0 & \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x)\frac{\partial C}{\partial n} & = q(x) & \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.47)$$

notamos que J_ε es una función convexa a valores positivos, además

$$J_\varepsilon(q^*) = 0$$

por lo tanto q^* es un mínimo global de J_ε pero no podemos garantizar que sea el único mínimo de J_ε es por ello que este método solo pretende dar una metodología de aproximación es decir minimizar J_ε tratando de partir cerca de q^* .

$$\langle J'_\varepsilon(q), r \rangle = \sum_{a \in P_\varepsilon} \int_{\Omega} 1_{B(a, \varepsilon)} (C(q) - C_a) \cdot \int_{\Omega} 1_{B(a, \varepsilon)} \delta C(r) \quad (7.48)$$

donde $\delta C(r)$ es solución de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (D(x) \nabla \delta C) + \vec{v} \cdot \nabla \delta C = 0 \quad \text{en } \Omega \\ D(x) \frac{\partial \delta C}{\partial n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_n \\ C = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x) \frac{\partial \delta C}{\partial n} = r \quad \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.49)$$

suponiendo que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ y multiplicando la ecuación de $\delta C(r)$ por ρ e integrando por partes se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= - \int_{\Omega} \delta C(r) (\nabla \cdot (D(x) \nabla \rho) + \vec{v} \cdot \nabla \rho) + \int_{\partial \Omega} \delta C(r) (D(x) \nabla \rho \cdot \hat{n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho D(x) \nabla \delta C(r) \cdot \hat{n} \end{aligned}$$

si

$$-\nabla \cdot (D(x) \nabla \rho) - \vec{v} \cdot \nabla \rho = \sum_{a \in P_\varepsilon} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a, \varepsilon)} (C(q) - C_a) \right) \cdot 1_{B(a, \varepsilon)}, \quad (7.50)$$

además usando las condiciones de contorno de $\delta C(r)$

$$0 = \langle J'_\varepsilon(q), r \rangle + \int_{\Gamma_n \cup \Gamma_i} \delta C(r) (D(x) \frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n}) - \int_{\Gamma_i} \rho r - \int_{\Gamma_d} \rho D(x) \frac{\partial \delta C(r)}{\partial n}$$

por lo tanto si pedimos que ρ sea solución de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (D(x) \nabla \rho) - \vec{v} \cdot \nabla \rho = \sum_{a \in P_\varepsilon} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a, \varepsilon)} (C(q) - C_a) \right) \cdot 1_{B(a, \varepsilon)} \quad \text{en } \Omega \\ \rho = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x) \frac{\partial \rho}{\partial n} + \rho \vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \cap \Gamma_n \end{array} \right. \quad (7.51)$$

tenemos

$$\langle J'_\varepsilon(q), r \rangle = \int_{\Gamma_i} \rho r ds \quad (7.52)$$

con lo cual

$$J'_\varepsilon(q) = \rho |_{\Gamma_i} \quad (7.53)$$

Además notando que $C(q+r) = C(q) + \delta C(r)$ se tiene

$$J_\varepsilon(q+r) = J_\varepsilon(q) + \langle J'_\varepsilon(q), r \rangle + \sum_{a \in P_\varepsilon} \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a,\varepsilon)} \delta C(r) \right)^2$$

tomando

$$r = -\varepsilon J'_\varepsilon(q)$$

de esta manera queda una parábola en ε con lo cual se obtiene que el paso óptimo es

$$\varepsilon_{opt} = \frac{\|J'_\varepsilon(q)\|_{L^2(\Gamma_i)}^2}{\sum_{a \in P_\varepsilon} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a,\varepsilon)} \delta C(r) \right)^2}$$

por lo tanto

$$J_\varepsilon(q - \varepsilon_{opt} J'_\varepsilon(q)) = J_\varepsilon(q) - \frac{\varepsilon_{opt}}{2} \|J'_\varepsilon(q)\|_{L^2(\Gamma_i)}^2$$

7.8.1. Algoritmo

- 0) Escoger q_0 y $\eta > 0$ coeficiente de criterio de parada
- 1) Dado q_k encontrar $C(q_k)$, la solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla C) + \vec{v} \cdot \nabla C & = 0 \quad \text{en } \Omega \\ D(x) \frac{\partial C}{\partial n} & = q_1 \quad \text{sobre } \Gamma_n \\ C & = C_0 \quad \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x) \frac{\partial C}{\partial n} & = q_k \quad \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.54)$$

- 2)

$$d_k = \rho |_{\Gamma_i}$$

donde ρ_k es solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla \rho_k) - \vec{v} \cdot \nabla \rho_k & = \sum_{a \in P_\varepsilon} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a,\varepsilon)} (C(q_k) - C_a) \right) \cdot 1_{B(a,\varepsilon)} \quad \text{en } \Omega \\ \rho_k & = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x) \frac{\partial \rho_k}{\partial n} + \rho_k \vec{v} \cdot \hat{n} & = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_i \cap \Gamma_n \end{array} \right. \quad (7.55)$$

3)

$$\varepsilon_{opt} = \frac{\|J'_\varepsilon(q)\|_{L^2(\Gamma_i)}^2}{\sum_{a \in P_\varepsilon} \left(\int_{\Omega} 1_{B(a,\varepsilon)} \varphi_k \right)^2}$$

donde φ_k es solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla \cdot (D(x)\nabla\varphi_k) + \vec{v} \cdot \nabla\varphi_k & = 0 \quad \text{en } \Omega \\ D(x)\frac{\partial\varphi_k}{\partial n} & = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_n \\ \varphi_k & = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_d \\ D(x)\frac{\partial\varphi_k}{\partial n} & = d_k \quad \text{sobre } \Gamma_i \end{array} \right. \quad (7.56)$$

4)

$$q_{k+1} = q_k - \varepsilon_k d_k$$

5) Verificar que $J(q_{k+1}) < \delta$ si es así detener la iteración, en caso contrario, continuar en paso 1).

7.9. Conclusión

Se ha considerado un modelo matemático simplificado, mediante suposiciones físicas adecuadas, para el estudio del problema medioambiental de la emisión de material particulado PM10 al interior del rajo de la mina, el cual permite calcular el flujo y la concentración de material particulado en este dominio.

Los cálculos numéricos muestran la forma en la que el flujo evoluciona, información que puede ser útil para predecir la contaminación atmosférica y la emisión de contaminantes en la mina y sus alrededores, cabe notar que para esto es necesario que el factor que acompaña a la difusividad sea grande (≥ 50) pues, de no ser así, los cálculos numéricos pierden sentido.

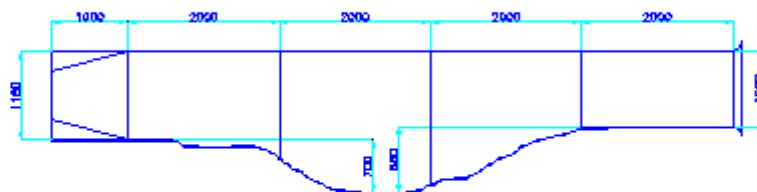
Capítulo 8

Modelo Físico del Rajo - Diseño

Paralelamente al estudio de la predicción del flujo del material disperso en el aire usando el concepto de problema inverso, el Instituto de Innovación en Minería y Metalurgia (IM2) se creó una maqueta del rajo para estudiar de manera empírica el movimiento del material particulado. El siguiente capítulo es un extracto del trabajo realizado por R. Hernández, A. Álvarez y R. Fuentes.

8.1. Detalles técnicos del modelo

La siguiente figura muestra las dimensiones de la maqueta:



Dimensiones de la maqueta

La simbología $(')$ va a representar valores dependiente del prototipo y $(''')$ representa el modelo. La escala es de $\lambda = \frac{(\prime\prime\prime)}{(\prime)} = \frac{1}{1000}$.

Los requerimientos del extractor de aire es de una velocidad de $V'[1 - 10m/s]$, pero si se acepta la similitud de Reynolds $Re'' = Re'$, entonces se debiera obtener que $\lambda_v \lambda_l = \lambda_v$ y $\lambda_v \lambda_l \approx 1$ por lo que $\lambda_v = \frac{1}{\lambda_l} = 1000$, lo cual no es posible.

Por ello se recurre al modelo Euleriano ([3], p.116 Fig.11.7, ver (8.1)), el cual indica que en buena parte de los casos los parámetros que se desean medir no varían en forma apreciable cuando el número de Reynolds Re es mayor que un cierto valor crítico. Guías recopiladas en la literatura dan $Re_0 = 40000$.

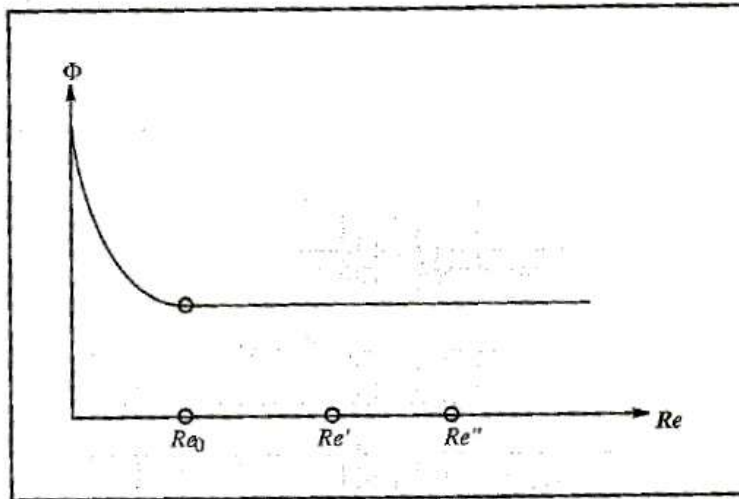


Figura 8.1: Definición de un modelo euleriano

Luego, si el número de Reynolds en el prototipo Re'' es superior a Re_0 , la condición de Reynolds puede relajarse. Si $Re'' \geq 40000$ entonces $\frac{D_{H''} V''}{\nu''} \geq 40000$

donde ν'' : viscosidad cinemática del aire y $D_{H''}$: diámetro hidráulico.

Entonces si: $\nu'' = 15 \times 10^{-6} m^2/s$ a $20C$, $D_{H''} = 4R_{H''}$ y $R_{H''} = \frac{1 \times 1}{4} = \frac{1}{4}$

Con esto, $V'' \geq 40000 \times 15 \times 10^{-6} m/s$ y $V'' \geq 0,6m/s$

Provisoriamente, se toma un valor conveniente para el uso de trazador (gas, plumas u orégano): $V'' = 10m/s$, además se usa un extractor y no un ventilador debido a que permite un mejor control de la capa límite de entrada.

Pérdida de carga: $\Delta P = K_{total} \frac{\rho}{2} V^2$

$$K_{total} = K_{fricción} + K_{singular}$$

$$K_{fricción} = \frac{Lf}{DH}$$

f : factor de fricción de Darcy, $f \approx 0,020$ $K_{fricción} = \frac{8 \times 0,2}{1} = 0,16$

$$K_{singular} = 1$$

$$K_{total} = 1,16 \approx 2$$

$$\Delta P = 2 \times \frac{1,3}{2} \times 100 = 130 Pa \approx 13 mm$$

de agua (10mm de agua equivale 101325 Pa)

Q , flujo en volumen: $Q = VA = 10 \times 1 = 10 m^3/s = 36000 m^3/h$

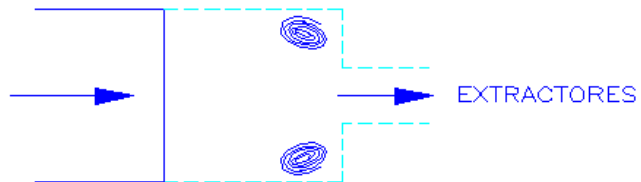
En estas condiciones de altos caudal y perdida de carga, se recomienda:

- 1) Probar con el extractor de Genaro
- 2) Probar con los extractores medianos disponible en el laboratorio del IM2, las curvas *caudal/presión* de estos extractores muestra que será necesario usar 2 extractores. Con estos equipos, se puede lograr un caudal de salida de $3000 [m^3/h]$, correspondiente a una velocidad del orden de $1 m/s$, la cual es suficiente para que no haya problema con los trazadores. Se consideraran las posibilidades de ocupar estos extractores en paralelo y en serie.

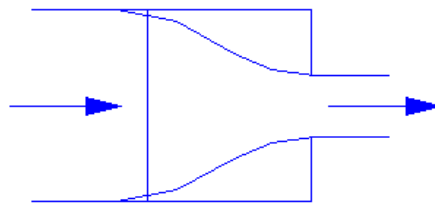
8.1.1. Extractor convergente

Para evitar torbellinos de salida, se recomienda construir una salida convergente. Un convergente correspondiente a una parábola cúbica tangente en los dos extremos sería ideal pero impráctico de reproducir en laboratorio. Se recomienda el uso de placas convergentes como es ilustrado en las siguientes figuras.

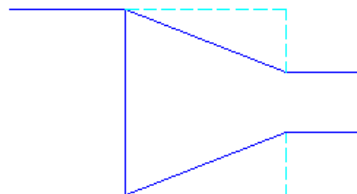
Sin convergente



Convergente ideal



Convergente recomendado



8.1.2. Rugosidades

Las rugosidades corresponden a los escalones (cada 2cm en el modelo cada 20m en el prototipo) en el rajo. El Reynold de rugosidad esta definido por $Re = \frac{V_f k_s}{\nu}$, donde V_f es la velocidad de fricción y k_s : rugosidad equivalente.

$$V_f = V \sqrt{\frac{f}{8}} = 1 \times \sqrt{\frac{0,02}{8}} = 0,05m/s = 5cm/s$$

$$k_s = 2cm = 0,02m$$

$$Re = \frac{5 \cdot 10^{-2} \cdot 2 \cdot 10^{-2}}{15 \cdot 10^{-6}} = \frac{10^3}{15} \approx 70$$

El valor del Reynolds de rugosidad confirma que el sistema esta en régimen rugoso ([3], p.88 Fig.10.2, ver (8.2)).

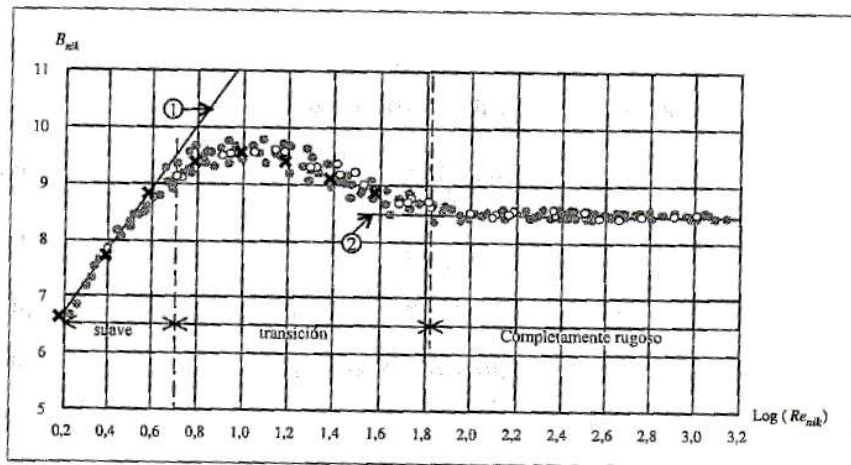


Figura 8.2: Función $B_{nik} = B_{nik}(Re_{nik})$ para la rugosidad de Nikuradse

8.2. Resultados

8.2.1. Introducción

Se reportan las medidas experimentales del flujo del fluido en un modelo de laboratorio del Rajo de Chuquicamata en el IM2. El alambre caliente anemómetro proporciona medidas detalladas de la velocidad en cada una de las 11 estaciones del modelo. Estadísticas de primer y segundo orden se obtienen a través de cada una de las secciones. Las circulaciones locales del fluido y algunas propiedades del comportamiento del fluido del modelo fueron deducidos de los datos experimentales.

8.2.2. Modelo experimental

Un 2D modelo experimental (escala 1:1000) del Rajo de Chuquicamata fue desarrollado en el laboratorio de fluido dinámica del IM2. En la figura (8.3) se muestra un esquema del modelo experimental donde se indican las secciones relevantes donde las medidas del alambre caliente anemómetro fueron realizadas para caracterizar el comportamiento del fluido con diversos números de Reynolds.

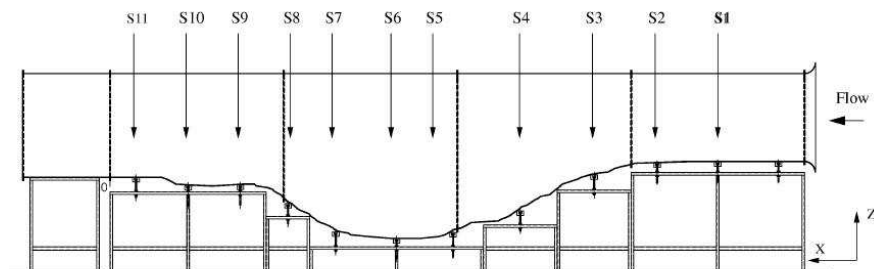


Figura 8.3: Esquema del modelo experimental del laboratorio indicando las secciones relevantes.

La velocidad del flujo fue controlada con una impulsión de PWM Hitachi que gobernaba el motor y el extractor de CA. Los ajustes automáticos de la frecuencia de la impulsión fueron hechos con un sistema de adquisición con D/A. Un voltaje externo pequeño $0 < e < 10$ [voltios] se puede utilizar para cambiar la frecuencia de la impulsión en el rango $0 < F < 50$ [Hz]. Este control externo permitió realizar las mediciones de la velocidad del flujo en cada uno de las 11 secciones indicadas en la figura (8.3) con un computador remoto. El estudio considera diversos regímenes del fluido en función del número de Reynolds, definido por $Re = U_0 z / \nu$ donde U_0 es la velocidad promedio del flujo, z es la altura de la sección y el ν es la viscosidad cinemática del aire. En el rango completo de la impulsión de Hitachi se consiguió regímenes completamente turbulentos con $Re_{sim} = 410^5$.

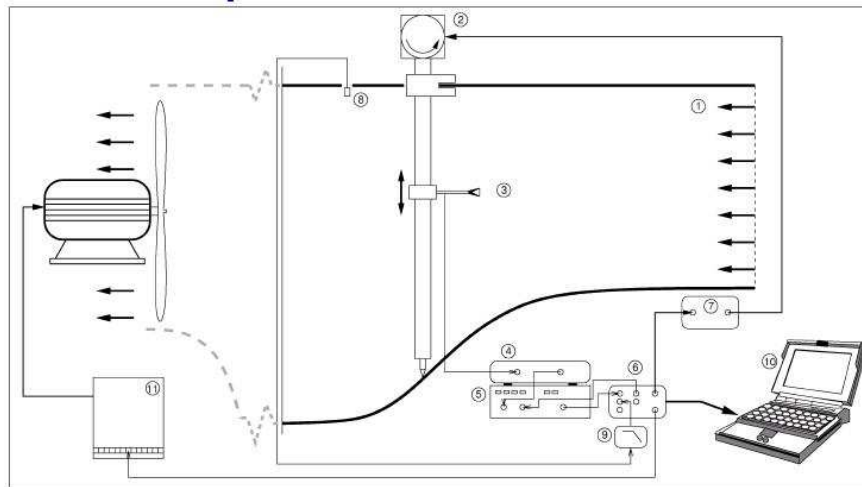


Figura 8.4: Disposición experimental. (1) Sección de entrada del modelo. (2) Posicionamiento del sistema-Z. (3) Punta de prueba caliente TSI del alambre. (4) Anemómetro termal. (5) Pre-amplificador SR 560 . (6) Sistema de adquisición DT322. (7) Interfaz digital para manobriar el sistema-Z. (8) Sensor de temperatura LM35DZ. (9) Filtro del antialiasing. (10) PC. (11) Conductor Hitachi HFC-VWS.

La figura (8.4) muestra los detalles de la disposición experimental usada en cada sección del modelo para registrar la serie de tiempo de velocidad del fluido. Una prueba de punta caliente del alambre conectada con un anemómetro termal entrega una señal del voltaje asociada a la velocidad del fluido. La señal es filtrada y ampliada (pre amplificador SR560) y entonces muestreada con una tarjeta de adquisición de datos DT322. Un interfaz digital D/A controla el sistema que conduce de la punta de prueba caliente del alambre para hacer la exploración automática de velocidad del fluido a través de la sección del modelo.

Para conseguir una velocidad suave favorable a números tan altos de Reynolds, el tiempo de la adquisición debiera ser considerablemente largo, del orden de 5 minutos por series de tiempo en cada posición vertical de la punta de prueba caliente del alambre. Tales series de muy largo tiempo son necesarias para realizar la estadística de una orden más alto (espectros de energía, histogramas, funciones de densidad de la probabilidad, etc). Se utiliza una frecuencia de muestreo constante de 8.192 [kHz] en series de tiempo del orden de 5 millones de puntos de referencias. La frecuencia del filtro antialiasing era 3 [kilociclo] con una pendiente de 12 [dB/Oct].

8.2.3. Posisionamiento del sistema-Z

Para medir favorablemente los datos de la velocidad en tan grandes secciones, se desarrollo un sistema automático para conducir la punta del alambre caliente de prueba a través de cada uno de las 11 secciones del modelo.



Figura 8.5: Sistema motorizado para la posición y el movimiento de la punta del alambre caliente de prueba. (a) Detalles del soporte de la punta del alambre caliente de prueba, del motor de pasos y del carril. (b) Detalles del posisionamiento del sistema-Z con la punta del alambre caliente de prueba montado en la sección S10 del modelo.

Este sistema consiste en un tubo dural cilíndrico con una guía donde un marco de soporte que resbalaba fue concebido para unir el sensor del alambre caliente (ver fig 8.5). El sistema se puede instalar manualmente en cada sección que mide permitiendo conducir la punta del alambre caliente de prueba con una exactitud de $10 \text{ } [\mu\text{m}]$ a través de una exploración vertical total de $1.9 \text{ } [\text{m}]$. El sistema es gobernado por un motor de pasos a través de un interfaz digital conectado con una computadora.

8.2.4. Resultados

En cada sección del modelo, el sensor caliente del alambre realiza una exploración vertical completa de la velocidad del flujo en pasos verticales de $dz = 2.54 \text{ cm}$. El movimiento del sensor del alambre caliente es una secuencia controlada por el ordenador usando el sistema-Z descrito anteriormente. El resultado es un campo de velocidades turbulentas en dos dimensiones (valores absolutos) $U(z, t)$.

Se registraron series de tiempo grandes de la velocidad del flujo usando una punta de alambre caliente de prueba de TSI y el anemómetro termal. Un registro muy de largo plazo de la orden de 5 minutos fue requerido ($\sim 5 \times 10^6$ puntos de referencias por series), en una frecuencia de muestreo de $8192 \text{ } [\text{Hz}]$. El tiempo requerido para cubrir una favorable medición de la velocidad era entre

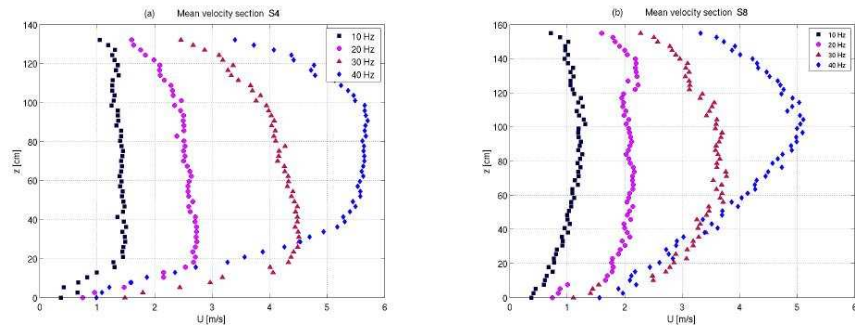


Figura 8.6: Velocidades promedio $\langle U(z, t) \rangle$. (a) En la sección S4 y (b) la sección S8 en función de la coordenada vertical Z.

18 y 40 horas dependiendo del tamaño vertical de cada sección (resolución espacial constante de $dz = 2,54\text{cm}$). Una resolución espacial tan gruesa fue encontrada adecuado para resolver en la capa del borde cerca de las paredes del fondo y de la tapa cuando era físicamente significativo medir ahí.

La figura (8.6) muestra la velocidad promedio en la sección S4 y S8 la cual corresponde al principio y al final de la sección grande del modelo respectivamente. Se observa un cambio dramático de la velocidad máxima cuando se levanta la frecuencia del conductor Hitachi sobre 10 Hz. El flujo es completamente turbulento en ambos casos y la zona de la alta velocidad esta bien localizada en la parte superior del gráfico mientras que el número de Reynolds crece.

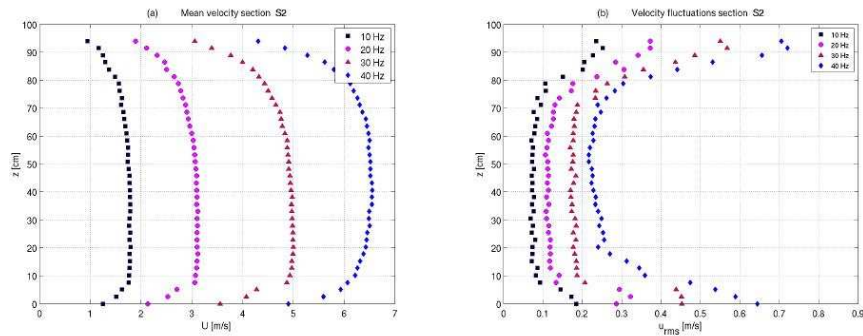


Figura 8.7: (a) Velocidad promedio $\langle U(z, t) \rangle$ y (b) Fluctuaciones de velocidad $U_{rms}(z)$ en función de la coordenada vertical z para 4 valores de la frecuencia de la impulsión de Hitachi (motor-ventilador) en la sección S2.

La figura (8.7) muestra la velocidad promedio y las fluctuaciones de velocidad en función de la coordenada vertical z en la sección S2, la cuál es la entrada del modelo experimental. Se observa

que el flujo es absolutamente suave para todos los números de Reynolds y los fluctuaciones del flujo son absolutamente uniformes a través de la sección aunque aumentan con el número de Reynolds. Encontramos que las fluctuaciones de la velocidad del flujo son absolutamente pequeñas en esta sección de la entrada, de la orden de 3%, no obstante en las secciones del interés principal (S4, S5, S6, S7, S8) que corresponden al modelo del Rajo, las fluctuaciones del flujo pueden alcanzar fácilmente hasta 20%.

8.2.5. Función de densidad de probabilidad y espectro de energía

La figura (8.8) muestra estadísticas de segundo orden para la sección S4, bajo la forma del espectro de energía y funciones de densidad de probabilidad normalizadas(pdf). Los espectros de energía son funciones continuas como en el flujo completamente turbulento. Aunque, diversos escalamientos inerciales se encuentra en regiones cerca de la pared inferior y en la sección central. En esos números relativamente altos de Reynolds no hay evidencia de ningún movimiento periódico en la sección S4. Sin embargo, los histogramas computados (PDFs) no son simétricos, con colas logarítmicas hacia fluctuaciones de baja velocidad que indican la presencia de explosiones de baja velocidad encontrada en la serie de velocidad del tiempo.

8.2.6. Velocidad promedio y fluctuaciones

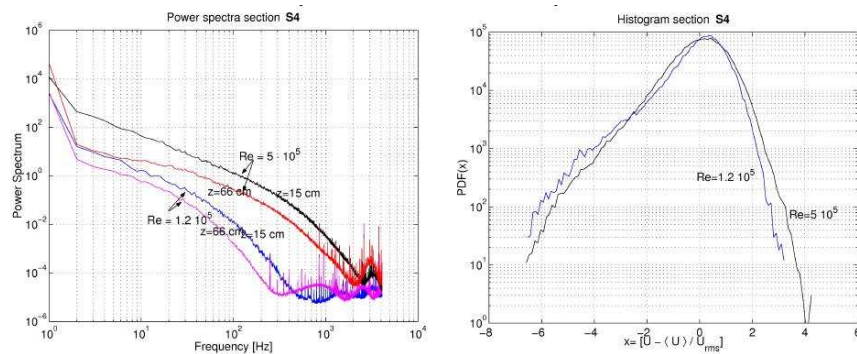


Figura 8.8: Los espectros de energía típicos (izquierda) y las funciones de la densidad de probabilidad (derecha) de la serie de la velocidad del tiempo en la sección S4 para 2 valores del número de Reynolds local , $Re = 1,2105$ y $Re = 5105$ que corresponden a la velocidad de la capa límite ($z = 15$ cm) y a la velocidad en la sección del centro ($z = 66$ cm).

8.2.7. Observaciones y trabajo en progreso

Estadísticas de primer y segundo orden fueron obtenidas sobre el modelo experimental entero. La velocidad del flujo y las fluctuaciones de la velocidad correspondientes indican que los regímenes completamente turbulentos están generados en cada sección del modelo. Particular énfasis fue desplegado en el estudio de las secciones S4 a S8 que corresponden al Rajo en sí mismo. Fuertes circulaciones fueron encontradas en la entrada del Rajo así como en la salida del Rajo que indicaba un complicado e inestable patrón del flujo en los valores particulares del número de Reynolds. Los espectros de energía realizados en serie de la velocidad del tiempo son característicos de flujo completamente turbulentos, donde las leyes del escalamiento entre la energía y las escalas del flujo (números de la onda) están cerca del escalamiento universal de Kolmogorov en la región interna de los espectros. La parte del trabajo pendiente es una visualización completa del flujo usando una hoja con luz láser y trazalíneas de partículas, para determinar las regiones donde la recirculación es la más intensa en el modelo.

Para ver bibliografía de este capítulo observar las siguientes referencias: [6], [7], [8], [9] y [10].

Las imágenes 8.9, 8.10, 8.11 y 8.12 muestran la maqueta cubierta por una cubierta oscura con el objetivo de fotografiar el movimiento.



Figura 8.9: Fotografía de la maqueta

Y por último, la imagen 8.13 es la fotografía entregada por el computador de la velocidad.



Figura 8.10: Fotografía de la maqueta, a la izquierda se puede observar el extractor de aire



Figura 8.11: Fotografía del costado cubierto de la maqueta



Figura 8.12: Fotografía del costado descubierto de la maqueta

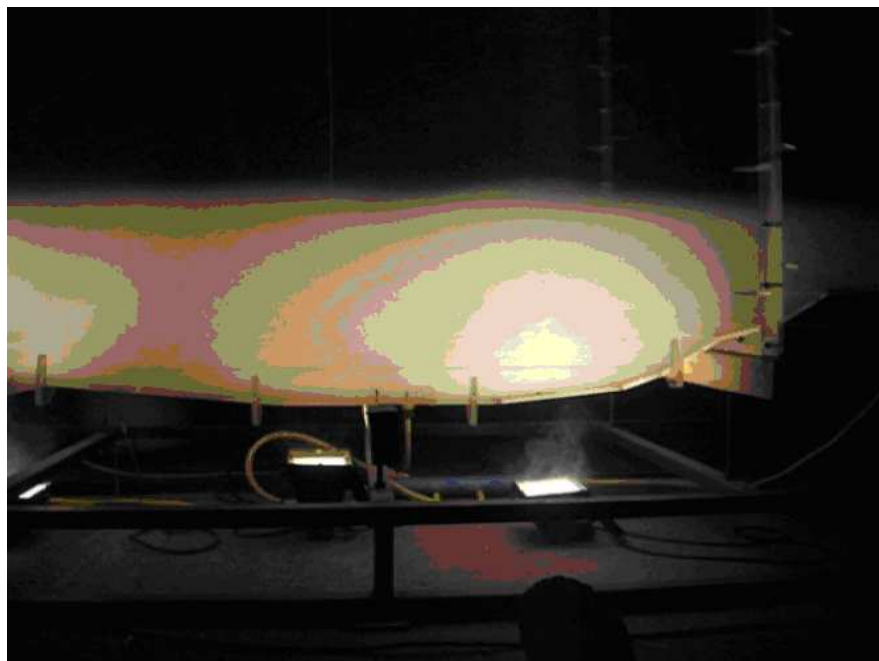


Figura 8.13: Fotografía de la velocidad

Capítulo 9

Conclusión

En aspectos generales, conocer el flujo del polvo en suspensión a partir de mediciones en el otro extremo del dominio de manera exacta es bastante difícil. Todo depende de la forma del dominio Ω , de la difusión y de la velocidad. Estos tres factores combinados son determinantes en la precisión con que se encuentra el flujo q_m^* . Lo fundamental es que el lugar de medición (Γ_l) obtenga la mayor información posible de lo que ocurre en el borde donde se quiere predecir el flujo (Γ_m). En otras palabras, que las partículas sólidas provenientes del muro lleguen al lugar de medición lo más distribuidas posibles. El valor de la difusión es trascendental, si la difusión es pequeña comparada con la velocidad la concentración que se encuentra cercana al muro se va a mantener alrededor a este, concentrando las mediciones significativas sólo en una sección del borde. Hay que considerar la forma del dominio, especialmente el borde de medición, el cual debe ser de una forma tal que obtenga la mayor cantidad de información lo más distribuida posible.

En el caso de los ensayos numéricos realizados con un dominio particular se obtuvo que para el caso estacionario, flujo a estimar constante y alta difusión es bastante factible encontrar este flujo. El funcional J se pudo reducir a un nivel considerado numéricamente como cero, tomando en cuenta el largo del borde q_l y en las dimensiones que se estaban trabajando, se comenzó desde un valor J del orden de 10^8 y se redujo hasta el orden de 10^{-2} en 1000 iteraciones, numéricamente el problema se mantuvo bastante estable, ya al final tuvo algunos problemas en que J aumentaba el valor pero la tendencia siempre fue a la baja. Incluso la tasa de convergencia fue del orden $o(\frac{1}{x^{1.88}})$. Pero, no sólo hay que analizar el comportamiento de J sino que también comparar el valor de q_m^* (flujo en Γ_m del problema directo) con el valor q_k encontrado por el algoritmo. Estos resultados también son muy auspiciosos ya que el error relativo en Γ_m es $\frac{\|q_k - q_m^*\|}{\|q_m^*\|} = 1,12 \cdot 10^{-3}$.

Las pruebas para el caso en evolución fueron menos favorables que en el caso estacionario debido a que el funcional J_T no disminuyó a un nivel significativo aunque en los casos disminuyó un orden de magnitud. Debido a estos resultados, se estudió el error relativo $\frac{\|q_k - q_m^*\|}{\|q_m^*\|}$ como $\frac{\sqrt{2J_T(q_k)}}{\|q_l\|}$, con

estos valores y analizando los gráficos asociados se llegó a la conclusión que en este caso es posible sólo encontrar una tendencia del valor de q_m^* , pero por la velocidad en el espacio Ω y especialmente entorno a Γ_m es difícil encontrar de manera precisa q_m^* . La otra complicación que se enfrentó en las pruebas del problema no estacionario fue el comportamiento anómalo de J_T el cual tiene una oscilación dependiente del valor de T , esto se explica principalmente a errores numéricos presente en la resolución del algoritmo, dado que los problemas en evolución son degenerativos a través del tiempo, si además se le agrega que por cada iteración se resuelven 3 sistemas de ecuaciones, la acumulación de errores es significativa.

La aplicación del problema inverso a la estimación de las partículas PM10 al interior del rajo de la mina es factible bajo algunos supuesto como es de conocer la concentración en todo un borde. En el caso real sólo se conoce el valor de las concentraciones en las estaciones de monitoreo. El mayor problema que se presentó fue el valor de la difusión ya que estos eran muy pequeños para la velocidad utilizada, lo que producía que el sistema asociado al problema dual divergiera, para solucionar este inconveniente se usaron algunos artificios como ponderar la difusión por un valor alto y suponer que existe una fuente en el dominio, todo esto ayudó significativamente a la convergencia del algoritmo, pero la solución encontrada con estos cambios debe coincidir o semejarse al resultado buscado en el caso inicial. Realizando varias pruebas numéricas se pudo reducir el coeficiente acompañando a la difusión a 50 y el valor del factor asociado a la fuente se tomó como $-0,0025$, lo cual entregaron resultados muy acorde al valor buscado en el caso inicial.

Bibliografía

- [1] HOSSEINI SARVARI, S.M., MANSOURI S.H., HOWELL, J.R., “Inverse boundary design radiation problem in absorbing-emitting media with irregular geometry”, Numerical Heat Transfer, Part A, 43: 565-584, 2003.
- [2] CROWE C., SOMMERFELD C., TSUJI Y., “Multiphase Flows with Droplets and Particles”, CRC Press LLC, 1998.
- [3] FUENTES, R., “Modelos Hidráulicos: Teoría y Diseño”, Ed. Lilian Salinas Ayala, Chile, 2002.
- [4] BERTSEKAS, D., “Nonlinear Programming”, 2005.
- [5] “Reglamentación Material Marticulado”, Ministerio de Minería, Chile, 1991.
- [6] SPRINGER, VERLAG, “M. M. Stanisic, The Mathematical Theory of Turbulence”, New York, 1984.
- [7] Mc COMB, W. D., “The Physics of Fluid Turbulence”, Clarendon Press - Oxford, 1990.
- [8] FRISH, U., “Turbulence, The Legacy of A.N. Kolmogorov”, Cambridge University Press, 1995.
- [9] RAE, W. H., POPE, A., WILEY J. & Sons, “Low-speed Wind Tunnel Testing”, New York, 1984.
- [10] GOLDSTEIN, R. J., “Fluid Mechanics Measurements”, Springer-Verlag, New York, 1983.