



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



PROYECTO DE INVESTIGACIÓN INTER Y MULTIDISCIPLINARIO:

Área del proyecto: Matemática Aplicada	Ciencias Básicas <input type="checkbox"/>	Ciencias Aplicadas <input checked="" type="checkbox"/>
FACULTADES: Ciencias e Ingeniería Química		
DEPARTAMENTOS: Matemática (DM) y Ciencias de Alimentos y Biotecnología (DECAB)		
LINEA DE INVESTIGACIÓN: MODELIZACIÓN MATEMÁTICA Y CÁLCULO CIENTÍFICO		

1	Proyecto de Investigación Semilla
Título: Flujos de materiales viscoplásticos en la industria alimenticia: modelización matemática, simulación numérica y optimización.	
Resumen del proyecto (máximo 200 palabras)	
<p>Los fluidos viscoplásticos son materiales caracterizados por un umbral de plasticidad: fluyen únicamente si el tensor de stress supera dicho umbral. Materiales con este comportamiento aparecen en gran cantidad de aplicaciones industriales: fabricación de comida procesada como pastas o jaleas, fabricación de polímeros, etc.. Un cabal conocimiento de estos materiales y su modelización y simulación matemática permitirá optimizar varios procesos industriales. En particular la fabricación y potenciación nutricional de ciertos alimentos.</p> <p>Este proyecto se enfocará en la simulación y optimización del modelo de Herschell-Bulkley. Partiendo de una formulación variacional de estos modelos obtendremos sendos problemas de optimización, para los cuales estudiaremos algoritmos eficientes de solución. Luego, plantearemos y resolveremos un problema de identificación de parámetros para este modelo. Buscamos identificar los valores más sensibles para tener alta concentración de antioxidantes en los productos finales. Validaremos nuestras predicciones teóricas contrastando sus resultados con los resultados obtenidos en el laboratorio de alimentos para ciertos productos específicos: jaleas, pastas y jugos de frutas con alta concentración de antioxidantes. Cuando los modelos de estos materiales estén plenamente ajustados a los resultados experimentales, estudiaremos su optimización. En particular, optimizaremos el modelo buscando aumentar la concentración de polifenoles y betacarotenos, mediante procesos como calentamiento o deshidratación.</p> <p>Palabras clave (3-5): Fluidos viscoplásticos, identificación de parámetros, control óptimo, validación experimental, antioxidantes.</p>	



4 **Objetivos, hipótesis y resultados esperados de esta propuesta de investigación**

- **Objetivos**

- Estudiar en detalle el modelo de Herschell-Bulkley, con parámetros adimensionales. Además, desarrollar algoritmos eficientes para la resolución numérica de este modelo.
- Estudiar y plantear estrategias para la resolución de un problema de identificación de parámetros para el modelo en estudio. Este análisis lo haremos tanto desde la perspectiva teórica, como desde la perspectiva computacional.
- Validar nuestros resultados computacionales, comparando los parámetros obtenidos con los parámetros reales que se obtendrán en la parte experimental con fluidos específicos. Nos centraremos en jaleas y pulpas de frutas con alto contenido en polifenoles (técnicos del DECAB sugieren centrarnos en el taxo, el mortiño y la mora).
- Plantear y resolver problemas de optimización de los modelos validados y asociados a los materiales de interés (jaleas y mermeladas de las frutas especificadas), buscando obtener productos de alta concentración en antioxidantes.

- **Hipótesis**

- La regularización de tipo Huber permite construir problemas regularizados cuyas soluciones aproximan en forma adecuada a las soluciones reales de los modelos en estudio.
- Los parámetros de los fluidos en estudio (jaleas, jarabes, mermeladas y pastas de ciertas frutas) se pueden definir como funciones de la concentración de azúcares, grasas, alcoholes, etc., y es posible estimarlos teóricamente.
- Es posible optimizar la concentración de ciertos componentes, como antioxidantes, en productos como mermeladas y pastas a través de procesos como el calentamiento, el secado o la humidificación de los mismos.

- **Resultados esperados**

- Dos publicaciones al final del proyecto. Los títulos tentativos de estos artículos serían:
 1. *"MGOPT Methods for Optimization Problems Arising in Non-Newtonian Fluids Simulation."*
 2. *"Identification Parameter Problem for a Class of Variational Inequalities of the Second Kind: Applications in Non-Newtonian Fluids."*



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



Estos manuscritos serán enviados a revistas internacionales indexadas en la *Thomson Scientific Master Journal List* (publicaciones ISI), como *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* o *International Journal on Numerical Methods in Fluids*.

- Al menos dos ponencias a ser presentadas en conferencias internacionales. Aplicaremos a la conferencia *VI Workshop Viscoplastic Fluids: from Theory to Applications*, la cual se llevará a cabo en Canadá el año 2015 y a la *IFIP TC/7 Optimization and Simulation Conference*, la cual se llevará a cabo en Francia en el año 2105.
- Una tesis de maestría. El estudiante que desarrolle esta tesis se incorporará a este proyecto como profesional, esperamos que con un contrato de servicios académicos temporales. El título tentativo de la tesis sería "*Estudio del problema de identificación de parámetros para los modelos de Bingham y Herschel-Bulkley: aplicación a la industria alimenticia*".
- Construiremos un prototipo de software para la simulación numérica del flujo de ciertos materiales viscoplásticos: flujo estacionario, flujo dependiente del tiempo y flujo convectivo.
- **Potenciales Usuarios**

Si bien este proyecto está orientado a brindar soluciones a la industria alimentaria, debido a la gran cantidad de aplicaciones en las que aparecen los flujos de materiales viscoplásticos, el rango de potenciales usuarios de esta investigación es amplio. Los resultados de este proyecto serán de particular interés para:

- **Plantas procesadoras y productoras de alimentos:** materiales tan diversos como las masas de cereales (pan), jarabes de fruta (mermeladas) y el chocolate, se comportan como fluidos viscoplásticos. Muchos de estos materiales deben ser sometidos a procesos como calentamiento, deshidratación, etc., para su procesamiento industrial (Ver [12,14]). Estos procesos afectan sus propiedades alimenticias. Por esta razón es importante conocer su comportamiento al ser sometidos a dichos procesos. Con esto, podremos ayudar a mejorar los procesos de elaboración de alimentos que dependen de estas materias primas. En particular, estamos interesados en optimizar la producción de productos de ciertos tipos de frutas, potenciando la concentración de antioxidantes en los productos finales.
- **La industria petrolera:** es conocido que el petróleo, sobre todo los crudos cerosos, se comporta como un fluido viscoplástico (ver [18]). Son, por tanto, múltiples las aplicaciones de la investigación propuesta en la industria petrolera. Por ejemplo, los procesos de encementamiento de pozos, diseño de taponos para fugas de flujo en yacimientos, etc. (ver [4]).
- **Institutos geofísicos:** En los últimos años se ha propuesto un modelo basado en la estructura de los materiales viscoplásticos y viscoelásticos para modelar el comportamiento del manto terrestre. Además, se sabe que las lavas obedecen un comportamiento de fluido viscoplástico. Con estos antecedentes, estamos seguros que los resultados de esta investigación podrían ser de utilidad también para el instituto geofísico de la EPN. Esto permitiría que la colaboración entre el ModeMat y el IGEPN genere futuras investigaciones en el área, las cuales podrían ayudar a la elaboración de planes de prevención y mitigación de desastres sísmicos, ubicación de zonas de riesgo, etc.
- **Médicos e investigadores en ciencias biomédicas:** se ha logrado establecer que la sangre, en pequeños capilares, se comporta como un fluido viscoplástico debido a la compactación de las células sanguíneas (plaquetas y glóbulos rojos) en geometrías "estrechas" como capilares y pequeños vasos sanguíneos (ver [13]). La modelización y simulación de este tipo de comportamiento de la sangre pueden ser aprovechados para entender y simular los derrames y accidentes vasculares en zonas delicadas de acceder como el cerebro. Gracias a esto, se pueden desarrollar, a futuro, métodos óptimos de diagnóstico y tratamiento de estos problemas.



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



- **Empresas petroquímicas:** los polímeros, en general, pueden ser modelados como fluidos viscoplásticos. Por tanto, su diseño, elaboración y uso industrial pueden ser optimizados al contar con un simulador que permita predecir su comportamiento al ser sometidos a diversas pruebas. Por ejemplo, los cambios de temperatura cambian sus propiedades y esto puede afectar los productos que están elaborados con estos materiales. Si bien es un campo nuevo dentro de este análisis, tiene un gran potencial en términos de aplicaciones industriales y académicas.

Si bien el potencial de esta investigación es amplio, los mencionados son campos en los cuales hay un interés especial, debido a las potenciales colaboraciones tanto al interior de la EPN como con otros centros de investigación y entes productivos del país.

5 Relevancia de esta propuesta de investigación con los objetivos científicos del departamento y su línea de investigación.

Este proyecto se enfoca en la simulación y optimización de fluidos viscoplásticos que aparecen en la industria alimenticia. En este aspecto, el proyecto se encuadra en la línea de investigación, definida por el Departamento de Matemática, de "Modelización y Cálculo Científico". Dicha línea busca desarrollar técnicas eficientes para la solución de problemas con gran potencial en términos académicos y prácticos. Este proyecto plantea un tema clave en la simulación de este tipo de fluidos y, consideramos, aporta de forma significativa al desarrollo de esta línea de investigación.

Desde la perspectiva práctica, el estudio de estos modelos y su optimización resulta de gran utilidad en aplicaciones en la industria de alimentos. En efecto, contar con herramientas de simulación eficientes de estos fenómenos, permitiría optimizar los procesos productivos en la fabricación de pan, pulpas de frutas, jarabes, etc. De aquí que hayamos decidido empezar esta colaboración de alto nivel con el DEBCA. En particular, el interés radica en optimizar la producción de productos finales con cierto tipo de frutas como materia prima. Estas frutas serán seleccionadas por su alto contenido en componentes antioxidantes, como los polifenoles, los cuales son coadyuvantes en procesos de regeneración celular, procesos anti envejecimiento, y potenciales tratamientos de enfermedades asociadas con el envejecimiento celular.

Cabe destacar, además, que la simulación de fluidos, campo esencial de la línea de investigación "Modelización y Cálculo Científico", ha sido uno de los temas de mayor desarrollo en el Departamento de Matemática de la Escuela Politécnica Nacional. En los últimos años científicos del Departamento han publicado más de 12 artículos internacionales (ISI) en esta temática. Además, varias ponencias internacionales han sido aceptadas en eventos científicos de gran importancia, como los *IV y V Workshops in Viscoplastic Fluids: From Theory to Applications*, desarrollados en Río de Janeiro (11/2011) y Rueil de Mailmaison (11/2013). De hecho, el director de esta propuesta ha sido invitado a ser parte del comité organizador de la VI edición de esta conferencia, la cual se realizará en Canadá el año 2015. Esta conferencia es uno de los eventos más importantes del mundo en esta temática.

6 Descripción del proyecto, metodología, cronograma de trabajo y justificación del equipo requerido

- **Descripción del proyecto**

Los fluidos viscoplásticos son aquellos materiales caracterizados por un umbral de plasticidad. Es decir, materiales que se comportan como un sólido rígido cuando el tensor de estrés es menor a un umbral de plasticidad, pero que fluyen como un fluido viscoso una vez que el tensor de estrés supera dicho umbral. En los últimos años el interés en estos fluidos ha crecido, debido a que materiales tan diversos como el concreto fresco, masas de diversas harinas, jarabes, sangre en capilares, jaleas, mermeladas, chocolate, entre otros, se comportan como fluidos viscoplásticos (Ver [7,12,14]).

En particular, el interés en la industria alimenticia se ha potenciado ya que la evidencia experimental muestra no solo que diversos productos procesados como pastas de cereales, jarabes, extractos dulces etc., usados como materias primas en la producción de alimentos, se comportan como



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



materiales viscoplásticos, sino que la modelización de su comportamiento puede ayudar a mejorar la calidad alimenticia e industrial de estos productos (Ver [12,14]). En el caso del yogurt, por ejemplo, se ve que tanto el modelo de Bingham como el modelo de Herschell-Bulkley explican su comportamiento y que, al menos experimentalmente, una mayor concentración de grasas cambian su comportamiento en los reómetros. Por otro lado, estudios realizados por científicos del DECAB-EPN muestran que existen frutas (mora, mortiño, taxo) que presentan altos contenidos de antioxidantes que, potencialmente, serían coadyuvantes en procesos de regeneración celular, procesos anti envejecimiento, y potenciales tratamientos de enfermedades asociadas con el envejecimiento celular. Consideramos, por tanto, que un cabal conocimiento de este fenómeno y su modelización y simulación numérica, nos permitirá entender y optimizar los procesos mencionados. Este convencimiento motiva la presente propuesta.

Comenzaremos este proyecto estudiando el modelo general dado por el siguiente problema de minimización:

$$\min_{u \in W_0^{1,\nu}} J(u) := \frac{1}{\nu} \int_{\Omega} |\nabla u|^{\nu} dx + g \int_{\Omega} |\nabla u| dx - \int_{\Omega} f u dx,$$

donde $1 < \nu < \infty$, $g > 0$ y f es una fuerza que se puede asociar, por ejemplo, a una fuente de calor. Se sabe que si $\nu=2$, este problema representa el modelo de Bingham. En todos los demás casos, estamos en presencia del modelo de Herschell-Bulkley para fluidos dilatantes $\nu > 2$ y fluidos contractantes $\nu < 2$. El parámetro $g > 0$ es el umbral de plasticidad que caracteriza a estos materiales.

Esta propuesta tiene tres etapas: un estudio teórico, numérico y experimental de los modelos y problemas asociados, un proceso de validación experimental de nuestros modelos y, finalmente, la optimización de los mismos. Describimos, entonces, estas etapas.

Al inicio estudiaremos métodos de resolución eficiente para el problema mostrado. Contar con un método de resolución numérica eficiente para todos los posibles valores de los parámetros es clave para las etapas posteriores del proyecto. Un problema importante al estudiar estos modelos radica en que el término del gradiente es no diferenciable. Para superar este inconveniente, proponemos una regularización de tipo Huber para este término (ver [2,8,9]). Gracias a este proceso, obtenemos una familia de problemas regularizados diferenciables, cuyas soluciones convergen a la solución real del problema. Entonces, proponemos utilizar algoritmos de optimización basados en un método preconditionado del gradiente, el cual mostró ser eficiente en el caso del problema del p-Laplaciano, operador que aparece también en nuestro problema ($-\text{div}(|\nabla u|^{p-2} \nabla u) \rightarrow \int_{\Omega} |\nabla u|^p dx$: Ver [11]). Además, combinamos este algoritmo con un proceso de búsqueda lineal basado en métodos de interpolación.

El siguiente paso en esta etapa es plantear un problema de identificación de parámetros para los modelos en estudio. El objetivo es ajustar los parámetros del modelo, de forma que podamos representar con precisión el comportamiento de los materiales que queremos analizar. Para este fin, es preciso, primero, modelizar los parámetros del modelo (viscosidad, plasticidad, etc.) como funciones de variables diversas como la concentración de ciertos componentes en el producto. Para esto, necesitaremos el soporte del laboratorio del DECAB para, mediante reómetros, medir como se comportan dichos parámetros para distintas concentraciones de azúcares, agua, etc. De forma paralela, estudiaremos un problema general de identificación de parámetros del modelo adimensional. Al final de esta etapa, consolidaremos los resultados teóricos y experimentales, para obtener un modelo que pueda describir con precisión los distintos estados de un material, i.e., jugos, jaleas o pastas de las frutas en estudio, sometidos a calentamiento, deshidratación, liofilización, etc. De esta forma, podríamos analizar el problema como identificación de parámetros para un problema de tipo Houska asociado a los modelos en estudio (Ver [1,6,15]).

En la segunda etapa, buscaremos validar los resultados obtenidos en los modelos teóricos, con los resultados obtenidos en el laboratorio. En particular, pretendemos comparar nuestras predicciones con los resultados arrojados por los reómetros al analizar jaleas y pastas de frutas como el taxo o el mortiño. Es conocido que estas frutas tienen alto contenido de polifenoles, los cuales son antioxidantes altamente apreciados. Entonces, queremos que nuestro modelo sea validado con estos



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



materiales. El interés es doble: por un lado, tenemos un modelo teórico que nos permite simular adecuadamente el comportamiento físico de estos productos. Por otro lado, tenemos un modelo con el cual podemos plantear varios procesos de optimización en la producción y en la potenciación de los mismos.

Esto nos permite avanzar hacia la última parte del proyecto. Como mencionamos anteriormente, en el planteamiento del problema de identificación de parámetros consideraremos que los mismos son funciones de variables diversas. La intención es que podamos optimizar el modelo buscando potenciar alimenticiamente a los productos finales y, si es posible, optimizar su producción. Por ejemplo, buscaremos modelar los parámetros de viscosidad, densidad y plasticidad como funciones de la concentración de azúcares, carbohidratos, grasas, etc. De esta forma, podemos primero simular la reacción de estas concentraciones al exponer los materiales a una fuente de calor o a enfriamiento, o a un aumento de humedad o procesos de secado como liofilización, etc. Luego, podemos plantear un problema de optimización con el modelo validado, tratando de obtener la mayor concentración de los antioxidantes posible. En este punto, cabe resaltar que serán claves para obtener resultados válidos, los resultados obtenidos en el proyecto semilla PIS 12-17 "Convección Natural en Fluidos Viscoplasticos: Modelización Matemática y Simulación Numérica" donde analizamos el comportamiento y la simulación numérica del flujo de materiales viscoplasticos en presencia de fuentes de calor.

- Metodología y diseño de la investigación

- *Técnicas de regularización de Huber.*- Estas técnicas consisten en reemplazar una función no diferenciable por una versión continuamente diferenciable de la misma, la cual conserve las principales características cualitativas de la función original, salvo en una vecindad destinada a converger a un conjunto vacío o de medida nula. En el contexto de los fluidos de Bingham, esto hace que no sea necesario distinguir computacionalmente las zonas rígidas de las zonas plásticas. La frontera que separa a estas zonas dependerá solamente del umbral de plasticidad y de la viscosidad, haciendo que su simulación sea precisa y accesible computacionalmente (ver [2,8,9]).

- *Método preconditionado del descenso más profundo.*- Los métodos del descenso son métodos clásicos para la resolución de problemas de optimización. La idea es generar una sucesión $\{x_k\}$ tal que $x_k \rightarrow x^*$, donde x^* es la solución del problema, siguiendo la idea siguiente:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k,$$

donde p_k es una dirección de descenso, esto es, una dirección que satisface

$$J'(u_k)p_k < 0,$$

y α_k es un parámetro escogido mediante un proceso de búsqueda lineal como el método de Armijo. Un tema delicado en el tipo de problemas en estudio es la selección de la dirección de descenso p_k . Proponemos adaptar el método presentado en [11] para el problema clásico del p-Laplaciano: tomar como dirección de descenso la solución de la ecuación variacional

$$\int (\nabla p_k, \nabla v) dx = -J'(u_k)v, \quad \forall v \in V,$$

donde V es un espacio de Banach en el cual se ha formulado el problema (en nuestro caso $W_0^{1,p}(\Omega)$). Con esta idea, podemos obtener un algoritmo de solución eficiente con bajo costo computacional.

- *Métodos multimalla para problemas de optimización.*- Los métodos multimalla son técnicas desarrolladas para la solución eficiente de sistemas discretos a gran escala. Una vez discretizado Ω con N nodos, definimos varias mallas más gruesas (con menos nodos de discretización) tomando, de forma adecuada, varios nodos de la discretización inicial. A estas mallas más gruesas las llamamos niveles y las denotamos por Ω_k , con $k=1, \dots, N$. Luego, discretizamos el funcional a ser optimizado en cada nivel Ω_k , al cual llamaremos $J_k(u_k)$. Gracias al análisis local de Fourier (ver [16]), sabemos que el error de aproximación al resolver el problema de minimización de cada $J_k(u_k)$ funcional, en cada nivel k , representado en un espacio de Fourier, tiene dos componentes principales: los errores de alta frecuencia y los errores de baja frecuencia. Entonces, las técnicas multimalla combinan dos procesos complementarios para relajar y reducir el error global de aproximación. Primero, se construyen procesos de relajación



**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL**



para reducir los errores de alta frecuencia. Estos procesos son desarrollados a partir de los métodos iterativos de optimización como el método preconditionado del descenso más profundo, como el descrito en el ítem anterior. Si bien estos procesos no reducen de forma rápida los errores de aproximación, los relajan en pocas iteraciones, reduciendo el peso de los componentes de alta frecuencia en el error global. Una vez que se ha suavizado el error global de aproximación, al relajar sus componentes de alta frecuencia, se realiza un proceso conocido como “*coarse-grid correction*” o corrección en las mallas más gruesas. Con este proceso se corrigen los componentes de baja frecuencia del error de aproximación. La idea fundamental es proyectar eficientemente el problema a la malla más gruesa, $k=1$, y resolverlo ahí de forma exacta.

Es claro que en esta malla la solución del problema tendrá un costo computacional mínimo, en comparación con la solución directa en la malla más fina. Una vez que el problema está resuelto, se “transporta” esta solución exacta a la malla más fina, donde se corrige adecuadamente. El resultado de este proceso es la solución aproximada al problema. Estas técnicas han probado ser muy eficientes en la solución numérica de varios problemas de control óptimo y optimización (ver [5,16]) razón por la cual proponemos utilizarlas en este proyecto.

Estimación de parámetros y modelización. - Un problema típico en la modelización es relacionar parámetros físicos que caracterizan un modelo m a observaciones recogidas en un conjunto de datos \mathbf{d} fruto de observación, experimentación u otro método empírico de recolección de datos. En estos casos, la física del problema está representada por una función G que relaciona m y \mathbf{d} , i.e.,

$$G(m)=\mathbf{d}.$$

El problema principal radica en que, usualmente, los datos recogidos contienen ruido, el cual se debe a problemas de redondeo, equipos con precisión reducida, etc. La idea es definir nuestros datos como una desviación, producida por un ruido η que afecta a los datos perfectos \mathbf{d}_{real} . Así, tenemos que

$$\mathbf{d}=G(m_{real})+\eta \\ =\mathbf{d}_{real}+\eta$$

Con estas ideas, podemos definir varios tipos de problemas: el problema directo es hallar los datos \mathbf{d} conociendo el modelo m . El problema inverso es hallar el modelo m , conociendo los datos \mathbf{d} . Este es el tipo de problemas que nos interesa: conociendo las mediciones de varias propiedades de los materiales como viscosidad, elasticidad, etc., tratar de encontrar un modelo que se ajuste a nuestros requerimientos: altas concentraciones de polifenoles y otros componentes específicos. Para lograr este objetivo, plantearemos un problema como un problema de control óptimo en los coeficientes del modelo, el cual está dado, en forma general por

$$\min_{\mu, g \in \mathcal{I}} \psi(\mu, g, \mu_{real}, g_{real})$$

sujeto a

$$\mu \int_{\Omega} |\nabla u|^{p-2} \nabla u \cdot \nabla (v - u) dx + g \int_{\Omega} |\nabla v| dx + g \int_{\Omega} |\nabla u| dx \geq \int_{\Omega} f(v - u) dx$$

donde ψ es una función que relaciona los parámetros a optimizar con los parámetros ideales. Este problema será enfrentado a través de una regularización de tipo Tikhonov y, para su solución numérica, usaremos una aproximación basada en métodos iterativos como el usado para la solución del problema de Herschell-Bulkley (ver [1,15]). Cabe resaltar que la restricción en el problema anterior es solo una condición necesaria para el problema de optimización que caracteriza al modelo de Herschell-Bulkley.

Bibliografía

1. Aster, R. C., Borchers, B. and Thurber, C. H., *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Academic Press, U.S.A., 2013.



**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL**



2. Beverly, C.R. and Tanner, R.I., *Numerical analysis of three-dimensional Bingham plastic flow*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 42 (1992) pp. 85-115.
3. Bonn, D. and Morton, M. D. *Yield stress fluids slowly yield to analysis*, Science 324 (2009) pp. 1401-1402.
4. Frigaard, I.A. and Scherzer, O. *Uniaxial exchange flows of two Bingham fluids in a cylindrical duct*, IMA Journal of Applied Mathematics, 61 (1998), pp. 237-266.
5. González Andrade, S. and Borzi, A. *Multigrid second-order accurate solution of parabolic control-constrained problems*. Computational Optimization and Applications, 51 (2012) 835-866.
6. Glowinski, R. and Xu, J. (Eds) *Numerical Methods for Nonlinear Methods, Vol. 16 Handbook of Numerical Analysis*. Elsevier, Great Britain, 2011.
7. Jop, P., Forterre, Y. and Pouliquen, O. *A constitutive law for dense granular flows*, Nature 441 (2006) pp. 727-730.
8. De los Reyes, J-C. and González Andrade, S. *Numerical simulation of thermally convective viscoplastic fluids by semismooth second order type methods*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 193 (2013) pp. 43-48.
9. De los Reyes, J-C. and González Andrade, S. *A combined BDF-semismooth Newton approach for time-dependent Bingham flow*, Numerical Methods for Partial Differential Equations, 28 (2012) pp. 834-860.
10. Hintermueller, M., Ito, K. and Kunisch, K. *The primal-dual active set strategy as a semi-smooth Newton method*. SIAM Journal on Optimization, 13 (2003) 865-888.
11. Huang, Y.Q., Li, R. and Liu, W. *Preconditioned Descent Algorithms for p-Laplacian*, Journal of Scientific Computing, 32 (2007) 343-371.
12. Mullineux, G. and Simmons, M.J.H., *Influence of rheological model on the processing of yogurt*, Journal of Food Engineering 84 (2008) 250-257.
13. Quarteroni, A., Tuveri, M. and Veneziani, A. *Computational vascular fluid dynamics: problems, models and methods*, Comput. Visual Sci., 2 (2000) pp. 163-197.
14. Steffe, J. F. *Rheological Methods in Food Process Engineering*. Freeman Press, 1992, U.S.A.
15. Tarantola, A. *Inverse Problems Theory*. SIAM, U.S.A., 2005.
16. Trottenberg, U., Oosterlee C. and Schüller, A. *Multigrid*, London, Academic Press, 2001.
17. Vikhansky, A. *Thermal convection of a viscoplastic liquid with high Rayleigh and Bingham numbers*, Physics of Fluids, 21 (2009) 103103.
18. Vinay, G., Wachs, A. and Agassant, J-F. *Numerical simulation of non-isothermal viscoplastic waxy crude oil flows* J. Non-Newtonian Fluid Mech. 128 (2005) pp. 144-162.
19. Zhang, J., Vola, D. and Frigaard, I.A. *Yield stress effect on Rayleigh-Bénard convection*, J. Fluid Mech., 566 (2006) pp. 389-429.

- **Cronograma de trabajo anual**

Año 1

Actividad	MESES					
	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12
Investigación bibliográfica sobre los modelos en estudio. Análisis teórico de los mismos.	x	x				
Planteamiento e implementación del algoritmo de resolución numérica, para el problema directo, basado en un método del descenso precondicionado.	x	x				
Modelización de los parámetros como funciones de: concentración de componentes (azúcares, alcoholes, polifenoles) y otras variables.		x	x	x	x	
Planteamiento y análisis del problema de identificación de parámetros para los modelos en estudio.				x	x	x



**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL**



Año 2

Actividad	MESES					
	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12
Validación de los resultados arrojados por el modelo teórico vs. los resultados entregados por el laboratorio. Ajuste de los parámetros.	x	x				
Experimentación y validación de los modelos sugeridos para los parámetros en el laboratorio.		x	x			
Estudio de la reacción de los fluidos a diversas acciones exteriores: fuentes de calor, secado, deshidratación, etc.		x	x			
Optimización y control de los productos para lograr altas concentraciones de polifenoles: estudiar un problema de control sobre los parámetros más sensibles a través de acciones específicas (calentamiento, deshidratación, liofilización, etc.)			x	x	x	
Validación de los resultados del problema de control en el laboratorio, con los productos específicos.					x	x

- Justificación del equipo requerido

- *Computador portátil:* uno de los objetivos más importantes en la simulación de fluidos viscoplásticos es la correcta identificación de la interface que separa las zonas plásticas (fluidas) de las zonas rígidas. Si bien éste es un problema teórico abierto, las técnicas numéricas ayudan a entender el comportamiento de estos materiales en estas zonas. Nuestras técnicas de solución numérica han demostrado un rendimiento óptimo, desde la perspectiva teórica, en la aproximación de las mismas. Por tanto, requerimos de dos computadores con monitores grandes y con buena resolución gráfica para que los investigadores puedan desarrollar su trabajo, en términos de visualización de los resultados numéricos, en forma óptima. Finalmente, este equipo debe contar con software adecuado como MATLAB, Fortran y Paraview, lenguajes en los cuales estará basado nuestro prototipo de software.
- *Peltier:* Para la fase experimental del proyecto vamos a evaluar el módulo de almacenamiento y de elasticidad usando un reómetro AR2000, provisto de cilindros concéntricos como accesorios. Para esto necesitamos de un sistema de calentamiento para el sistema: un peltier.
- *Servidor blade:* Para fortalecer el Laboratorio Nacional de Cálculo Científico y para garantizar que tendremos acceso y capacidad de cálculo suficiente para manejar todos los datos recogidos y su validación, requerimos adquirir un servidor de sistema de cuchillas (blade server) con, al menos, dos procesadores de la familia Xeon de 2.93Ghz, equipado con 6 núcleos. Con respecto a la memoria, la cuchilla debe contar con una memoria de, al menos, de 96GB de memoria RAM.

7	Fecha de inicio: 1 de agosto de 2014
---	---

8	Tiempo dedicación docentes, infraestructura, equipamientos y fondos adicionales.
---	---

- Tiempos de dedicación semestral

- Sergio González Andrade, director del proyecto: 200 horas por semestre.
- Jenny Ruales, profesora colaboradora: 100 horas por semestre.



**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL**



- **Infraestructura y equipos disponibles para la ejecución del proyecto**
 - Oficinas del director y de la colaboradora, y espacio para reuniones del equipo de trabajo.
 - El Departamento de Matemática cuenta con infraestructura para realizar trabajos computacionales típicos. En particular, una estación de trabajo para los pasantes.
 - Laboratorio Nacional de Cálculo Científico, dirigido por el Centro de Modelización Matemática (ModeMat), cuyas instalaciones nos permitirán realizar cálculos a gran escala a través del servidor de alto rendimiento Quinde. Este servidor cuenta actualmente con 7 cuchillas, cada una de las cuales tiene dos procesadores de la familia Xeon de 2.93Ghz, equipado con 6 núcleos. Con respecto a la memoria, cada cuchilla dispone de 96GB de memoria RAM. En resumen, el sistema cuenta con 50 núcleos y 480GB de memoria RAM. Es, además, de interés estratégico tanto para la EPN como para el ModeMat, que este laboratorio se potencie, de ahí la necesidad de adquirir más servidores blade para el supercomputador Quinde.
 - El DECAB cuenta con un laboratorio con equipos para analizar el comportamiento de fluidos. Dispone de un reómetro AR 2000, con el cual se puede calcular la viscosidad, módulos de almacenamiento, elasticidad, etc. Es necesario, sin embargo, dotar a este laboratorio con ciertos equipos que nos permitan obtener mediciones del comportamiento de los fluidos tanto al someterlos a procesos físicos (calentamiento, deshidratación, etc), como al cambiar su estructura (cambio de concentración de azúcares, modificación de pectinas y almidones, cambio de densidad por licuefacción, etc).
- **Asesoramiento y colaboración**
 - El proyecto contará con el asesoramiento del Prof. Dr. Juan Carlos De los Reyes, director del ModeMat, en el tema específico de la estimación de parámetros para inecuaciones variacionales. Esto debido a la gran experiencia de este investigador en el área.
 - El proyecto también contará con la colaboración del Prof. Dr. Alfio Borzi, profesor titular de la cátedra de cálculo científico de la Universidad de Würzburg, Alemania. El Prof. Borzi es experto en métodos eficientes para resolver problemas a gran escala y tiene amplia experiencia en la modelización de procesos en la industria alimenticia (ver proyecto ROENOBIO: Robust energy optimization of fermentation processes for the production of biogas and wine).

Presupuesto estimado para la ejecución del presente proyecto	
Se recomienda que los costos de los equipos, reactivos y materiales de laboratorio, estén sustentados con proformas actuales:	
Año 1	
Lista de ítems (por favor especifique)	Cantidad solicitada (US \$)
1. Contratación de pasantes	
9 Profesional por 7 meses (\$901,00/mes)	6.307,00
Pasante por 6 meses (\$243,00/mes)	1.458,00
Pasante por 6 meses (\$243,00/mes)	1.458,00
Subtotal	9.223,00
2. Equipos	
Computadores de escritorio	3.000,00
Peltier	5.500,00
Subtotal	8.500,00
3. Reactivos y materiales de laboratorio	
Filtros de aire y aceite	1.000,00
Frutas, muestras alimenticias y procesamiento	2.000,00



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



Reactivos para análisis químico (composición)	2.000,00
Servicio de análisis (análisis proximal)	2.200,00
Subtotal	7.200,00
4. Literatura especializada	
Libros	4.000,00
Subtotal	4.000,00
5. Viajes técnicos y de muestreo	
Subtotal	0,00
6. Presentación de ponencias en congresos internacionales	
Pasajes de avión internacionales	6.000,00
Pago de inscripción a conferencias internacionales	1.500,00
Viáticos de subsistencia	3.500,00
Subtotal	11.000,00
TOTAL AÑO 1 (Proyectos Inter y Multidisciplinarios US\$ 40.000,00 más IVA)	39.923,00 + iva
Año 2	
Lista de ítems (por favor especifique)	Cantidad solicitada (US \$)
7. Contratación de pasantes	
Profesional por 10 meses (\$901/mes)	9.010,00
Pasante por 5 meses (\$243,00/mes)	1.215,00
Pasante por 5 meses (\$243,00/mes)	1.215,00
Subtotal	11.440,00
8. Equipos	
Servidor blade	14.000,00
Subtotal	14.000,00
9. Reactivos y materiales de laboratorio	
Filtros de aceite y aire	1.000,00
Servicio de análisis	800,00
Reactivos y estándares	1.800,00
Subtotal	3.600,00
10. Literatura especializada	
Libros	
Subtotal	0,00
11. Viajes técnicos y de muestreo	
Subtotal	0,00
12. Presentación de ponencias en congresos internacionales	
Pasajes de avión internacionales	6.300,00
Pago de inscripción a conferencias internacionales	1.500,00
Viáticos de subsistencia	3.000,00
Subtotal	10.800,00
TOTAL AÑO 2 (Proyectos Inter y Multidisciplinarios US\$ 40.000,00 más IVA)	39.840,00 + iva
TOTAL	79.763,00 + iva¹

¹ Nótese que tanto en el año 1 como en el año 2, se respeta la restricción del 30% para contratación de personal académico. En efecto, en el año 1, el total es \$39.923,00 y el 30% de este valor es \$11.976,90, mientras que nuestro presupuesto para este rubro es \$9.223,00. En el año 2, el total es \$39.840,00 y el 30% de este valor es \$11.952,00, mientras que nuestro presupuesto para este rubro es \$11.440,00.



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



	Firma del aplicante	Lugar y fecha
10	 Nombre: Sergio Alejandro González Andrade CC: 1707824932	Hamburgo, 19 de junio de 2014
DECLARACION DEL JEFE DE DEPARTAMENTO		
<p>Esta propuesta ha sido aprobada por el Consejo del Departamento <i>Matemática</i> en Sesión del <i>20 junio 2014</i> mediante Resolución No. <i>040</i> y las instalaciones, incluyendo personal, edificios, equipo y recursos financieros están a disposición del aplicante de acuerdo con las especificaciones que se encuentran en esta aplicación.</p> <p style="text-align: center;"> JEFE DEL DEPARTAMENTO Nombre: Luis Horna CC: 150010059</p> <p style="text-align: right;"><i>Quito 20 junio / 2014</i> (lugar y fecha)</p>		