

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad de Ciencias Matemáticas

Departamento de Matemática Aplicada

**ANÁLISIS NUMÉRICO DE MODELOS
MATEMÁTICOS Y PROBLEMAS INVERSOS
EN TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS**

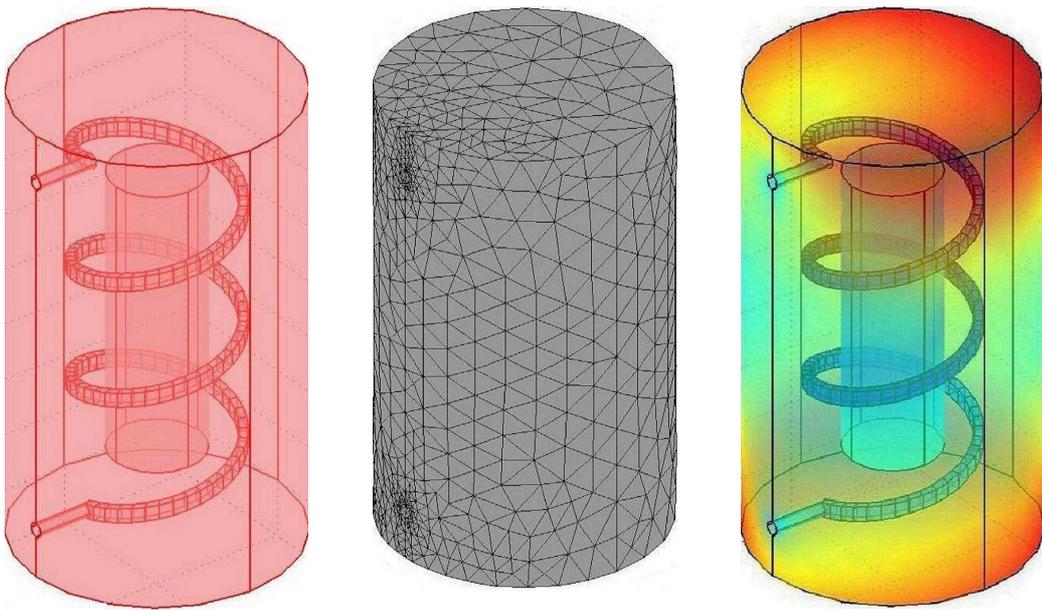
MEMORIA PRESENTADA POR
D. JUAN-ANTONIO INFANTE DEL RÍO
PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR POR LA
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

DIRECTORES:
D. ÁNGEL MANUEL RAMOS DEL OLMO
D. JOSÉ MARÍA REY CABEZAS

Madrid, octubre de 2009

*Para Mamen, Rosa, Iván
y Adrián: mi familia.*

Análisis numérico de modelos matemáticos y problemas inversos en tecnología de alimentos



J.A. Infante

Agradecimientos

Es una obligación (y un placer) para mí comenzar esta sección citando a quienes, sin duda, más me han ayudado en los trabajos de investigación que han dado lugar a esta memoria: mis dos directores de Tesis, los profesores Ángel Manuel Ramos y José María Rey. Quiero agradecer al Prof. Ramos su acertada elección de los problemas a estudiar, su interés en los momentos de trabajo lento pero seguro, sus indicaciones sobre el camino a seguir y su dedicación en los tiempos de dificultades. También con el Prof. Rey tengo deuda de agradecimiento: sus acertadas intuiciones e ideas, la generosidad que ha mostrado en la cantidad de tiempo invertido en este proyecto y su cercana, fructífera, infatigable y siempre amable colaboración han aumentado la calidad de este trabajo.

No quiero dejar de expresar mi agradecimiento a aquéllos que también han realizado aportaciones, algunas muy concretas, otras más extensas: el Prof. Jesús Ildelfonso Díaz, con sus sugerencias técnicas y sus útiles consejos bibliográficos; el Prof. Andrés Fraguela, de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, quien me introdujo en el mundo de los problemas inversos y las estrategias de regularización que utilizamos en el Capítulo 3, y me acogió en México, donde perfilamos la unicidad de solución del Capítulo 4; el Prof. Javier Gómez Gil, quien me sugirió la idea de usar las funciones localmente analíticas en dicho capítulo; el Prof. Jacques Henry (INRIA Bordeaux-Sud-Ouest) por la conversación en la que surgió la idea que fue germen del diseño del experimento *ad hoc* del Capítulo 2; el Prof. Benjamin Ivorra, uno de los coautores del trabajo [34] y cuya aportación al Capítulo 1 ha sido determinante; finalmente, la Profa. Ángeles Prieto, quien me proporcionó ejemplos de perversas funciones oscilatorias.

Un poco de historia . . .

Mi interés por los temas que han dado lugar a esta Tesis Doctoral comenzó tras una conferencia que impartió en nuestro Departamento la Profa. Laura Otero, del Instituto del Frío (CSIC), en el curso 2002-2003. A raíz de ella, me puse en contacto con el Prof. Ramos (su anfitrión en el Departamento y coautor suyo) y acometimos las tareas que dieron lugar al trabajo [20]; éste fue el punto de partida de la investigación que, posteriormente, se ha materializado en esta memoria.

Pero yo comencé “la” tesis hace mucho tiempo, y no puedo dejar, en estos momentos, de recordar y agradecer a quienes han contribuido a mi formación científica:

En primer lugar, y por orden cronológico, quiero citar al Prof. José Carrillo, quién dirigió mi Tesina y me introdujo en el *modus operandi* de la investigación. Su empeño como director y su valía como investigador no fueron suficientes para contrarrestar mi falta de coraje cuando comenzaron los resultados adversos.

El Prof. Néstor Aguilera, de la Universidad de Santa Fé (Argentina), con quien trabajé intensamente durante casi dos años; tras su estancia de seis meses aquí, los cientos de mensajes de correo

(a través de la red DecNet: ¡Internet aún no existía en España!) y miles de líneas de programación, no pudimos plasmar en ningún trabajo el esfuerzo realizado; a pesar de ello, sólo me quedan buenos recuerdos.

El Prof. Rodolfo Bermejo ha sido, hasta el comienzo de esta última fase de mis labores de investigación, la persona con la que he tenido una colaboración más agradable. Con él publiqué mi primer artículo de investigación, en una revista de alto impacto. Nunca olvidaré la fase de redacción de ese trabajo, con discusiones tan apasionadas como fructíferas.

... y otras historias.

Veinticinco años de vida (profesional y personal) dan para mucho y para muchos. Por ello, me gustaría escribir aquí unas líneas que se pretenden como una mezcla de agradecimiento, reconocimiento y dedicatoria:

En todo este tiempo he tenido la suerte de relacionarme con algunos muy buenos compañeros. Un primer recuerdo es para los que ya no están: Jesús Esquinas y Chema Fraile; cada uno en su estilo, contribuyeron a mejorar mi vida en el Departamento. También quiero citar aquí a los compañeros amigos, los que siguen (Jose, Merche) y los que se exiliaron (Ana a Trento, Julio a la Carlos III); con ellos he disfrutado de los mejores días dentro y fuera de la Facultad.

No puedo dejar de citar a mi familia, especialmente a los ausentes: mi padre, mi hermano y mi madre. Estoy seguro de que se habrían sentido llenos de orgullo si hubieran podido asistir a este momento, aunque no fueran totalmente conscientes de su trascendencia. El tiempo transcurrido no borra el cariño que me deja su recuerdo.

Un recuerdo también para los compañeros de los equipos decanales durante mis dos épocas como Secretario de la Facultad (Ángel, Carlos, Javier y Raquel, en la primera; Antonio, Javier, Juan, Luis y Yolanda, en la segunda) con los que compartí un trabajo que, aunque fue duro, tenía el motivador aliciente de intentar que nuestro Centro funcionara mejor.

Y, finalmente, mis amigos. Todos, los más antiguos y los más nuevos, los matemáticos y los no iniciados, los de los dos hemisferios. Siempre me han brindado su apoyo, tanto personal como profesional, y siempre he sentido su cercanía y afecto. Entre ellos, a la cabeza, Angelines, persona generosa, considerada, respetuosa y amable (Silvio Rodríguez *dixit*) como ninguna otra, y con la que tengo la suerte de estar compartiendo mi vida.

Índice

Introducción	1
I Tratamiento térmico a altas presiones. Inactivación enzimática	5
1. Modelización y simulación del tratamiento térmico a altas presiones y de la inactivación enzimática	7
Introducción	7
1.1. Modelo matemático de la inactivación enzimática	9
1.2. Modelización de la transferencia de masa y de calor	11
1.2.1. Alimentos sólidos	13
1.2.2. Alimentos líquidos	16
1.2.3. Modelos en consideración	17
1.2.4. Análisis de sensibilidad respecto a los datos	18
1.2.5. Modelos simplificados	19
1.3. Resultados numéricos para los modelos de transferencia de masa y calor	20
1.3.1. Modelos completos	22
1.3.2. Análisis de sensibilidad de los modelos completos	24
1.3.3. Estudio comparativo de los modelos simplificados	25
1.4. Acoplamiento de los modelos de inactivación enzimática con los de transferencia de masa y calor	26
1.4.1. Ecuación para la actividad enzimática	26
1.4.2. Discretización de la ecuación para la actividad enzimática	27
1.5. Resultados numéricos para el acoplamiento de la inactivación enzimática y la transferencia de masa y calor	28
1.5.1. Modelos completos	29
1.5.2. Análisis de sensibilidad de la inactivación en los modelos completos	30
1.5.3. Estudio comparativo de los modelos simplificados	31
1.6. Conclusiones	32
II Identificación de un coeficiente de intercambio de calor	35
Introducción	37
2. Identificación de un coeficiente de intercambio de calor que varía con la presión	41
Introducción	41
2.1. Análisis cualitativo del problema directo	42
2.2. Escenarios de planteamiento del problema inverso	45

2.3.	Identificación a partir de un experimento diseñado <i>ad hoc</i>	47
2.4.	Un algoritmo numérico para la identificación	49
2.4.1.	Identificación a partir de una cantidad finita de valores exactos de la temperatura	49
2.4.2.	Identificación a partir de una función que aproxime la temperatura	52
2.4.3.	Identificación a partir de una cantidad finita de valores aproximados de la temperatura	55
2.5.	Adimensionalización del problema	57
2.6.	Resultados numéricos	60
3.	Identificación de un coeficiente de intercambio de calor que varía con la temperatura	81
	Introducción	81
3.1.	Análisis cualitativo del problema directo	82
3.2.	Escenarios de planteamiento del problema inverso	85
3.3.	Teoría de regularización. Algoritmos clásicos	88
3.3.1.	Marco funcional del problema inverso	88
3.3.2.	Estrategias de regularización	92
3.4.	Un algoritmo numérico para la identificación	96
3.4.1.	Identificación a partir de una cantidad finita de valores exactos de la temperatura	96
3.4.2.	Identificación a partir de una función que aproxime la temperatura	97
3.4.3.	Identificación a partir de una cantidad finita de valores aproximados de la temperatura	101
3.5.	Resultados numéricos. Comparación entre los métodos descritos	103
3.5.1.	Sobre la adimensionalización del problema	103
3.5.2.	Estudio comparativo de los resultados numéricos	104
III	Identificación de un coeficiente de conductividad térmica	119
4.	Identificación del coeficiente de conductividad térmica, cuando ésta depende de la distribución de presiones	121
	Introducción	121
4.1.	Análisis cualitativo del problema directo	122
4.2.	Expresión de la solución en función de sus valores en el borde	127
4.3.	Unicidad de solución del problema inverso	139
4.3.1.	Caso k constante	142
4.3.2.	Caso k arbitraria	145
4.4.	Resultados numéricos	147
	Bibliografía	151

Introducción

La Tecnología de Alimentos es una disciplina que se ha desarrollado enormemente en el transcurso de los últimos decenios, especialmente desde mediados del Siglo XX. Obviamente, el ser humano se ha preocupado desde épocas remotas por la conservación de los alimentos que producía, recurriendo a técnicas tradicionales como la desecación, el curado, la salazón, el encurtido, el ahumado, la conservación en aceite, el enfriamiento, etc. El desplazamiento de la población al medio urbano, realizado en un breve lapso de tiempo y de forma casi generalizada, hizo necesario el poder contar con un suministro masivo de alimentos en condiciones de consumo adecuadas. Para ello, fue preciso el desarrollo de una industria alimentaria que pudiera garantizar tratamientos a gran escala y que prolongasen la vida útil de los alimentos, con el objeto de facilitar aspectos logísticos como pueden ser el transporte, el almacenamiento, la distribución, . . .

Con el tiempo, sin perder de vista algo tan importante como la seguridad alimentaria, se fue poniendo mayor énfasis en otros aspectos cualitativos, ligados a las propiedades nutricionales y organolépticas de los alimentos, las cuales podían verse mermadas por los tratamientos a que éstos se veían sometidos. Por otra parte, ya en nuestros días, se detecta una gran preferencia de los consumidores por alimentos “naturales” (sin conservantes, colorantes u otro tipo de aditivos) e incluso “ecológicos” (vegetales sin pesticidas, animales alimentados sin usar piensos, etc.). Por tanto, es necesario desarrollar técnicas que, con el menor manipulado posible, produzcan alimentos seguros, sin pérdidas nutricionales y que conserven su sabor, aroma, textura, aspecto, etc. originales.

Una de las tecnologías que, desde el punto de vista industrial, pueden usarse para el tratamiento de alimentos, y que posee estas buenas propiedades, es el *tratamiento a altas presiones*. Su desarrollo a nivel de investigación arrancó a principios de los años noventa (del siglo pasado), materializándose sus primeras aplicaciones comerciales ya desde mediados de la misma década. En España está siendo utilizada por diferentes empresas, destacando Espuña S.A., una de las entidades colaboradoras del Grupo de Investigación MOMAT, en el seno del cual se ha realizado todo el trabajo que se presenta en estas páginas. Mencionemos también que una empresa española, NC Hyperbaric, se ha convertido, en apenas diez años de existencia, en uno de los mayores fabricantes europeos de equipos de altas presiones para la industria alimentaria. Por otra parte, son varios los grupos de investigación que, en todo el mundo, están avanzando en el estudio de las características de esta tecnología, con vistas a extender su aplicabilidad. Uno de los más activos tiene su sede en el Instituto del Frío del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC); fruto de la colaboración con este grupo fue el trabajo [20], tras el que comenzaron las tareas de investigación que han dado lugar a esta memoria.

La exposición de los resultados se ha estructurado en tres partes. La primera de ellas se centra en la modelización del tratamiento de alimentos mediante altas presiones y su simulación numérica; la segunda y la tercera versan sobre la identificación aproximada de sendos parámetros termofísicos que aparecen en los modelos presentados en la primera parte, para versiones simplificadas de los mismos.

Nuestro objetivo es la modelización de este tipo de procesos, haciendo especial énfasis en los aspectos numéricos, es decir, en su simulación computacional, con vistas a marcar pautas que permitan diseñar metodologías que contribuyan a la optimización de los tratamientos. Los modelos que se utilizan en este contexto son complejos (ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos débilmente compresibles acopladas con transferencia de calor) y requieren sofisticadas herramientas numéricas para su resolución aproximada. Pero además, en las ecuaciones aparecen un conjunto de coeficientes ligados a parámetros físicos (densidad, calor específico, conductividad térmica, coeficiente de intercambio de calor, coeficiente de dilatación, etc.) característicos de los materiales en los que están planteadas. Se da la circunstancia de que los valores de estos coeficientes, que son sensibles a los cambios de presión y temperatura, no suelen ser conocidos para presiones distintas de la atmosférica.

Esto hace que para aproximar numéricamente el comportamiento del modelo haya que prescribir dichos valores mediante argumentos heurísticos o basados en metodologías experimentales, como se hace en el estudio llevado a cabo en el Capítulo 1. Allí se presenta un modelo matemático, que constituye una variante del que en [60] se describe para alimentos de tipo sólido, y que permite trabajar con fluidos compresibles. Mediante su simulación numérica se consigue describir el comportamiento térmico y fluidodinámico de la muestra de alimento, cuando es sometida a un tratamiento a altas presiones, no sólo si se trata de un alimento de tipo sólido sino también cuando se trata de un alimento líquido.

Por otro lado, puesto que parte de la degradación de los alimentos la producen enzimas presentes en ellos, es importante que los tratamientos aplicados consigan reducir al máximo su actividad. Con la vista puesta en este objetivo, el modelo termofluidodinámico citado se acopla con ecuaciones cinéticas que modelizan la actividad de diversas enzimas. Mediante su resolución numérica se consigue estimar la actividad de estas enzimas tras el uso de diversos tratamientos.

Existen en la literatura otros trabajos con objetivos similares (véanse, v. gr., [10], [24] y [25]) aunque en ninguno se explicitan los modelos en la medida en que aquí se hace; además, nuestra forma de acoplar la actividad enzimática con la transferencia de masa y calor es original, pues se realiza a posteriori, una vez aproximada la distribución de temperatura. Asimismo, nosotros presentamos un estudio comparativo del modelo completo frente a otros modelos más sencillos; este estudio es de gran interés, pues puede justificar el uso de modelos simplificados en los primeros pasos de una eventual optimización del diseño de los tratamientos (los resultados obtenidos para las enzimas estudiadas dan prueba de ello). Finalmente, en esta primera parte llevamos a cabo un novedoso análisis de sensibilidad de los modelos respecto a errores en los datos; la conveniencia de conocer cómo de sensibles se muestran los modelos a estos errores se justifica, no sólo en la probable presencia de errores de medición, sino en la citada metodología con la que se determinan los parámetros termofísicos que aparecen en las ecuaciones que gobiernan los modelos. Este análisis muestra que dicha sensibilidad depende, en gran medida, de la enzima en consideración.

Fijamos ahora nuestro interés en la mencionada falta de información relativa a los parámetros físicos de este tipo de problemas, la cual es la motivación del trabajo que se recoge en las partes segunda y tercera de esta memoria. Se plantea la posibilidad de identificar los valores que, para cada material en concreto, toman esos coeficientes en un rango de temperaturas y presiones dados. La idea es realizar una cantidad (lo menor posible) de experimentos en los que se realicen mediciones de la temperatura (magnitud sencilla de medir) y, a partir de ellas, intentar determinar los valores de algunos de los parámetros. Esto nos coloca en el contexto de los *problemas inversos* en los que, a partir de cierto conocimiento de la solución de un problema, se pretende obtener información sobre el modelo que lo gobierna. Éste es el contexto en el que se desarrollan las partes

segunda y tercera de nuestro trabajo, en las que se diseñan algoritmos numéricos mediante los que se consigue identificar dos de estos parámetros.

En concreto, en la segunda parte se suponen simplificaciones del modelo que llevarán a plantearlo como un problema de valor inicial en dimensión uno, en el que el parámetro que se pretende identificar es un coeficiente de intercambio de calor que puede depender de la presión (que se supone conocida) y de la temperatura (que es la incógnita de la ecuación diferencial ordinaria). En la tercera parte, el modelo simplificado se plantea como una ecuación en derivadas parciales con condiciones de contorno mixtas, siendo el coeficiente de conductividad térmica el objeto de la identificación.

Hay que destacar que, puesto que el objetivo último es aproximar el comportamiento de las magnitudes modelizadas (en nuestros casos, la temperatura), la bondad de la identificación residirá, no tanto en que el error en el parámetro identificado sea pequeño como en que lo sea el error cometido en dicha magnitud, cuando se usa el modelo con el parámetro aproximado.

Es lógico que la estrategia que se utilice para identificar un coeficiente dependa de la información de la que se disponga sobre él. En determinadas ocasiones se sabe que dicho coeficiente se expresa mediante una fórmula en la que aparecen una cantidad finita de parámetros que son los que hay que determinar. En esta situación, el método de mínimos cuadrados suele conducir a una solución adecuada del problema. Éste es el método empleado, por ejemplo, en los trabajos [18], [20], [46], [53], [66] y [67], todos ellos planteados en el contexto de la Tecnología de Alimentos. Muy distinto es cuando la única información que se tiene sobre el coeficiente que se necesita determinar es meramente cualitativa (continuidad, positividad, ...). Ésta es la situación que nosotros abordamos presentando una variada gama de metodologías (experimentos especialmente diseñados, algoritmos basados en la diferenciación aproximada, estrategias de regularización, métodos de colocación) todas ellas originales en este contexto. Se han explorado también otros métodos (por ejemplo, aplicar mínimos cuadrados a los parámetros que constituyen las coordenadas respecto a una base de elementos finitos del coeficiente a determinar, como se hace en [12] y [75], por ejemplo) que no han producido los resultados deseados.

Los métodos utilizados en esta memoria se han mostrado eficaces para resolver los problemas planteados. Han proporcionado resultados adecuados para la aproximación de los coeficientes que se pretendía identificar y proporcionan una muy satisfactoria aproximación de la temperatura para las distintas simulaciones que, utilizando tal identificación aproximada, se han realizado para una variada gama de datos de partida.

Para una presentación más específica del trabajo realizado, remitimos al lector a las introducciones respectivas de cada parte o capítulo.

Parte I

Tratamiento térmico a altas presiones. Inactivación enzimática

Capítulo 1

Modelización y simulación del tratamiento térmico a altas presiones y de la inactivación enzimática

Introducción

En los últimos años se ha producido un incremento constante de la demanda de alimentos que, habiendo sido sometidos al menor tratamiento y manipulación posibles, estén listos para su consumo, tanto en restaurantes como en comedores colectivos (empresas, colegios, hospitales, residencias, etc.) o en el ámbito doméstico. Este requisito de mínima manipulación puede entrar en conflicto con una de las cuestiones que más preocupan a los ciudadanos de la sociedad actual, como es la seguridad alimentaria: habida cuenta de que la actividad de diversos microorganismos y enzimas hace que los alimentos se degraden, empeorando sus propiedades organolépticas o, peor aún, dejando éstos de ser seguros desde el punto de vista sanitario, resulta imprescindible un cierto procesamiento.

Entre las tecnologías que pueden usarse para la preparación de estos productos destaca la que se conoce como *tratamiento a altas presiones*, la cual ya ha probado su valía desde el punto de vista industrial, mostrándose muy efectiva para prolongar la vida útil de algunos alimentos (zumos, guacamole, ostras, jamón cocido, etc.). Una de las mayores ventajas de este tratamiento es la total ausencia de aditivos, sustancias que no gozan de las simpatías de los consumidores. Además, al contrario de lo que ocurre con procesos como la pasteurización, este tipo de tratamientos permiten eludir el uso de altas temperaturas, con lo que no se producen los correspondientes efectos adversos sobre las propiedades nutricionales y organolépticas del alimento (véanse, v. gr., [28] y [32]).

En este capítulo se modeliza y simula numéricamente el efecto que se produce cuando se combinan tratamiento a altas presiones y tratamiento térmico (a temperaturas moderadas) en el procesamiento de alimentos, lo que a partir de ahora denotaremos por *tratamiento AP-TM*. Se hará un especial énfasis en el aspecto relativo a la disminución de la actividad de ciertas enzimas. Este tipo de problemas han sido estudiados por otros autores (por ejemplo, en los trabajos [10], [24] y [25]).

requiere. Es por esta razón por lo que también introducimos versiones simplificadas del modelo anterior, las cuales pueden ser de gran utilidad a la hora de diseñar equipos industriales adecuados y para optimizar los procesos seguidos en los tratamientos.

La organización del capítulo es la siguiente:

En la Sección 1.1 se presentan algunos modelos de inactivación enzimática, los cuales necesitan como datos de partida los perfiles de presión y temperatura en la muestra de alimento. A continuación, la Sección 1.2 contempla el desarrollo de todos los modelos, tanto el completo como los simplificados, y describe el estudio del análisis de su sensibilidad respecto a los datos. Los resultados numéricos obtenidos al implementar estos modelos se recogen en la Sección 1.3. En la Sección 1.4 se lleva a cabo el acoplamiento de los modelos de inactivación enzimática estudiados en la Sección 1.1 con los de la Sección 1.2. Los resultados numéricos para el decaimiento de la actividad de las enzimas consideradas tras dicho acoplamiento se presentan en la Sección 1.5. Finalmente, la Sección 1.6 contiene las conclusiones finales, así como una descripción de la metodología propuesta para optimizar el tratamiento térmico a altas presiones para cada alimento y equipo en particular.

El contenido de este capítulo está recogido en el trabajo *On the Modelling and Simulation of High Pressure Processes and Inactivation of Enzymes in Food Engineering* que fue aceptado en enero de 2009 para su publicación en *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*.

1.1. Modelo matemático de la inactivación enzimática

Nuestro objetivo es predecir el impacto que el tratamiento AP–TM tiene sobre la actividad de algunas de las enzimas que están presentes en distintos tipos de comida. Para ello, consideramos un modelo cinético de primer orden que describe la evolución de la actividad y que requiere conocer la presión y la temperatura a la que se encuentra en cada instante la muestra considerada.

Antes de comenzar con la descripción del modelo, señalemos que existe una variedad de protocolos experimentales utilizados para medir la actividad enzimática; en ellos suele ligarse esta actividad a una cierta magnitud, siendo su variación a lo largo del tiempo lo que da cuenta de la evolución de la actividad enzimática. Esta magnitud puede ser, por ejemplo, la concentración de oxígeno (como se hace en [33] para la enzima Lipoxigenasa), la densidad óptica (cf. [49] para la *Bacillus Subtilis* α -Amylase) o el número de grupos carboxilos generados (véase [52] para la Pectin–Metil–Esterasa). De acuerdo con la magnitud elegida, su variación respecto al tiempo se expresa en las unidades correspondientes: así, para los ejemplos anteriormente citados, las unidades utilizadas en las referencias mencionadas son, respectivamente, $(\Delta\text{ppm de O}_2) \text{ s}^{-1}$, $\text{cm}^{-1}\text{min}^{-1}$ y $(\text{mL de 0.01 M NaOH}) \text{ min}^{-1}$.

La evolución de la actividad A de una enzima se describe, a menudo, mediante la siguiente ecuación cinética de primer orden ([54, 69]):

$$\frac{dA}{dt}(t) = -\kappa(P(t), T(t)) A(t), \quad (1.1)$$

donde t representa el tiempo (min), $P(t)$ la presión (MPa) en el instante t y $T(t)$ la temperatura (K) en el tiempo t ; $\kappa(P, T)$ es el factor de inactivación (min^{-1}) correspondiente a las condiciones de presión y temperatura dadas por el par (P, T) y $A(t)$ es la actividad en el instante t de la enzima que se esté modelizando.

Se pueden encontrar en la literatura diversas fórmulas que describen el coeficiente $\kappa(P, T)$, las cuales suelen basarse en relaciones que modelizan la dependencia de ciertas reacciones químicas

respecto a la presión y la temperatura, y se pueden elegir en función de la enzima en estudio. Aquí presentamos dos fórmulas para $\kappa(P, T)$, que son las que usaremos para las simulaciones numéricas de la Sección 1.4; en [2], [51] y [64], por ejemplo, pueden encontrarse otras modelizaciones para el factor de inactivación.

- La primera relación se obtiene (v. gr., en [49]) combinando adecuadamente la ecuación de Arrhenius (para modelizar la dependencia respecto a la temperatura) con la ecuación de Eyring (para la dependencia respecto a la presión):

$$\kappa(P, T) = \kappa_{\text{ref}} \exp\left(-B\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}}\right)\right) \exp(-C(P - P_{\text{ref}})), \quad (1.2)$$

donde T_{ref} y P_{ref} son, respectivamente, una temperatura (K) y una presión (MPa) de referencia, κ_{ref} representa la razón de inactivación en las condiciones de referencia (min^{-1}), y B (K) y C (MPa^{-1}) son parámetros que expresan la dependencia de κ respecto a la temperatura y la presión, respectivamente.

- La segunda relación, propuesta en [31], está basada en una adaptación de un modelo termodinámico ([27]) que puede convertirse en un modelo cinético mediante la teoría de estado de transición de Eyring:

$$\begin{aligned} \kappa(P, T) = & \kappa_{\text{ref}} \exp\left(-\frac{\Delta V_{\text{ref}}}{RT}(P - P_{\text{ref}})\right) \exp\left(\frac{\Delta S_{\text{ref}}}{RT}(T - T_{\text{ref}})\right) \\ & \exp\left(-\frac{\Delta \nu}{2RT}(P - P_{\text{ref}})^2\right) \exp\left(-\frac{2\Delta \zeta}{RT}(P - P_{\text{ref}})(T - T_{\text{ref}})\right) \\ & \exp\left(\frac{\Delta C_p}{RT}\left(T\left(\ln\frac{T}{T_{\text{ref}}}-1\right) + T_{\text{ref}}\right)\right) + \text{términos de orden superior,} \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde $R = 8.314$ ($\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$) es la constante universal de los gases, ΔV_{ref} ($\text{cm}^3\text{mol}^{-1}$) y ΔS_{ref} ($\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$) representan la variación del volumen y de la entropía, respectivamente, respecto a las condiciones de referencia, ΔC_p es la variación del calor específico ($\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$), $\Delta \zeta$ es el factor de dilatación ($\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$) y $\Delta \nu$ el de compresibilidad ($\text{cm}^6\text{J}^{-1}\text{mol}^{-1}$). En función de cuál sea la enzima en estudio, se pueden añadir otros términos de orden superior, con el objetivo de afinar la aproximación que de la dependencia de la actividad respecto a la presión y la temperatura se está llevando a cabo (así se hace, por ejemplo, en [52]).

Para determinar los parámetros que aparecen en estas relaciones suelen utilizarse técnicas de regresión a partir de los datos obtenidos mediante mediciones experimentales de la actividad (un ejemplo de ello puede verse en [11]). Para los experimentos numéricos que hemos llevado a cabo, hemos utilizado las estimaciones que de estos parámetros se consignan en los trabajos [33], [49] y [52]. Es necesario destacar que, como se refleja en [50], estos valores pueden depender fuertemente del lote concreto de producto con el que se esté trabajando.

Una vez elegida la descripción del factor de inactivación, y determinados los parámetros que en dicha descripción aparezcan, la solución de la ecuación (1.1) vendrá, obviamente, dada por la expresión:

$$A(t) = A(0) \exp\left(-\int_0^t \kappa(P(\sigma), T(\sigma)) d\sigma\right). \quad (1.4)$$

Por cuestiones prácticas supondremos la condición inicial $A(0) = 100$; esto es equivalente a decir que la actividad $A(t)$ en el instante t es un porcentaje de la actividad en el instante inicial.

Estos modelos de evolución de la actividad enzimática han proporcionado resultados exitosos en el estudio de varias enzimas bajo diferentes condiciones de presión y temperatura (muestra de ello son los trabajos [33], [49] y [52]). Sin embargo, sólo pueden usarse cuando se conoce la evolución temporal de la temperatura y la presión (lo que se consigue, típicamente, a través de mediciones experimentales). Esto los convierte en poco prácticos desde el punto de vista de la optimización numérica, situación en la que no se puede suponer que se disponga de datos experimentales.

Por otra parte, la ecuación (1.1) (y su correspondiente solución (1.4)) proporciona una descripción *macro* del comportamiento de la actividad enzimática, por lo que no sirve para capturar la eventual distribución no homogénea de la actividad que puede aparecer (debida a la distribución, a su vez, no homogénea de la temperatura) dentro del alimento.

Ambos inconvenientes quedarán solventados en las siguientes secciones, mediante el desarrollo de modelos capaces de describir convenientemente la distribución de temperaturas en la muestra de alimento, a lo largo del tiempo (Sección 1.2), y su posterior acoplamiento con los modelos aquí descritos (Sección 1.4).

1.2. Modelización de la transferencia de masa y de calor

Cuando se aplican tratamientos a altas presiones en el ámbito de la Tecnología de Alimentos se hace imprescindible tomar en consideración los efectos térmicos que aparecen, tanto en la muestra de alimento como en el fluido presurizante, debidos, entre otras posibles causas, a que la compresión o expansión consiguientes llevarán aparejada una variación de la temperatura.

Durante el transcurso de la compresión y una vez finalizada ésta (incluso antes de ella, si el proceso no está previamente atemperado) se produce un intercambio de calor entre la cámara de presión, el líquido que transmite la presión y el alimento. Consecuencia de ello son sendas distribuciones de temperaturas dependientes del tiempo en estos tres medios. Estas variaciones temporales de la temperatura generan, en la parte líquida (es decir, en el fluido presurizante y, en caso de que tenga dicho estado, en el alimento), cambios en la densidad que, a su vez, dan lugar a la aparición de convección libre (véase, v. gr., [43]). Por consiguiente, un modelo fiable para este tipo de problemas no puede obviar los fenómenos de convección ni de conducción que tienen lugar durante el proceso, y debe por ello contemplar la transferencia de masa y de calor. Una buena referencia sobre este tipo de modelos es el trabajo [8], en el que se aborda extensamente esta temática; por otra parte, en [43] también puede encontrarse un detallado análisis dimensional para las ecuaciones que gobiernan fenómenos de convección durante el tratamiento de medios líquidos con altas presiones.

A menudo, los tratamientos AP-TM tienen lugar en vasijas de presión en las que previamente se ha introducido la comida *empaquetada* y el fluido presurizante, y en las que el usuario puede elegir si calentar o enfriar el alimento durante el proceso. Estas vasijas son, típicamente, cilindros de acero con una cavidad en su interior. Por otra parte, el flujo en este tipo de procesos suele permanecer en el régimen laminar, sin que aparezcan turbulencias ni en el medio que transmite la presión ni en el eventual alimento líquido. Estas dos condiciones (geometría cilíndrica y régimen laminar) aseguran la simetría axial del modelo. Utilizando coordenadas cilíndricas (y eliminando la coordenada angular) podremos trabajar en un dominio plano, el cual se corresponderá con la

mitad de una sección axial (es decir, la intersección del cilindro con un plano que contenga a su eje).

Vamos a introducir la siguiente notación, relativa a las regiones donde se planteará el problema:

En primer lugar, consideramos cuatro subdominios planos (cf. la Figura 1.1):

- Ω_F : Parte correspondiente a la muestra de alimento
- Ω_C : Tapón (típicamente de caucho) del contenedor de la muestra
- Ω_P : Dominio ocupado por el medio presurizante
- Ω_S : Pared de acero que rodea los dominios anteriores.

Nuestro dominio en las coordenadas (r, z) (que se corresponden con el radio y la altura de la geometría cilíndrica en consideración) estará conformado por la unión de los cuatro anteriores; se trata del rectángulo $\Omega = [0, L] \times [0, H]$ definido por $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_F \cup \bar{\Omega}_C \cup \bar{\Omega}_P \cup \bar{\Omega}_S$. El eje de simetría es la recta prolongación del segmento $\{0\} \times (0, H)$.

En la frontera de Ω , que denotaremos por Γ , distinguimos tres partes:

- $\Gamma_r \subset \{L\} \times (0, H)$, zona en la que se supone conocido el valor de la temperatura.
- $\Gamma_{up} = [0, L] \times \{H\}$; en esta parte supondremos que se produce un intercambio de calor entre el equipo y la sala en la que está situado.
- $\Gamma \setminus \{\Gamma_r \cup \Gamma_{up}\}$, zona con flujo nulo. Esta condición surge, en la parte correspondiente al eje, al traducir la simetría axial a dos dimensiones en la frontera *artificial* en que se convierte el eje de simetría; en el resto, se tiene porque el equipo se supone aislado.

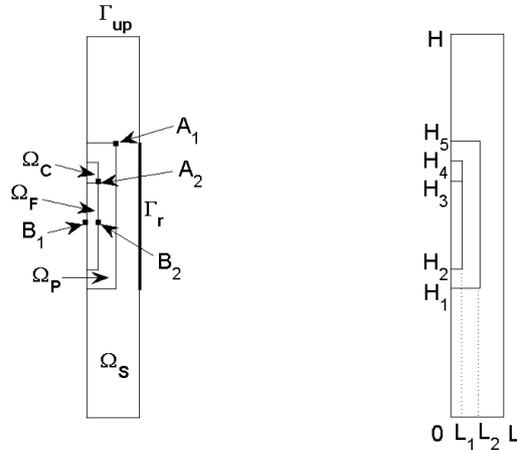


Figura 1.1: Dominio plano en el que, tras utilizar la simetría axial, se plantea el problema.

Finalmente, vamos a utilizar el superíndice * para denotar los dominios correspondientes (y sus fronteras) en la versión del problema en dimensión tres. Es decir, denotamos por Ω^* , Ω_F^* , Ω_C^* , Ω_P^* , Ω_S^* , Γ^* , Γ_r^* y Γ_{up}^* los dominios (tridimensionales y bidimensionales) que se generan cuando se rotan, alrededor del eje de simetría, los dominios Ω , Ω_F , Ω_C , Ω_P , Ω_S , $\Gamma \setminus (\{0\} \times (0, H))$, Γ_r y Γ_{up} , respectivamente.

Una vez establecidos los dominios, en las siguientes secciones vamos a describir las ecuaciones del modelo. Para ello, vamos a distinguir dos casos que deben tratarse de diferente forma: cuando el alimento es sólido (apartado 1.2.1) y cuando es líquido (apartado 1.2.2).

1.2.1. Alimentos sólidos

Transferencia de calor mediante conducción

Cuando se pretende modelizar el tratamiento de alimentos sólidos, el punto de partida debe ser la ecuación de conducción de calor para la temperatura T (K)

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = \alpha \frac{dP}{dt} T \text{ in } \Omega^* \times (0, t_f), \quad (1.5)$$

donde $\rho = \rho(T, P)$ representa la densidad (kg m^{-3}), $C_p = C_p(T, P)$ denota el calor específico ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$), $k = k(T, P)$ es la conductividad térmica ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$) y t_f el tiempo final del proceso (s).

El segundo miembro de la ecuación se corresponde con la generación (o reducción) del calor interno debida al cambio de presión (cf. [60], trabajo en el que nos basamos para este caso y que guiará nuestros primeros pasos). La presión $P = P(t)$ (Pa) que aquí aparece es la que se aplica mediante el equipo (y será elegida por el usuario, dentro de las limitaciones de la máquina). En cuanto al coeficiente $\alpha = \alpha(T, P)$, su significado depende del subdominio que se considere:

$$\alpha = \begin{cases} \text{coeficiente de dilatación (K}^{-1}\text{) del alimento en } \Omega_F^* \\ \text{coeficiente de dilatación (K}^{-1}\text{) del fluido presurizante en } \Omega_P^* \\ 0, \text{ en el resto de } \Omega^*. \end{cases}$$

Este término tiene su origen en la siguiente ley ([60]), que describe la variación de la temperatura ΔT debida a la variación de la presión ΔP , cuando se suponen cambios isoentrópicos de temperatura (véase, v. gr., [3, pág. 165]) en la fase en que hay cambio de presión:

$$\frac{\Delta T}{\Delta P} = \frac{\alpha T V}{M C_p} = \frac{\alpha T}{\rho C_p}. \quad (1.6)$$

Aquí, V (m^3) es el volumen y M (kg) la masa.

Para que el modelo pueda resolverse y proporcione la distribución de temperaturas que se busca, la ecuación de transferencia de calor por conducción (1.5) debe completarse con adecuadas condiciones de contorno e iniciales, que dependerán de la máquina de altas presiones que se esté utilizando. Aquí usaremos las mismas que en el citado trabajo [60], que son adecuadas para la unidad piloto ACB GEC Alstom (Nantes, Francia), situada en la sede del Instituto del Frío, centro dependiente del Consejo Superior de Investigaciones Científicas español (véase la Figura 1.2). Estas condiciones son las siguientes:

$$\begin{cases} k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \text{sobre } \Gamma^* \setminus (\Gamma_r^* \cup \Gamma_{\text{up}}^*) \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h(T_{\text{amb}} - T) & \text{sobre } \Gamma_{\text{up}}^* \times (0, t_f) \\ T = T_r & \text{sobre } \Gamma_r^* \times (0, t_f) \\ T(0) = T_0 & \text{en } \Omega^*. \end{cases} \quad (1.7)$$

En estas relaciones \mathbf{n} representa el vector unitario normal exterior a la frontera del dominio; T_0 es la temperatura inicial; T_r denota la temperatura (de refrigeración o de calentamiento) que permanece constante en Γ_r^* a lo largo del proceso, enfriando o calentando la muestra de alimento;

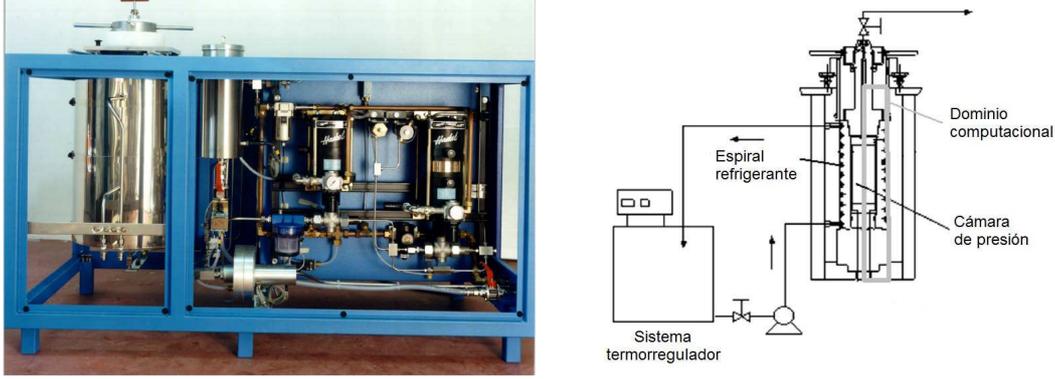


Figura 1.2: Unidad piloto de altas presiones (imagen cedida por el Instituto del Frío del CSIC) y esquema de su funcionamiento.

T_{amb} es la temperatura ambiente, que también se supone constante; finalmente, h ($\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$) representa el coeficiente de transferencia de calor a través del borde superior del cilindro.

Como ya se ha comentado, mediante el uso de coordenadas cilíndricas y aprovechando la simetría axial, el sistema (1.5)–(1.7) puede reescribirse como el problema en dos dimensiones

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \alpha \frac{dP}{dt} T & \text{en } \Omega \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \text{sobre } \Gamma \setminus (\Gamma_r \cup \Gamma_{\text{up}}) \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h(T_{\text{amb}} - T) & \text{sobre } \Gamma_{\text{up}} \times (0, t_f) \\ T = T_r & \text{sobre } \Gamma_r \times (0, t_f) \\ T(0) = T_0 & \text{en } \Omega. \end{array} \right. \quad (1.8)$$

Este modelo resulta adecuado cuando la parte del interior de la vasija que ocupa la muestra de alimento es mucho mayor que la que ocupa el medio presurizante. Así puede verse en [60], donde se lleva a cabo una validación del modelo a través de varios estudios comparativos entre los resultados obtenidos numéricamente y los resultados experimentales. Estos autores también muestran que, cuando la razón de relleno entre el alimento y el fluido no es suficientemente grande, los resultados obtenidos a partir de la resolución numérica del modelo muestran discrepancias con los experimentales. Para intentar solventar esta disfunción del modelo pueden plantearse dos estrategias:

- (I) Utilizar el mismo modelo, corrigiéndolo mediante la adopción, en el medio presurizante, de un valor aparente para la conductividad térmica mayor que el real. Con ello se conseguirían resultados aceptables para la distribución de temperaturas dentro del alimento pero no para la temperatura del fluido que transmite la presión. Ésta no será la vía por la que optaremos.
- (II) Tomar en consideración en el modelo el fenómeno de convección que tiene lugar en el medio presurizante. Con ello, como se muestra en [60], se modeliza mejor el problema pues, aunque se aumenta la complejidad computacional del cálculo aproximado de la solución, los resultados que se obtienen son más precisos. Analizamos esta estrategia en el siguiente epígrafe.

Transferencia de calor mediante conducción y convección

Como se ha comentado al comienzo de esta sección, la existencia de una distribución no homogénea de temperaturas induce una distribución no homogénea de la densidad, la cual produce el movimiento del fluido conocido como convección libre. Con objeto de contemplar dicha convección, que puede jugar un papel determinante en la distribución de la temperatura, usaremos un modelo de flujo no isotérmico. Supondremos que los fluidos con los que se trabaja son newtonianos; además, a diferencia de lo que se hace en [60], supondremos que son débilmente compresibles (por lo que deberá tenerse en cuenta el segundo coeficiente de viscosidad) y que verifican la hipótesis de Stokes, la cual se concreta (véase, v. gr., [1, pág. 110 y ss.]) en suponer que el coeficiente viscosidad volumétrica es nulo. Esto equivale a tomar como valor del segundo coeficiente de viscosidad $-\frac{2}{3}\eta$, siendo η lo que se conoce como primer coeficiente de viscosidad o coeficiente de viscosidad dinámica. Así, la ecuación de conservación del momento \mathbf{u} se escribe, en la parte ocupada por el medio que transmite la presión, como

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^t) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p - \frac{2}{3} \nabla (\eta \nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g},$$

siendo \mathbf{g} el vector de gravedad. Nótese que en el término correspondiente al gradiente de presión sólo aparece la presión p generada por la transferencia de masa en el interior del fluido. Esto se debe a que la presión que aporta el equipo $P = P(t)$ no depende de la variable espacial y, por tanto, se tiene que $\nabla(P + p) = \nabla p$.

La ecuación de conservación de la masa viene dada, en el dominio correspondiente al fluido presurizante, por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0.$$

Acoplando las ecuaciones de conservación de energía y del momento, el transporte debido a la conducción y la convección se modeliza por la ecuación, válida en todo el dominio,

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \frac{dP}{dt} T,$$

donde se está suponiendo que las variaciones de temperatura producidas por el calor procedente de la disipación de energía debida al rozamiento interno que provoca la transferencia de masa son despreciables (véase, v. gr., [44, pág. 229 y ss.]).

En resumen, el campo de velocidades del fluido en cuestión, \mathbf{u} (m s^{-1}) y la temperatura T (K) verifican las ecuaciones de Navier–Stokes (conservación del momento y conservación de la masa) acopladas con la ecuación de transferencia de calor, es decir:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \frac{dP}{dt} T \quad \text{en } \Omega^* \times (0, t_f) \\ \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^t) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \\ \quad = -\nabla p - \frac{2}{3} \nabla (\eta \nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f). \end{array} \right. \quad (1.9)$$

En este sistema, \mathbf{g} es el vector gravedad (m s^{-2}), $\eta = \eta(T, P)$ representa la viscosidad dinámica (Pa.s), $p = p(x, t)$ denota la presión generada por la transferencia de masa en el interior del

fluido y $P + p$ es la presión total (Pa) en el medio presurizante Ω_p^* . Como en el epígrafe anterior, la densidad $\rho = \rho(T, P)$ es una función de estado conocida; el resto de los parámetros (C_p, k, α) juegan también el mismo papel que en el mencionado epígrafe.

Con vistas a determinar la solución, es necesario completar el sistema anterior mediante apropiadas condiciones iniciales, de contorno y puntuales, a saber:

$$\left\{ \begin{array}{ll} k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \text{sobre } \Gamma^* \setminus (\Gamma_r^* \cup \Gamma_{up}^*) \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h(T_{\text{amb}} - T) & \text{sobre } \Gamma_{up}^* \times (0, t_f) \\ T = T_r & \text{sobre } \Gamma_r^* \times (0, t_f) \\ \mathbf{u} = 0 & \text{sobre } \Gamma_p^* \times (0, t_f) \\ T(0) = T_0 & \text{en } \Omega^* \\ \mathbf{u}(0) = 0 & \text{en } \Omega_p^* \\ p = 10^5 & \text{sobre } \mathbf{A}_1 \times (0, t_f), \end{array} \right. \quad (1.10)$$

donde el punto \mathbf{A}_1 se encuentra situado en la componente exterior de Γ_p^* , la frontera de Ω_p^* (cf. la Figura 1.1). El hecho de que la presión p sólo aparezca en el sistema (1.9) a través de su gradiente, hace que dicha función esté sólo determinada salvo constantes aditivas. Esto explica la necesidad de fijar su valor en algún punto y lo hacemos, al de la presión atmosférica, en el punto \mathbf{A}_1 de la frontera exterior del dominio ocupado por el presurizante.

De la misma forma que en el epígrafe anterior la ecuación de conducción de calor (1.5), junto con las condiciones (1.7), pueden escribirse como un modelo equivalente en dos dimensiones (1.8), el sistema (1.9)–(1.10) puede también reescribirse, mediante el uso de coordenadas cilíndricas y gracias a la simetría axial del problema, como un sistema plano. Destacamos que, para ello, la sección axial debe tomarse en el semiplano correspondiente a la coordenada angular constante que contiene al punto \mathbf{A}_1 . Todos los ensayos numéricos que se presentan en este capítulo se han realizado sobre esta versión bidimensional del modelo.

1.2.2. Alimentos líquidos

El modelo que proponemos para los alimentos líquidos contempla que se produzca convección también en la parte correspondiente al alimento. Supondremos que ambos fluidos (presurizante y alimento) son newtonianos y débilmente compresibles, y que están separados por el contenedor de la muestra, por lo que no pueden mezclarse. Distinguiremos dos campos de velocidades, \mathbf{u}_F y \mathbf{u}_P , para la comida y el fluido presurizante, respectivamente.

De nuevo la convección jugará un papel importante, no sólo en el medio que transmite la presión, sino también en el alimento. Por ello, despreciar este efecto puede producir unos resultados muy lejanos del comportamiento térmico real.

El problema se modeliza, como en el apartado 1.2.1, mediante las ecuaciones de Navier–Stokes, aunque ahora se hace necesario añadir una ecuación de conservación del momento en el

dominio ocupado por la comida:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \frac{dP}{dt} T \quad \text{en } \Omega^* \times (0, t_f) \\ \rho \frac{\partial \mathbf{u}_F}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla \mathbf{u}_F + \nabla \mathbf{u}_F^t) + \rho (\mathbf{u}_F \cdot \nabla) \mathbf{u}_F \\ \quad = -\nabla p - \frac{2}{3} \nabla (\eta \nabla \cdot \mathbf{u}_F) + \rho \mathbf{g} \quad \text{en } \Omega_F^* \times (0, t_f) \\ \rho \frac{\partial \mathbf{u}_P}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla \mathbf{u}_P + \nabla \mathbf{u}_P^t) + \rho (\mathbf{u}_P \cdot \nabla) \mathbf{u}_P \\ \quad = -\nabla p - \frac{2}{3} \nabla (\eta \nabla \cdot \mathbf{u}_P) + \rho \mathbf{g} \quad \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_F) = 0 \quad \text{in } \Omega_F^* \times (0, t_f) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_P) = 0 \quad \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f). \end{array} \right. \quad (1.11)$$

Este sistema se completa con las condiciones puntuales, de contorno e iniciales

$$\left\{ \begin{array}{ll} k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \text{sobre } \Gamma^* \setminus (\Gamma_r^* \cup \Gamma_{up}^*) \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h(T_{amb} - T) & \text{sobre } \Gamma_{up}^* \times (0, t_f) \\ T = T_r & \text{sobre } \Gamma_r^* \times (0, t_f), \\ \mathbf{u}_F = 0 & \text{sobre } \Gamma_F^* \times (0, t_f) \\ \mathbf{u}_P = 0 & \text{sobre } \Gamma_P^* \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } \Omega^* \\ \mathbf{u}_F(0) = 0 & \text{en } \Omega_F^* \\ \mathbf{u}_P(0) = 0 & \text{en } \Omega_P^* \\ p = 10^5 & \text{sobre } \mathbf{A}_1 \times (0, t_f) \\ p = 10^5 & \text{sobre } \mathbf{A}_2 \times (0, t_f), \end{array} \right. \quad (1.12)$$

donde Γ_F^* denota la frontera de Ω_F^* y los puntos \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 son puntos situados en las componentes exteriores de Γ_P^* y Γ_F^* , respectivamente (véase la Figura 1.1); nuevamente es necesario fijar el valor de la presión p en un punto de cada dominio, debido a la sola aparición de su gradiente en las ecuaciones. También usaremos para este modelo la versión bidimensional (válida gracias a la simetría axial) de (1.11)–(1.12).

Por último, hay que señalar que si el alimento es un fluido no newtoniano la segunda ecuación del sistema (1.11) debe ser reemplazada por la correspondiente ecuación de conservación del momento. Esto complicaría en gran medida el modelo y no será objeto de nuestro estudio.

1.2.3. Modelos en consideración

Por razones prácticas, en este trabajo focalizaremos el interés en dos situaciones ilustrativas que reúnen las características más relevantes:

- Una muestra de alimento de tipo sólido de un tamaño suficiente como para que la razón de relleno de la cámara sea grande. De acuerdo con los resultados de [60] discutidos en el

apartado 1.2.1, el sistema (1.8) será el modelo matemático completo (que denominaremos SFull) considerado.

- La muestra es de alimento líquido y de un tamaño relativamente pequeño frente al de la cámara. En este caso, el modelo completo viene dado a través del sistema formado por las ecuaciones y condiciones (1.11)–(1.12); lo denotaremos LFull.

Los casos de alimento sólido con muestra pequeña y alimento líquido con muestra grande no se incluyen debido a que su modelización es, o bien más sencilla (en el primero de los casos, se utiliza el sistema (1.9)–(1.10)) o bien la misma que la del modelo completo LFull.

1.2.4. Análisis de sensibilidad respecto a los datos

En la práctica, los coeficientes involucrados en el sistema (1.8), el sistema (1.9)–(1.10) o el sistema (1.11)–(1.12), no son conocidos, sino que se toman aproximaciones de ellos con una desviación estándar que suele ser inferior al 5 % del valor correspondiente (cf., por ejemplo, [70]). Por otra parte, las eventuales limitaciones del equipo utilizado pueden modificar, siquiera ligeramente, las condiciones del experimento: la curva de presiones puede presentar una pequeña desviación respecto a la proyectada, puede haber errores de medición en la temperatura inicial, etc. Consecuentemente, se hace necesario estudiar el impacto que estas discrepancias pueden causar en la evolución, tanto de la temperatura como de la actividad de las enzimas, durante el tiempo que dure el tratamiento AP–TM.

Con tal objetivo, realizamos el siguiente análisis de la sensibilidad respecto a los datos de los modelos considerados: se perturba el modelo original para generar $N \in \mathbb{N}$ modelos (a cuya temperatura solución llamamos T_{per} , $\text{per} = 1, 2, \dots, N$). En ellos, los datos ρ , C_p , k , α , η , T_0 , T_f y P han sido modificados de manera aleatoria mediante perturbaciones del orden del $\pm 5\%$.

Antes de explicar el análisis realizado, introduzcamos un poco de notación. Para una función arbitraria $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ con $D \subset \mathbb{R}^p$, definimos su valor medio sobre D como

$$\mathcal{M}(f; D) = \frac{1}{|D|} \int_D f(z) dz,$$

donde $|D|$ es la medida de D . Por ejemplo, el valor medio de la temperatura del modelo completo vendrá dado por $\mathcal{M}(T; \Omega \times (0, t_f))$.

Nosotros calcularemos, para cada perturbación, el valor medio de la diferencia entre la temperatura del modelo completo y la del correspondiente modelo perturbado; de estos N valores medios, calcularemos su media aritmética. Así pues, estamos tomando la media aritmética de los valores medios de los errores en temperatura, esto es,

$$\text{AET} = \frac{1}{N} \sum_{\text{per}=1}^N \mathcal{M}(|T - T_{\text{per}}|; \Omega \times (0, t_f)). \quad (1.13)$$

Esta cantidad la llamaremos, con un pequeño abuso de lenguaje, error medio en la temperatura, y lo compararemos con el valor medio de la temperatura del modelo completo, $\mathcal{M}(T; \Omega \times (0, t_f))$, para obtener el correspondiente error relativo en términos porcentuales

$$\text{RAET} = 100 \times \frac{\text{AET}}{\mathcal{M}(T; \Omega \times (0, t_f))}, \quad (1.14)$$

el cual denominaremos error medio relativo en la temperatura.

Hagamos una consideración final: Obviamente la actividad enzimática tiene únicamente lugar en el alimento; por consiguiente, debemos centrar nuestro interés en lo que ocurra en el dominio correspondiente Ω_F . Con tal fin, definimos el error medio en la temperatura en el alimento AET_F y el correspondiente error relativo porcentual $RAET_F$, sin más que cambiar Ω por Ω_F en las fórmulas (1.13) y (1.14), respectivamente.

1.2.5. Modelos simplificados

Con objeto de disminuir la complejidad y coste computacional que supone la resolución numérica de los modelos completos (1.8) y (1.11)–(1.12), puede ser interesante trabajar con versiones más simples de éstos (que llamaremos modelos simplificados), que sean más sencillos de implementar y proporcionen, de manera rápida, resultados que no disten en demasía de los aportados por los modelos completos. De hecho, estas simplificaciones muestran plenamente su utilidad cuando se acometen procesos de optimización, los cuales requieren resolver el mismo modelo un número elevado de ocasiones, con diversos juegos de datos distintos.

Aquí sometemos a estudio (e implementamos su resolución numérica) una versión simplificada del modelo completo SFull para alimento sólido, y dos simplificaciones del modelo para alimento líquido LFull, a saber:

- Para el caso sólido utilizaremos un modelo simplificado con coeficientes constantes, reemplazando los coeficientes C_p , k , α , ρ y η por sus valores medios (\bar{C}_p , \bar{k} , $\bar{\alpha}$, $\bar{\rho}$ y $\bar{\eta}$, respectivamente) en el rango de temperaturas y presiones que se dan en el proceso. Este modelo lo denotaremos por SCC.
- Cuando el alimento es líquido estudiamos, en primer lugar, un modelo de coeficientes constantes, similar en todo al anterior, salvo en que la dependencia de la densidad ρ respecto a la presión y la temperatura se mantiene; esto se hace con objeto de no desestimar el efecto de las fuerzas gravitacionales. La notación para este modelo será LCC.
- El segundo modelo simplificado para el caso líquido se basa en la aproximación de Boussinesq. De forma más precisa, los coeficientes C_p , k , α y η se toman, al igual que antes, constantes; a la densidad ρ se le da también un valor constante $\bar{\rho}$ (de nuevo, el valor medio en el rango de temperatura y presión), salvo para el término que involucra a la fuerza de la gravedad, $\rho\mathbf{g}$ (segunda y tercera ecuaciones de (1.11)) donde se mantiene la dependencia de P y T . Además, se trabaja como si ambos fluidos fueran incompresibles. Este modelo lo denotaremos como LB y viene dado por

$$\left\{ \begin{array}{ll} \bar{\rho}\bar{C}_p \frac{\partial T}{\partial t} - \bar{k}\nabla^2 T + \bar{\rho}\bar{C}_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \bar{\alpha} \frac{dP}{dt} T & \text{en } \Omega^* \times (0, t_f), \\ \bar{\rho} \frac{\partial \mathbf{u}_F}{\partial t} - \bar{\eta}\nabla^2 \mathbf{u}_F + \bar{\rho}(\mathbf{u}_F \cdot \nabla) \mathbf{u}_F = -\nabla p + \rho\mathbf{g} & \text{en } \Omega_F^* \times (0, t_f), \\ \bar{\rho} \frac{\partial \mathbf{u}_P}{\partial t} - \bar{\eta}\nabla^2 \mathbf{u}_P + \bar{\rho}(\mathbf{u}_P \cdot \nabla) \mathbf{u}_P = -\nabla p + \rho\mathbf{g} & \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f), \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_F = 0 & \text{en } \Omega_F^* \times (0, t_f), \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_P = 0 & \text{en } \Omega_P^* \times (0, t_f), \end{array} \right.$$

añadiendo las condiciones puntuales, de contorno e iniciales (1.12).

Puesto que nuestro interés es evaluar cómo de eficiente resulta tomar en consideración los modelos simplificados en lugar de los completos, realizaremos una comparación de los resultados obtenidos mediante los primeros con los conseguidos utilizando los segundos. En concreto, denotando por T_{sim} la temperatura obtenida al resolver numéricamente cualquiera de las simplificaciones y llamando T a la análoga del modelo completo asociado, vamos a calcular el error medio cometido en el dominio completo (espacio–temporal),

$$\text{ET} = \mathcal{M}(|T - T_{\text{sim}}|; \Omega \times (0, t_f)), \quad (1.15)$$

así como el correspondiente error relativo porcentual

$$\text{RET} = 100 \times \frac{\text{ET}}{\mathcal{M}(|T|; \Omega \times (0, t_f))}. \quad (1.16)$$

Como se ha comentado al final del apartado 1.2.4, nuestro interés está principalmente centrado en lo que ocurra en el alimento y, por ello, lo que analizaremos serán las cantidades ET_F y RET_F , definidas mediante la sustitución de Ω por Ω_F en (1.15) y (1.16), respectivamente.

1.3. Resultados numéricos para los modelos de transferencia de masa y calor

Esta sección recoge los resultados numéricos obtenidos cuando se resuelven los modelos completos y sus perturbaciones, y se realiza el consiguiente análisis de sensibilidad; también se resuelven los modelos simplificados y se estudian las discrepancias con los completos correspondientes.

Para los experimentos numéricos se ha considerado un dominio cuyo tamaño es el de la citada unidad piloto (Figura 1.2) utilizada también en [60]. En concreto, se fijan los valores $L = 0.09$ m, $H = 0.654$ m, $L_2 = 0.05$ m, $H_1 = 0.222$ m y $H_5 = 0.472$ m (Figura 1.1).

Se ha trabajado con los dos ejemplos relevantes descritos en el apartado 1.2.3. La altura y posición del tapón de caucho es la misma, tanto en el caso de alimento sólido como en el de alimento líquido, y viene dada por $H_3 = 0.404$ m y $H_4 = 0.439$ m (véase, nuevamente, la Figura 1.1); el tamaño de la muestra viene fijado, en el caso sólido, por $L_1 = 0.045$ m y $H_2 = H_1$, mientras que cuando el alimento es líquido se toman $L_1 = 0.02$ m y $H_2 = 0.294$ m.

Los ensayos numéricos se han implementado sobre COMSOL Multiphysics 3.4, plataforma que utiliza el método de elementos finitos. La temperatura se ha aproximado mediante elementos finitos de tipo Lagrange P2. Para la discretización espacial de la velocidad y la presión se han usado elementos finitos mixtos de tipo Lagrange P2–P1, con la condición de estabilidad de Ladyzhenskaya, Babuska y Brezzi (cf. [5]). La integración en tiempo se realiza mediante el método IDA (*Implicit Differential–Algebraic*), el cual se basa en una estrategia de paso adaptativo y orden variable, determinado éste mediante fórmulas regresivas BDF (*Backward Differential Formulae*) de órdenes uno a cinco (véanse [29] y [65]). Los sistemas no lineales se resuelven mediante el método de Newton amortiguado (*damped*, véase, v. gr., [57]), mientras que para los sistemas de ecuaciones lineales se usa el método UMFPACK (método multifrontal para matrices dispersas y no necesariamente simétricas, cf. [6]) combinado con la técnica de estabilización GLS (*Galerkin Least Squares*, véanse [26] y [30]). Todos los cálculos se han realizado en una máquina dotada de cuatro procesadores (*quad–core*) con 3.4 Ghz por procesador y 8 GB de memoria RAM.

Se ha supuesto que los parámetros físicos del fluido presurizante y de la comida de tipo líquido son, todos ellos, iguales a los correspondientes del agua, los cuales dependen de la temperatura

y de la presión. De forma más precisa, la densidad ρ , el calor específico C_p y la conductividad k se han evaluado en las distintas presiones haciendo una adecuada traslación (*shifting approach*, cf. [59]) de los valores (conocidos) a presión atmosférica. Para el coeficiente de dilatación α se ha usado la expresión descrita en [58]. Finalmente, la viscosidad dinámica η se calcula mediante interpolación lineal de los datos obtenidos gracias al recurso [47].

Por otra parte, se ha elegido la tilosa como ejemplo de alimento de tipo sólido. Aunque se trata de un gel, tiene propiedades similares a las de la carne (cf. [56]). Los valores de los coeficientes a presión atmosférica se han extraído del trabajo [59]. Para conocer su valor a otros niveles de presión se ha utilizado, de nuevo, interpolación lineal, tras haber procedido a un reescalado de los datos a presión atmosférica (véanse [25] y [56]).

Llegados a este punto, es pertinente señalar que, en los casos más generales en que las propiedades termofísicas de un alimento en particular sean desconocidas, las herramientas matemáticas del ámbito de los problemas inversos pueden ser de utilidad para identificar tales parámetros; por ejemplo, en [20] los autores estudian cómo identificar el coeficiente de transferencia de calor en un determinado prototipo. Esta identificación de coeficientes dependientes de la temperatura y la presión es objeto de estudio en los restantes capítulos de esta memoria; el trabajo [15] contiene un planteamiento matemático riguroso de un problema de esta índole, en el que se consigue identificar un parámetro dependiente de la temperatura.

Continuando con la descripción de los parámetros termofísicos, los relativos al acero y al tapón se han considerado constantes. Concretamente, para el acero se han tomado $\rho = 7833 \text{ kg m}^{-3}$, $C_p = 465 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k = 55 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, mientras que los valores elegidos para el tapón de caucho han sido $\rho = 1110 \text{ kg m}^{-3}$, $C_p = 1884 \text{ J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k = 0.173 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$.

En cuanto a los datos sobre la temperatura usados en los experimentos numéricos, la de referencia ha sido $T_r = 40^\circ\text{C}$ y la temperatura ambiente $T_{\text{amb}} = 19.3^\circ\text{C}$. Por último, el coeficiente de transferencia de calor utilizado es $h = 28 \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-1}$.

Para cada tipo de comida, simulamos dos tratamientos de alta presión, con temperaturas iniciales y curvas de presión distintas:

- (I) Tratamiento P1: Se elige como temperatura inicial

$$T_0 = \begin{cases} 40^\circ\text{C} & \text{in } \Omega_S \\ 22^\circ\text{C} & \text{in } \Omega \setminus \Omega_S \end{cases}$$

y se incrementa la presión linealmente durante los primeros 305 segundos hasta alcanzar 600 MPa, momento a partir del cual se mantiene constante. En otros términos, la presión generada por el equipo verifica $P(0) = 0$ y

$$\frac{dP}{dt} = \begin{cases} \frac{120}{61} 10^6 \text{ Pa s}^{-1}, & 0 < t \leq 305 \\ 0 \text{ Pa s}^{-1}, & t > 305. \end{cases}$$

- (II) Tratamiento P2: La temperatura inicial se toma $T_0 = 40^\circ\text{C}$, constante en todo el dominio. La presión aumenta linealmente, con la misma pendiente que en el tratamiento P1, durante los primeros 183 segundos hasta alcanzar el valor de 360 MPa, en el que permanece constante posteriormente. En concreto, se tiene que $P(0) = 0$ y

$$\frac{dP}{dt} = \begin{cases} \frac{120}{61} 10^6 \text{ Pa s}^{-1}, & 0 < t \leq 183 \\ 0 \text{ Pa s}^{-1}, & t > 183. \end{cases}$$

Para cada uno de estos cuatro casos (sólido/líquido, P1/P2) se ha calculado la solución del modelo completo descrito en el apartado 1.2.3, se ha llevado a cabo el análisis de sensibilidad explicado en el apartado 1.2.4 y se ha hecho el estudio comparativo, descrito en el apartado 1.2.5, respecto a los modelos simplificados.

1.3.1. Modelos completos

En la Figura 1.3 se muestra la distribución espacial de temperaturas obtenida, tanto para el caso sólido como el líquido y para ambos tratamientos, transcurridos 15 min. La distribución espacial

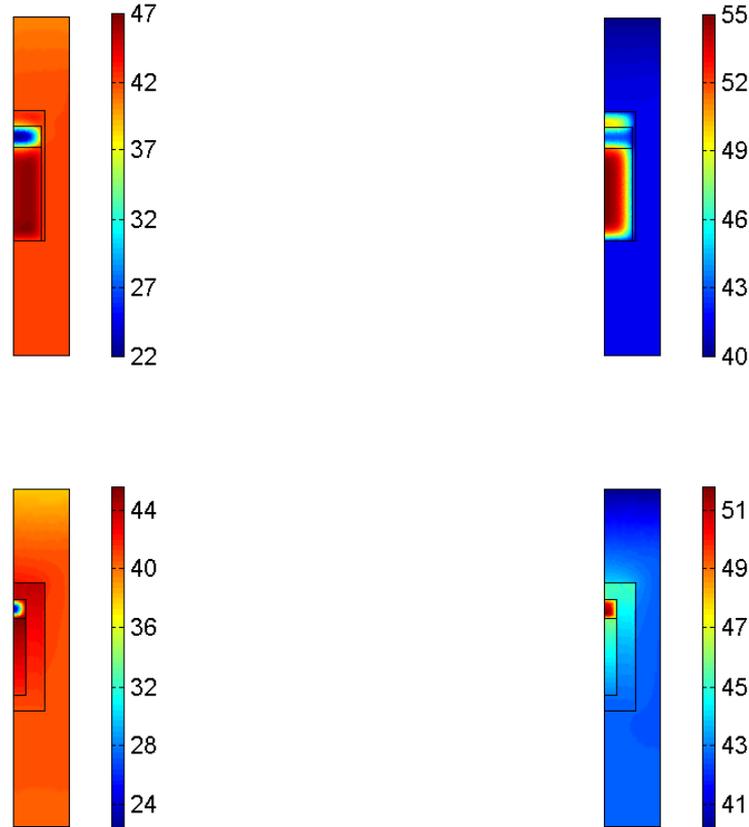


Figura 1.3: Distribución de la temperatura ($^{\circ}\text{C}$) en el dominio completo en el instante $t = 15$ min, en el caso de alimento sólido (**Arriba**) y líquido **Abajo**), tras los tratamientos P1 (**Izquierda**) y P2 (**Derecha**).

de la media temporal de las temperaturas, i. e., la función

$$x \mapsto \mathcal{M}(T(x, \cdot); (0, t_f)), \quad x \in \Omega,$$

para los cuatro casos está representada en la Figura 1.4. Por otra parte, las gráficas de la evolución de la temperatura media en la muestra, i. e., la función

$$t \mapsto \mathcal{M}(T(\cdot, t); \Omega_F), t \in [0, t_f],$$

se dibujan en la Figura 1.5, donde también están representadas las gráficas de la evolución de la temperatura en dos puntos (Figura 1.1): el primero, \mathbf{B}_1 , situado en el centro de la muestra (en el eje de simetría); el segundo, \mathbf{B}_2 , en la superficie de la muestra, a la misma altura que \mathbf{B}_1 .

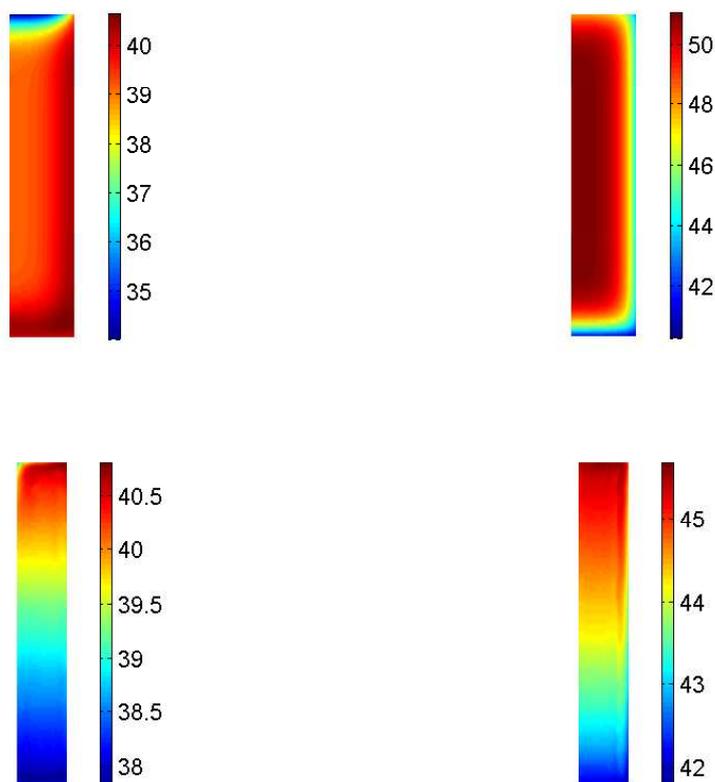


Figura 1.4: Media temporal, durante los primeros 15 minutos, de la distribución de temperatura ($^{\circ}\text{C}$) en la muestra de alimento sólido (**Arriba**) y líquido (**Abajo**), durante los tratamientos P1 (**Izquierda**) y P2 (**Derecha**).

Estas figuras ilustran cómo el modelo captura la distribución no homogénea de la temperatura en el interior del dominio y el distinto comportamiento entre los casos de alimento sólido y líquido. Por ejemplo, en este último, la distribución de temperaturas es más homogénea que cuando el alimento es sólido, debido a la transferencia de masa. Consecuentemente, el modelo y la aproximación numérica de su solución es consistente con el comportamiento físico esperado.

Como ya se destacaba en [60] para alimentos de tipo sólido, nuestros resultados numéricos para alimentos líquidos apuntan el interés de la estrategia consistente en trabajar con una temperatura inicial inferior a la de referencia, como se hace en el tratamiento P1, con el objeto de anticiparse al incremento de temperatura resultante de la compresión. Esto conducirá a un proceso más uniforme, que evitará la aparición de gradientes de temperatura grandes dentro del alimento, y de temperaturas mucho mayores que T_r (recuérdese que una de las mejores aportaciones de la tecnología de altas presiones es permitir tratamientos que eludan el uso de altas temperaturas, las cuales degradan, en general, la calidad de los alimentos). En la Figura 1.5 se puede observar claramente cómo, bajo el tratamiento P1, se produce el comportamiento descrito.

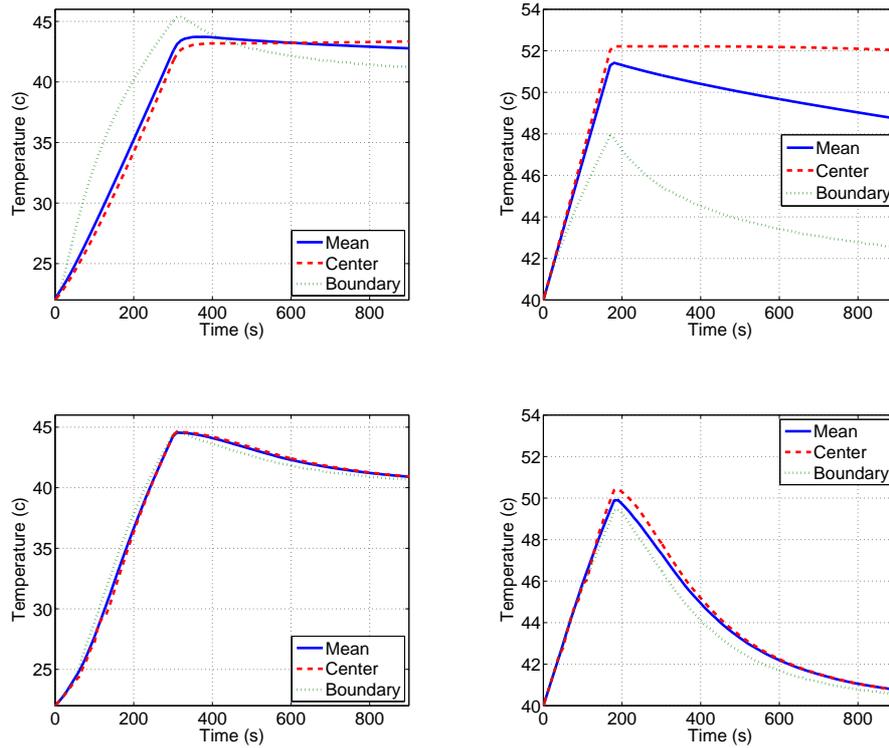


Figura 1.5: Evolución de la temperatura media de la muestra de alimento (—), temperatura en el punto medio B_1 (- -) y en el punto de la frontera de la muestra B_2 (...) (véase la Figura 1.1) durante los tratamientos P1 (Izquierda) y P2 (Derecha) para alimento sólido (Arriba) y líquido (Abajo).

1.3.2. Análisis de sensibilidad de los modelos completos

Siguiendo la metodología explicada en el apartado 1.2.4, se han generado $N = 10$ versiones perturbadas de los modelos completos mediante perturbaciones aleatorias del $\pm 5\%$. En la Tabla 1.1 se compendian los resultados obtenidos.

Tabla 1.1: MT: Valor medio de la temperatura, $\mathcal{M}(T; \Omega \times (0, t_f))$ ($^{\circ}\text{C}$); AET: Media de los valores medios de los errores en temperatura ($^{\circ}\text{C}$) (véase (1.13)); RAET: Relativización de AET al tamaño de MT (%) (véase (1.14)); MT_F , AET_F , $RAET_F$: Ídem en la muestra de alimento, cambiando Ω por Ω_F .

Tratamiento	Alimento	Dominio completo			Muestra		
		MT	AET	RAET	MT_F	AET_F	$RAET_F$
P1	Sólido	39.39	1.08	2.74	39.37	1.32	3.34
P2	Sólido	41.46	1.14	2.75	49.25	1.45	2.93
P1	Líquido	39.77	1.07	2.68	39.06	1.05	2.70
P2	Líquido	40.49	1.15	2.83	43.95	1.17	2.67

La media aritmética AET de los valores medios de los errores en temperatura, definida en (1.13), es menor que 1.15°C , lo que representa un error relativo REAT (cf. (1.14)) del 2.83% . Además,

las cantidades análogas en la muestra de alimento, es decir, AET_F y $REAT_F$, son menores que 1.45°C y 3.34% , respectivamente. Hay que resaltar que ambos errores porcentuales son del orden de las perturbaciones a las que han sido sometidos los parámetros, lo cual da cuenta de la robustez de los modelos.

1.3.3. Estudio comparativo de los modelos simplificados

Fijamos ahora nuestra atención en el estudio de la eficiencia de los modelos simplificados introducidos en el apartado 1.2.5. Los resultados de la comparación entre ellos y los modelos completos se reflejan en la Tabla 1.2.

Tabla 1.2: Resultados obtenidos para los modelos completos y simplificados. MT: Valor medio de la temperatura, $\mathcal{M}(T; \Omega \times (0, t_f))$ ($^\circ\text{C}$); ET: Valor medio del error en temperatura ($^\circ\text{C}$) (véase (1.15)); RET: Relativización de ET al tamaño de MT (%) (véase (1.16)); MT_F , ET_F , RET_F : Ídem en la muestra de alimento; CT: Tiempo de cálculo (s) para la resolución del modelo.

Tratamiento	Modelo	Dominio completo			Muestra			CT
		MT	ET	RET	MT_F	ET_F	RET_F	
P1	SFull	39.39	—	—	39.37	—	—	53
P2	SFull	41.46	—	—	49.25	—	—	51
P1	SCC	39.71	0.30	0.77	41.38	1.88	4.77	4
P2	SCC	41.50	0.04	0.10	49.53	0.25	0.52	4
P1	LFull	39.77	—	—	39.06	—	—	3135
P2	LFull	40.49	—	—	43.95	—	—	4141
P1	LCC	39.90	0.16	0.41	39.95	0.81	2.07	2459
P2	LCC	40.48	0.03	0.06	43.94	0.09	0.20	2877
P1	LB	39.89	0.15	0.37	39.89	0.77	1.96	2196
P2	LB	40.47	0.03	0.08	43.94	0.10	0.22	2475

Como puede observarse, el valor medio del error en la temperatura es, en todos los modelos simplificados, mayor cuando se toma sólo en la muestra que cuando se toma en el dominio completo. Se trata de un resultado esperado, habida cuenta de que los parámetros termofísicos del acero y del caucho son los mismos en todos los modelos, por lo que las mayores discrepancias se sitúan en el alimento y en el medio presurizante. En términos relativos, el porcentaje que supone el valor medio del error en la temperatura es, para todas las simplificaciones, del mismo orden que el obtenido al realizar el análisis de sensibilidad del apartado 1.3.2. Esto asegura la bondad de los resultados obtenidos.

Cuando se comparan los tratamientos, se percibe que el error cometido en los tres modelos simplificados (SCC, LCC y LB) es, si se aplica el tratamiento P2, menor que si es el P1 el aplicado. La explicación de este hecho se encuentra en que el rango de presión y temperatura en P2 es menor que en P1 y, por consiguiente, la sustitución de los coeficientes por su valor medio es una mejor aproximación en el segundo tratamiento que en el primero.

En la comparación alimento sólido vs. alimento líquido, las discrepancias para el segundo son menores. El disímil tamaño de los rangos de temperatura (mayor en el caso del alimento de tipo sólido) da razón de este comportamiento.

Si, finalmente, atendemos al tiempo de cálculo, vemos que en el caso sólido éste se ve reducido en un factor de 13, mientras que para la muestra de comida líquida la reducción no llega a la mitad. La explicación estriba en que el modelo SCC es lineal, mientras que los modelos LCC y LB mantienen su condición de no lineales. En cualquier caso, estos dos últimos generan errores similares, aunque el segundo es más rápido y fácil de implementar que el primero.

La reducción del tiempo de cálculo combinada con unos tamaños de error aceptables y del mismo orden que los errores debidos a la imprecisión de los datos, hace de los modelos simplificados una buena alternativa a los modelos completos, sobre todo cuando se necesitan implementar procesos de optimización.

1.4. Acoplamiento de los modelos de inactivación enzimática con los de transferencia de masa y calor

En esta sección se lleva a cabo el acoplamiento de los modelos de transferencia de masa y calor descritos en la Sección 1.2 con la ecuación cinética (1.1). Esto nos conducirá a un modelo capaz de describir la distribución no homogénea de la actividad enzimática que tiene lugar en la muestra de alimento. Además, realizaremos un estudio numérico del impacto que los tratamientos P1 y P2, descritos en el apartado 1.3, provocan en la inactivación de tres diferentes enzimas: *Bacillus Subtilis* α -Amylase (BSAA), Lipoxigenasa (LOX) y Pectin-Metil-Esterasa (PME).

1.4.1. Ecuación para la actividad enzimática

Estudiamos la actividad enzimática en el seno de un alimento de distinta forma según que éste sea sólido (en cuyo caso las partículas se pueden pensar en reposo) o líquido (en cuyo caso se tendrá en consideración que las partículas se mueven debido a la transferencia de masa).

Alimentos de tipo sólido

Para este tipo de alimentos en que las partículas no se mueven, de acuerdo con la ecuación (1.4), la actividad A en una partícula situada en el punto $x \in \Omega_F$ en el instante t la suponemos dada por

$$A(x, t) = A(x, 0) \exp \left(- \int_0^t \kappa(P(\sigma), T(x, \sigma)) d\sigma \right). \quad (1.17)$$

La presión aportada por el equipo P (MPa) es una función conocida (suponemos que la presión p , debida a la transferencia de masa, es despreciable comparada con P) y la temperatura T (K) se obtiene resolviendo el sistema (1.8).

Alimentos líquidos

Puesto que ahora las partículas se mueven dentro del dominio correspondiente al alimento Ω_F , para cada punto $x \in \Omega_F$ consideramos la trayectoria de una partícula de comida que finaliza en el punto x . Esta trayectoria, que denominaremos X , es la solución del problema de valor final

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt}(t) = \mathbf{u}_F(X(t), t), & t \in (0, t_f) \\ X(t_f) = x, \end{cases} \quad (1.18)$$

donde \mathbf{u}_F es el campo de velocidades que se calcula resolviendo el sistema (1.11)–(1.12). Consecuentemente, de acuerdo otra vez con (1.4), la actividad A en una partícula situada en el punto $x \in \Omega_F$ en el instante t se escribe

$$A(x, t) = A(X(0), 0) \exp \left(- \int_0^t \kappa(P(\sigma), T(X(\sigma), \sigma)) d\sigma \right). \quad (1.19)$$

Como temperatura T se toma la obtenida al resolver el sistema (1.11)–(1.12). Nótese que la trayectoria X que aparece bajo el signo integral no es la que en el instante t pasa por el punto x sino, como se ha dicho, la que finaliza en el punto x .

1.4.2. Discretización de la ecuación para la actividad enzimática

Con vistas a resolver de forma aproximada la ecuación que modeliza la actividad enzimática, dado $n \in \mathbb{N}$, trabajamos con la discretización temporal definida por $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = t_f$, con paso uniforme $\tau = t_i - t_{i-1} = \frac{t_f}{n}$, para $i = 1, 2, \dots, n$.

Con objeto de evaluar la actividad enzimática en cualquier punto de la muestra de alimento, consideraremos un mallado de dicha muestra y calcularemos la actividad en los nodos de esta malla. La actividad en cualquier punto se obtendrá mediante interpolación de los valores de la actividad en los citados nodos.

Alimentos de tipo sólido

Consideraremos una malla rectangular equiespaciada en el dominio correspondiente al alimento Ω_F . Para cada nodo x de dicho mallado, denotando $\kappa_j(x) = \kappa(P(t_j), T(x, t_j))$, se puede llegar a una aproximación de (1.17) a través de, por ejemplo, la fórmula de los trapecios:

$$A(x, t_i) \approx A(x, 0) \exp \left(- \frac{\tau}{2} \sum_{j=0}^{i-1} \left(\kappa_j(x) + \kappa_{j+1}(x) \right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Alimentos líquidos

Dado el mismo mallado de Ω_F que en el epígrafe anterior, para cada nodo x denotamos por X la trayectoria de una partícula que satisfaga $X(t_f) = x$. Definimos las aproximaciones X_i de $X(t_i)$, con $i = 0, 1, \dots, n$, mediante la discretización de (1.18) con el siguiente esquema implícito regresivo

$$\begin{cases} X_n = x \\ X_i = X_{i+1} - \tau \mathbf{u}_F(X_i, t_i), \quad i = n-1, n-2, \dots, 0. \end{cases} \quad (1.20)$$

En cada paso de (1.20) debe resolverse una ecuación no lineal, tarea que se acomete mediante la aproximación numérica de la solución del problema de minimización

$$\min_{y \in \Omega_F} \|X_{i+1} - y - \tau \mathbf{u}_F(y, t_i)\|_2.$$

Para ello, se utiliza el método de máximo descenso tomando como valor inicial el que proporciona el esquema regresivo explícito

$$y_i^{(0)} = X_{i+1} - \tau \mathbf{u}_F(X_{i+1}, t_{i+1}).$$

La iteración del método de descenso se detiene cuando se alcanza un punto $y_i^{(m)} \in \Omega_F$ tal que

$$\left\| X_{i+1} - y_i^{(m)} - \tau \mathbf{u}_F(y_i^{(m)}, t_i) \right\|_2 < 10^{-4} \left\| X_{i+1} - y_i^{(0)} \right\|_2.$$

Utilizando la notación $\kappa_j(X) = \kappa(P(t_j), T(X_j, t_j))$, consideramos la siguiente aproximación de (1.19)

$$A(x, t_i) \approx A(X_0, 0) \exp \left(-\frac{\tau}{2} \sum_{j=0}^{i-1} \left(\kappa_j(X) + \kappa_{j+1}(X) \right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

1.5. Resultados numéricos para el acoplamiento de la inactivación enzimática y la transferencia de masa y calor

Las pruebas numéricas se han realizado en el mismo contexto (parámetros termofísicos y dominio de definición) que en el apartado 1.3. Se ha tomado como tiempo final de los tratamientos $t_f = 15$ min, y se ha elegido una discretización temporal uniforme con $n = 900$. Para el alimento de tipo sólido la actividad se evalúa en un malla de Ω_F , rectangular y uniforme, con 10000 nodos; sin embargo, la malla considerada en el alimento líquido, del mismo tipo que la anterior, tiene tan sólo 25 nodos. Esta diferencia se debe a que el coste computacional en el caso sólido es muchísimo menor que en el líquido, por lo que es posible trabajar en el primero con una malla mucho más fina.

Se muestran resultados relativos a la evolución de la actividad enzimática en los cuatro casos estudiados (alimento líquido / alimento sólido, tratamiento P1 / tratamiento P2). También se analiza la sensibilidad de la actividad enzimática final respecto a los datos y a los parámetros termofísicos de los modelos (1.8) y (1.11)–(1.12). Finalmente, se hace el estudio comparativo de dicha actividad final cuando se toman, en lugar de los modelos completos, los modelos simplificados del apartado 1.2.5.

Enzimas consideradas en los experimentos numéricos

En los ensayos numéricos se ha trabajado con las siguientes enzimas, y sus correspondientes factores de inactivación:

***Bacillus Subtilis* α -Amylase (BSAA):** Se trata de una enzima producida por la bacteria *Bacillus Subtilis*, la cual está presente en el suelo y puede contaminar los alimentos, pero raramente produce intoxicaciones. Esta enzima cataliza la hidrólisis del almidón, generando azúcares (como la maltosa) que pueden modificar el sabor de la comida.

El factor de inactivación κ se ha considerado dado por la ecuación (1.2), con $P_{\text{ref}} = 500$ MPa, $T_{\text{ref}} = 313$ K, $\kappa_{\text{ref}} = 0.092$ min⁻¹, $B = 10097$ K y $C = -8.7 \times 10^{-4}$ MPa⁻¹. Los detalles sobre el protocolo experimental y la determinación de estos parámetros pueden verse en [49].

Lipoxigenasa (LOX): Esta enzima se localiza en diversas plantas y vegetales como las judías verdes o los guisantes. Es responsable de la aparición de aromas no deseados en estos productos.

En esta ocasión será la ecuación (1.3) la que se use para calcular κ , tomando $P_{\text{ref}} = 500$ MPa, $T_{\text{ref}} = 298$ K, $\kappa_{\text{ref}} = 0.0134$ min⁻¹, $\Delta V_{\text{ref}} = -308.14$ cm³ mol⁻¹, $\Delta S_{\text{ref}} = 90.63$ J mol⁻¹K⁻¹, $\Delta C_p = 2466.71$ J mol⁻¹K⁻¹, $\Delta \zeta = 2.22$ cm³ mol⁻¹K⁻¹ y $\Delta \nu = -0.54$ cm⁶ J⁻¹mol⁻¹ (véase el trabajo [33] para más detalles).

Pectin–Metil–Esterasa (PME): Común a muchos vegetales, esta enzima puede estar presente en los zumos o jugos, disminuyendo el grado de esterificación de las pectinas. Este proceso reduce la viscosidad de los zumos y afecta a su sabor, color, textura y aroma.

El ejemplo aquí analizado se corresponde con el jugo de zanahoria (cf. [52]). De nuevo se usa la expresión (1.3) para describir el factor de inactivación κ , esta vez con los valores $P_{\text{ref}} = 700 \text{ MPa}$, $T_{\text{ref}} = 323.15 \text{ K}$, $\kappa_{\text{ref}} = 0.0705 \text{ min}^{-1}$, $\Delta V_{\text{ref}} = -44.0124 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$, $\Delta S_{\text{ref}} = 168.4 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\Delta C_p = 1376.6 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\Delta \zeta = -0.0339 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ y $\Delta \nu = -0.1195 \text{ cm}^6 \text{ J}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

1.5.1. Modelos completos

Fijemos nuestra atención en la evolución de la actividad enzimática cuando se trabaja con los modelos completos. Como puede observarse en la Tabla 1.3 y en la Figura 1.6, la eficiencia de los tratamientos P1 y P2 es distinta en función de la enzima estudiada:

Tabla 1.3: Actividad final en los modelos completos y su correspondiente análisis de sensibilidad, para las enzimas BSAA, LOX y PME. MA: Valor medio de la actividad para los modelos completos en el tiempo final $t_f = 15 \text{ min}$, $\mathcal{M}(A(\cdot, t_f); \Omega_F)$ (%); AEA: Media de los valores medios de los errores en la actividad final (%) (véase (1.21)).

Tratamiento	Alimento	BSAA		LOX		PME	
		MA	AEA	MA	AEA	MA	AEA
P1	Sólido	49.72	4.60	33.54	6.81	87.55	2.28
P2	Sólido	26.43	5.01	67.18	6.43	93.86	0.52
P1	Líquido	53.57	4.02	36.95	7.45	88.17	2.40
P2	Líquido	48.18	3.97	83.82	2.51	95.16	0.28

- Para la enzima BSAA se puede concluir que el tratamiento P2 es más eficiente, puesto que la actividad final es menor. No obstante, la diferencia entre ambos tratamientos en el caso líquido (5 %) es menos importante que en el sólido (23 %). Puesto que la diferencia de los valores medios de la temperatura entre P2 y P1 (cf. Tabla 1.1) es mayor para el alimento de tipo sólido (10 °C) que para el de tipo líquido (5 °C), este comportamiento es consistente con el hecho (véase [49]) de que esta enzima es sensible a las altas temperaturas.
- En cuanto a la enzima LOX, el tratamiento P1 (600 MPa) es claramente más efectivo que el P2 (360 MPa) en ambos casos, lo que se explica por la alta sensibilidad de esta enzima a las altas presiones (cf. [33]).
- Finalmente, en lo que atañe a la enzima PME, ninguno de los tratamientos es tan eficiente como para las otras dos enzimas. Esta enzima resulta ser bastante resistente a ambos tratamientos, si bien se obtienen mejores resultados con el primero.

A la vista de estos resultados, no se puede presumir que ninguno de los dos tratamientos sea mejor que el otro en un contexto general. De hecho, habrá que diseñar un tratamiento específico para cada tipo de enzima cuyo efecto se desee minimizar.

En la Figura 1.7 se dibuja la actividad enzimática final de la Lipoxigenasa en la muestra de comida para el alimento de tipo sólido y el alimento líquido tras los dos tratamientos propuestos

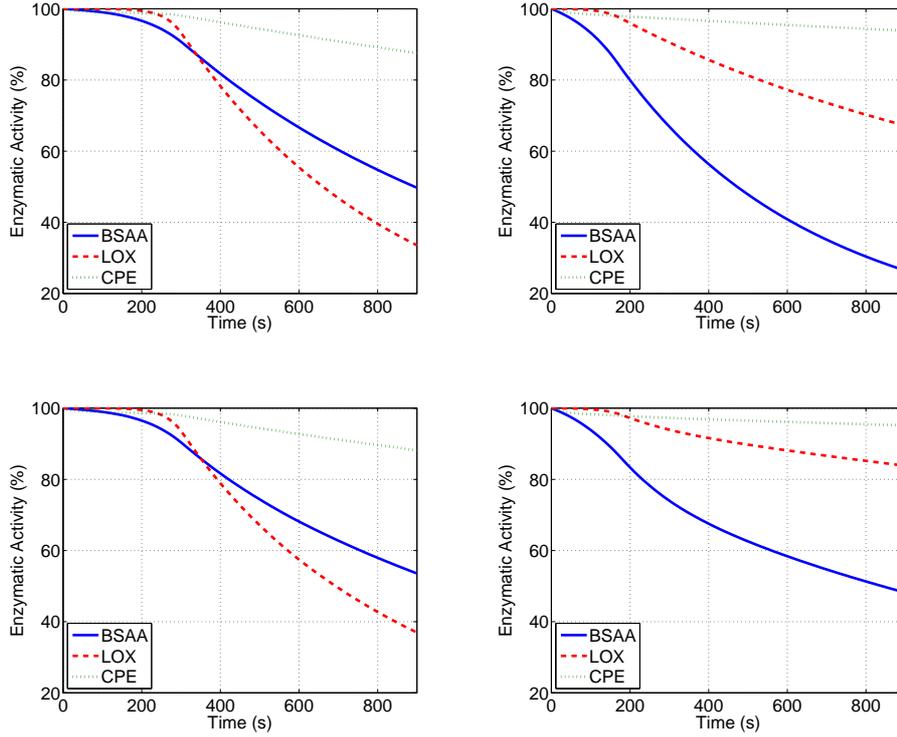


Figura 1.6: Evolución de la actividad enzimática (%) durante los tratamientos P1 (**Izquierda**) y P2 (**Derecha**) para el alimento sólido (**Arriba**) y líquido (**Abajo**).

(los resultados para las otras dos enzimas son cualitativamente similares). Para las tres enzimas consideradas podemos concluir que:

- Cuando el alimento es de tipo sólido aparece una distribución no homogénea de la actividad. Más aún, para estas enzimas, y en los rangos de presión y temperatura considerados, la media temporal de la temperatura (cf. la Figura 1.4) está relacionada con la distribución de la actividad final en el siguiente sentido: cuanto más caliente y con más presión (en media temporal) está una zona, menor es la actividad final en ella. No obstante este comportamiento puede no reproducirse en otras enzimas o en otros rangos de presión y temperatura.
- Para el alimento líquido se observa de nuevo una mayor homogeneidad, en este caso de la actividad enzimática final, debida al fenómeno de transferencia de masa.

1.5.2. Análisis de sensibilidad de la inactivación en los modelos completos

Presentamos resultados sobre los errores en la actividad enzimática final, cuando se utilizan los modelos perturbados generados en el apartado 1.3.2. Concretamente, vamos a calcular la media aritmética de los valores medios de los errores en la actividad final; estos errores están constituidos por la diferencia entre la actividad final del modelo completo y la del correspondiente modelo perturbado. Dicha media se expresa como

$$AEA = \frac{1}{N} \sum_{\text{per}=1}^N \mathcal{M}(|A(\cdot, t_f) - A_{\text{per}}(\cdot, t_f)|; \Omega_F), \quad (1.21)$$

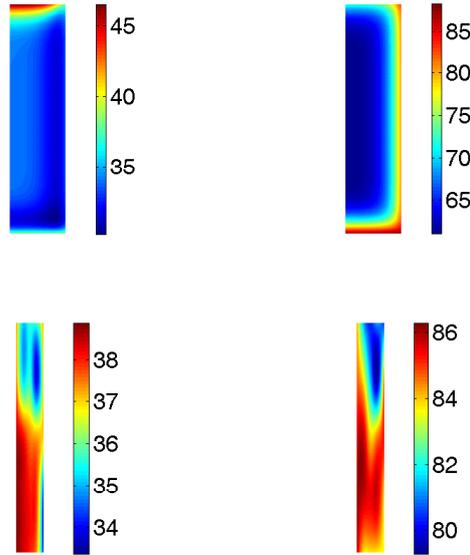


Figura 1.7: Distribución de la actividad final (%) en el instante $t = 15$ min de la enzima LOX en el alimento sólido (**Arriba**) y líquido (**Abajo**) tras los tratamientos P1 (**Izquierda**) y P2 (**Derecha**).

donde hemos denotado por A_{per} la actividad enzimática para los modelos perturbados.

En el apartado 1.3.2 se ha visto que las perturbaciones del orden del 5% introducidas en los parámetros termofísicos generan errores relativos en la temperatura de la muestra de alimento de este mismo orden. Los resultados recogidos en la Tabla 1.3 ponen de manifiesto que dichas perturbaciones provocan errores absolutos en la actividad final de hasta 7.45%. Parece razonable deducir, por tanto, una cierta sensibilidad de la inactivación a los citados errores en la temperatura y a las perturbaciones de la presión. Consecuentemente, cuanto más sensible a estos cambios sea la enzima en cuestión, mayor debe ser la precisión con que se toma la curva de presión y los parámetros termofísicos del modelo.

1.5.3. Estudio comparativo de los modelos simplificados

En este apartado estudiamos el valor de la actividad enzimática A_{sim} de los modelos simplificados descritos en el apartado 1.3.3, tras la aplicación de los tratamientos descritos. Definimos el valor medio de la actividad enzimática final mediante

$$EA = \mathcal{M}(|A(\cdot, t_f) - A_{\text{sim}}(\cdot, t_f)|; \Omega_F). \quad (1.22)$$

Los resultados que se reflejan en la Tabla 1.4 nos indican que, cuando se aplica el tratamiento P2, los errores son siempre menores que cuando es P1 el tratamiento aplicado. Destaca también el hecho de que los modelos simplificados en el caso líquido, LCC y LB, se ajustan más al modelo completo de lo que lo hace el correspondiente modelo simplificado SCC en el caso sólido. Todo ello es consistente con los diferentes errores en las distribuciones de temperatura recogidos en la Tabla 1.2. No obstante, este estudio comparativo permite asegurar que los modelos simplificados resultan adecuados para calcular la inactivación enzimática, por cuanto proporcionan una información aceptable sobre ella con un menor coste computacional.

Tabla 1.4: Actividad final en los modelos completos y simplificados para las enzimas BSAA, LOX y PME. MA: Valor medio de la actividad en el instante final $t_f = 15$ min, $\mathcal{M}(A(\cdot, t_f); \Omega_F)$ (%); EA: Valor medio del error en la actividad final (%) (véase (1.22)).

Tratamiento	Modelo	BSAA		LOX		PME	
		MA	EA	MA	EA	MA	EA
P1	SFull	49.72	—	33.54	—	87.55	—
P2	SFull	26.43	—	67.18	—	93.86	—
P1	SCC	42.29	7.44	28.35	5.20	86.22	1.33
P2	SCC	25.47	0.96	66.07	1.11	93.76	0.10
P1	LFull	53.57	—	36.95	—	88.17	—
P2	LFull	48.18	—	83.82	—	95.16	—
P1	LCC	50.76	2.81	35.20	1.75	87.77	0.40
P2	LCC	47.77	1.14	83.55	0.65	95.14	0.06
P1	LB	50.56	3.04	34.97	2.00	87.72	0.45
P2	LB	47.75	2.23	83.55	1.31	95.13	0.12

1.6. Conclusiones

Los modelos matemáticos aquí descritos constituyen una útil herramienta para el diseño y optimización de tratamientos que, basados en la combinación de altas presiones y temperaturas moderadas, son de uso común en Tecnología de Alimentos. Se fundamentan en el acoplamiento de la transferencia de masa y calor con la evolución de la actividad enzimática que tienen lugar, ambas, durante el proceso.

El análisis de la sensibilidad de la solución respecto a cambios en los datos termofísicos realizado muestra la robustez del modelo.

Las versiones simplificadas propuestas conducen a distribuciones de temperatura similares a las de las versiones completas. Por esta razón, y teniendo en cuenta su menor coste computacional, los modelos simplificados se revelan como un instrumento de utilidad en los procesos de optimización, en los cuales es preciso calcular la solución de un modelo en un número elevado de ocasiones, para distintos juegos de datos.

Los resultados numéricos obtenidos no permiten asegurar que haya un tratamiento que, de manera general, optimice la inactivación enzimática. Para cada tipo particular de alimento, y cada equipo de altas presiones, proponemos la siguiente metodología:

- (I) Identificar las enzimas cuya actividad es más importante reducir y, para cada una de ellas, elegir la apropiada ecuación cinética que describa la evolución de su actividad en términos de la presión y la temperatura (cf. las Secciones 1.1 y 1.5).
- (II) Elegir un modelo adecuado que describa la distribución de temperatura en el alimento a lo largo del tratamiento y resolverlo numéricamente (véase la Sección 1.2).
- (III) Utilizar la distribución de temperatura calculada en la etapa anterior como dato de la ecuación cinética de la actividad enzimática y resolverla. Con ello se obtendrá el valor de la actividad final tras el tratamiento AP-TM (cf. la Sección 1.4).

- (IV) Aplicar técnicas de optimización (las cuales pueden precisar diversos ensayos numéricos modificando la temperatura inicial, la presión aplicada, etc.) con el objeto de reducir la actividad enzimática sin usar altas temperaturas (cuyos inconvenientes se han comentado a lo largo del capítulo). Esta tarea puede acometerse con la ayuda del *software* disponible como, por ejemplo, *Global Optimization Platform*, desarrollado en el seno del grupo de investigación MOMAT, y que ha sido validado en diferentes problemas modelo (cf. [38] y [39]) y del entorno industrial (véase [7], [36] y [37]). Este recurso puede encontrarse en la dirección electrónica <http://www.mat.ucm.es/momat/software.htm>.

Parte II

Identificación de un coeficiente de intercambio de calor

Introducción

La segunda parte de esta memoria la conforman dos capítulos. En ellos se aborda el estudio del problema inverso consistente en identificar, a partir de mediciones experimentales de la temperatura, el coeficiente de intercambio de calor de un cierto material con el medio exterior, suponiendo que dicho coeficiente depende de la temperatura del material (algunas aplicaciones prácticas en cuya modelización matemática aparece este coeficiente se recogen, por ejemplo, en [20] y [60]). El objetivo último de dicha identificación es poder aproximar las soluciones del modelo para distintos conjuntos de datos, sin necesidad de realizar nuevos experimentos.

El problema físico que pretendemos modelizar es el de la evolución de la temperatura en una muestra homogénea de un material (que, en consonancia con el contexto de la memoria, podemos suponer que se trata de un alimento), inserta en un equipo que puede comprimirla (lo cual hará que aumente su temperatura) y que, además, se está calentando (respectivamente, enfriando) debido al intercambio de calor con un medio exterior que está más caliente (respectivamente, más frío). Para describir la distribución de temperatura dentro de la muestra se suelen utilizar modelos complejos basados en ecuaciones en derivadas parciales (cf. los Capítulos 1 y 4). Estas ecuaciones (*ecuaciones directas*) involucran funciones y parámetros que es necesario conocer con anterioridad para poder calcular la solución. Dichas funciones y parámetros se determinan, habitualmente, bien mediante protocolos basados en la experimentación (como hemos hecho en el Capítulo 1), bien (como se hará en el resto de esta memoria) mediante la resolución de problemas inversos que deben plantearse en un adecuado contexto matemático (véanse, v.g., [14], [16], [17] y [19]). Cuando el objetivo es identificar parámetros, el método de mínimos cuadrados constituye una buena herramienta en la resolución de este tipo de problemas (cf., por ejemplo, [20]). Sin embargo, cuando de lo que se trata es de identificar una función, el problema es mucho más complicado, especialmente si dicha función depende de la solución de la ecuación de estado y los datos experimentales pueden verse afectados por errores de medida.

Por simplicidad, supondremos que la muestra está compuesta de un material homogéneo y que el gradiente de temperaturas en su interior es despreciable. Un acercamiento sencillo a la modelización de este fenómeno está basado en la Ley de Enfriamiento de Newton y en la ley (1.6) analizada en el Capítulo 1; se formula matemáticamente mediante el siguiente problema de valor inicial (*problema directo*):

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt}(t) = H(T(t), P(t))(T^e - T(t)) + \alpha P'(t)T(t), & t \geq t_0 \\ T(t_0) = T_0, \end{cases} \quad (\text{P})$$

donde $T(t)$ es la temperatura de la muestra en el instante de tiempo t ; $P(t)$ representa la presión (conocida) ejercida por el equipo en el instante de tiempo t ; T^e denota la temperatura del medio exterior y T_0 la temperatura del proceso en el instante inicial t_0 ; el coeficiente $\alpha \geq 0$ involucra la dilatación, la densidad y el calor específico; finalmente, H representa el coeficiente de intercambio

de calor con el medio exterior, y es la función (que suponemos dependiente de la temperatura, de la presión o de ambas) que se pretende identificar.

El problema (P) modeliza la evolución de la temperatura de la muestra considerada a lo largo del tiempo. Para resolver este problema necesitamos conocer los datos que intervienen en el modelo: los valores $T_0, T^e, \alpha \in \mathbb{R}$, la curva de presión P y la función $H : [T_a, T_b] \times [P_{\text{mín}}, P_{\text{máx}}] \rightarrow \mathbb{R}$, donde $[T_a, T_b]$ es un rango de temperaturas adecuado para el problema que estemos considerando y $[P_{\text{mín}}, P_{\text{máx}}]$ el rango de valores que toma la presión.

Desde el punto de vista experimental, los valores de T_0 y T^e pueden obtenerse por medio de simples dispositivos de medición de temperatura (termopares), el coeficiente α lo suponemos conocido para la muestra dada y la presión es la que aporta el equipo. Sin embargo, la función H puede no ser de obtención sencilla. Nuestro objetivo es resolver el *problema inverso* que consiste en identificar la función H asociada a la variación de temperatura y presión de la muestra, a partir de mediciones experimentales; y esto lo hacemos para que, a partir de la H identificada, se pueda aproximar la solución del modelo (P) con otros datos T_0, T^e y P (siempre que se mantengan en los rangos iniciales de temperatura y presión $[T_a, T_b]$ y $[P_{\text{mín}}, P_{\text{máx}}]$, respectivamente) sin necesidad de realizar nuevas mediciones. Las principales dificultades que surgen en esta tarea son:

- La función H que se quiere identificar depende de la temperatura T , que es la solución de la ecuación de estado.
- Las mediciones de temperatura y presión están, en general, afectadas de errores provenientes de las limitaciones de los aparatos de medida.

En ciertos contextos, y bajo ciertas condiciones, se puede suponer que H tiene una forma conocida (por ejemplo, H es constante o es una función en la que tan sólo hace falta identificar uno o varios parámetros reales). Sin embargo, el reto que nos planteamos en nuestro trabajo es conseguir identificar la función H cuando la única información disponible sobre ella es que se trata de una función continua y positiva.

En primer lugar, en el Capítulo 2, abordamos el caso más sencillo de que el coeficiente H dependa sólo de la presión (cuyo perfil recordamos que suponemos conocido), proponiendo un experimento especialmente diseñado para la determinación de tal coeficiente. Ante la eventualidad de que el equipo de presión no sea suficientemente versátil como para llevar a cabo el experimento requerido, proponemos un algoritmo numérico que permite aproximar la solución H del problema inverso, incluso con mayor precisión que el método anterior.

A continuación, en el Capítulo 3, se estudia el caso en el que existe dependencia solamente con respecto a la temperatura, i. e., $H = H(T)$. En tal caso, y con vistas a la identificación, podemos suponer que en el experimento la presión se mantiene constante (no necesitamos cambiar la presión para llevar a cabo la identificación de H), por lo que no intervendrá en nuestro modelo el segundo sumando del lado derecho de la ecuación del problema (P). Tras presentar métodos clásicos de regularización, se adapta a este contexto el algoritmo introducido en el Capítulo 2 y se comparan los resultados obtenidos para diversos ejemplos ilustrativos.

El caso general en el que el coeficiente de transferencia de calor depende, simultáneamente, de la temperatura y la presión, no lo abordamos. Para su tratamiento bastaría realizar sucesivos experimentos para valores fijos de la presión (en concreto, para los valores de una partición del intervalo $[P_{\text{mín}}, P_{\text{máx}}]$, de diámetro suficientemente pequeño), todos ellos con la misma temperatura inicial y exterior. En cada uno de esos valores tendríamos planteado un problema como el que se resuelve en el Capítulo 3.

En esta parte de la memoria desarrollamos, con el rigor matemático necesario, adecuadas estrategias para identificar el coeficiente de transferencia de calor cuando se trata de una función con los tipos de dependencia comentados. También introducimos el citado algoritmo numérico, propuesto en un contexto diferente al considerado en la teoría clásica.

Capítulo 2

Identificación de un coeficiente de intercambio de calor que varía con la presión

Introducción

El presente capítulo lo dedicamos a la identificación del coeficiente de transferencia de calor H del problema (P), bajo la hipótesis adicional de que sólo depende de la presión. Se trata de un problema más sencillo, habida cuenta de que el coeficiente que se pretende determinar no involucra la solución de la ecuación. Para fijar las ideas, el contexto en que nos movemos es el siguiente: Supondremos que el equipo aplica un aumento de presión entre los instantes t_0 y t_f y, a partir de este último, la presión permanece constante. El problema se plantea como

$$\begin{cases} T'(t) = H(P(t))(T^e - T(t)) + \alpha P'(t)T(t), & t \in (t_0, t_f) \\ T(t_0) = T_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $T(t)$ es la temperatura en el instante t , $P(t)$ representa la presión ejercida por el equipo en el tiempo t , T_0 y T^e denotan la temperatura inicial y del medio exterior, respectivamente, $\alpha \geq 0$ es un coeficiente en el que intervienen la dilatación, la densidad y el calor específico, y la función H que se pretende identificar es el coeficiente de intercambio de calor.

Con el objetivo de definir un adecuado marco de trabajo en el que se pueda llevar a cabo esta identificación, supondremos que:

- La temperatura exterior T^e es constante.
- La temperatura inicial T_0 es mayor que la temperatura exterior T^e .
- La presión P es una función conocida, continua, creciente y de clase uno a trozos en el intervalo temporal $[t_0, t_f]$.
- La función H es continua y positiva en el rango de presiones $[P_0, P_f] = [P(t_0), P(t_f)]$.

Las mediciones de la temperatura se suponen tomadas durante un experimento en el que se haya recorrido todo el rango de presiones admisibles en la máquina en la que se esté trabajando, para unas temperaturas T_0 y T^e dadas. En la práctica, por simplicidad, se puede tomar una presión

lineal en el tiempo, de forma que la velocidad con la que aumente la presión sea constante; así se ha hecho en los experimentos numéricos que presentamos.

Diseñaremos estrategias que permitan, a partir de las mediciones de temperaturas que proporcione este experimento (las cuales estarán afectadas por el error inherente a los aparatos de medida), encontrar una aproximación de la función H . Una vez identificado así el coeficiente de transferencia de calor, se podrán aproximar, sin necesidad de realizar nuevos experimentos, las temperaturas correspondientes a otros juegos de datos T_0 , T^e y P .

El capítulo se desarrolla con arreglo a la siguiente estructura:

En la Sección 2.1 se lleva a cabo el análisis cualitativo del problema directo; la Sección 2.2 recoge la descripción de los distintos escenarios en los que se va a tratar el problema inverso, desde el más sencillo, en el que se conoce una función que proporciona, de forma exacta, la temperatura en todo instante de tiempo, al más realista, en el que se sólo se conocen, y con un cierto error, un número finito de mediciones de la temperatura; a continuación, en la Sección 2.3, se presenta un experimento *ad hoc*, especialmente diseñado para la identificación de la función H ; en caso de que tal experimento no pueda realizarse en nuestro equipo, dicha identificación podrá conseguirse mediante un algoritmo como el que se analiza y describe en la Sección 2.4; la Sección 2.5 está dedicada al estudio adimensional del problema, el cual será de utilidad con vistas a minimizar la cantidad de experimentos numéricos necesarios a la hora de comprobar la eficacia del algoritmo; finalmente, los resultados obtenidos en estos experimentos se presentan en la Sección 2.6.

2.1. Análisis cualitativo del problema directo

El teorema que se enuncia y demuestra a continuación resume las propiedades cualitativas que nos interesa destacar del problema directo, como son la existencia y unicidad de solución, así como su acotación (superior e inferior). Previamente, recordamos el conocido Lema de Gronwall, el cual usaremos en la demostración de la unicidad de solución y en la de la dependencia continua.

Lema 2.1.1 (Gronwall) Sean $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^+$ e $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ funciones continuas tales que

$$y(t) \leq f(t) + \int_a^t g(s)y(s) ds, \quad t \in [a, b].$$

Entonces, para todo $t \in [a, b]$, se verifica que

$$y(t) \leq f(t) + \int_a^t f(s)g(s) e^{\int_s^t g(r) dr} ds.$$

DEMOSTRACIÓN. Véase, por ejemplo, [21, Lema 4.4.1, pág. 108]. \square

Teorema 2.1.2 Bajo las hipótesis realizadas de que H es una función continua y positiva en $[P_0, P_f]$, P es continua, creciente y de clase uno a trozos en $[t_0, t_f]$, $T_0 > T^e \geq 0$ y $\alpha \geq 0$, el problema (2.1) tiene una única solución T que es continua y de clase uno a trozos y está dada por

$$\begin{aligned} T(t) = & (T_0 - T^e) e^{\alpha(P(t)-P_0)} e^{-\int_{t_0}^t H(P(s)) ds} \\ & + T^e \left(1 + \int_{t_0}^t \alpha P'(s) e^{\alpha(P(t)-P(s))} e^{-\int_s^t H(P(r)) dr} ds \right), \quad t \in [t_0, t_f]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Además, si denotamos

$$H_m = \min_{s \in [P_0, P_f]} H(s), \quad H_M = \max_{s \in [P_0, P_f]} H(s),$$

se verifican las desigualdades

$$\begin{aligned} & (T_0 - T^e)e^{\alpha(P(t)-P_0)}e^{-H_M(t-t_0)} + T^e \left(1 + \int_{t_0}^t \alpha P'(s)e^{\alpha(P(t)-P(s))}e^{-H_M(t-s)} ds \right) \\ & \leq T(t) \\ & \leq (T_0 - T^e)e^{\alpha(P(t)-P_0)}e^{-H_m(t-t_0)} + T^e \left(1 + \int_{t_0}^t \alpha P'(s)e^{\alpha(P(t)-P(s))}e^{-H_m(t-s)} ds \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

para todo $t \in [t_0, t_f]$. En particular, en este intervalo se tienen las acotaciones inferior y superior

$$(T_0 - T^e)e^{-H_M(t_f-t_0)} + T^e \leq T(t) \leq T_0e^{\alpha(P_f-P_0)}. \quad (2.4)$$

DEMOSTRACIÓN. Puesto que la ecuación del problema (2.1) es lineal no homogénea, mediante el método de variación de las constantes podemos expresar su solución como

$$T(t) = T_0e^{\int_{t_0}^t (\alpha P'(s)-H(P(s))) ds} + T^e \int_{t_0}^t H(P(s))e^{\int_s^t (\alpha P'(r)-H(P(r))) dr} ds.$$

A continuación escribimos

$$\begin{aligned} T(t) &= T_0e^{\alpha(P(t)-P_0)}e^{-\int_{t_0}^t H(P(s)) ds} + T^e \int_{t_0}^t (H(P(s) - \alpha P'(s))e^{\int_s^t (\alpha P'(r)-H(P(r))) dr} ds \\ &\quad + T^e \int_{t_0}^t \alpha P'(s)e^{\int_s^t (\alpha P'(r)-H(P(r))) dr} ds \\ &= T_0e^{\alpha(P(t)-P_0)}e^{-\int_{t_0}^t H(P(s)) ds} + T^e \int_{t_0}^t \frac{d}{ds} \left(e^{\int_s^t (\alpha P'(r)-H(P(r))) dr} \right) ds \\ &\quad + T^e \int_{t_0}^t \alpha P'(s)e^{\alpha(P(t)-P(s))}e^{-\int_s^t H(P(r)) dr} ds \\ &= T_0e^{\alpha(P(t)-P_0)}e^{-\int_{t_0}^t H(P(s)) ds} + T^e \left(1 - e^{\int_{t_0}^t (\alpha P'(r)-H(P(r))) dr} \right) \\ &\quad + T^e \int_{t_0}^t \alpha P'(s)e^{\alpha(P(t)-P(s))}e^{-\int_s^t H(P(r)) dr} ds, \end{aligned}$$

lo cual conduce a la expresión (2.2). La función así definida es, obviamente, continua y de clase uno a trozos (los mismos trozos en que lo sea P).

La unicidad de solución del problema (2.1) se deduce de la lipschitzianidad respecto a T del segundo miembro de la ecuación. Los cálculos son sencillos: si suponemos que existen dos soluciones T_1 y T_2 , tendremos

$$T_i(t) = T_0 + \int_{t_0}^t (H(P(s))(T^e - T_i(s)) + \alpha P'(s)T_i(s)) ds, \quad i = 1, 2.$$

Restando ambas expresiones obtenemos

$$|T_1(t) - T_2(t)| \leq \int_{t_0}^t |\alpha P'(s) - H(P(s))| |T_1(s) - T_2(s)| ds \leq \int_{t_0}^t L |T_1(s) - T_2(s)| ds,$$

siendo L una cota de $|\alpha P'(t) - H(P(t))|$ en $[t_0, t_f]$. La aplicación del Lema de Gronwall (Lema 2.1.1) en $[t_0, t_f]$, con

$$y(t) = |T_1(t) - T_2(t)|, \quad f(t) = 0 \quad \text{y} \quad g(t) = L,$$

lleva a que $T_1 = T_2$.

Finalmente, las desigualdades (2.3) se deducen trivialmente de (2.2). A partir de ellas, la acotación inferior de (2.4) es evidente, mientras que la superior se obtiene a partir de la desigualdad

$$\begin{aligned} T(t) &\leq (T_0 - T^e) e^{\alpha(P_f - P_0)} + T^e \left(1 + \int_{t_0}^t \alpha P'(s) e^{\alpha(P(t) - P(s))} ds \right) \\ &= (T_0 - T^e) e^{\alpha(P_f - P_0)} + T^e \left(1 - \int_{t_0}^t \frac{d}{ds} (e^{\alpha(P(t) - P(s))}) ds \right) \\ &= (T_0 - T^e) e^{\alpha(P_f - P_0)} + T^e (1 - 1 + e^{\alpha(P(t) - P_0)}). \quad \square \end{aligned}$$

Observación 2.1.3 La cota inferior que aparece en (2.4) muestra, en primer lugar, que la temperatura siempre permanece por encima de T^e . Asimismo, indica que el aumento del valor de la temperatura inicial T_0 lleva aparejado un aumento del valor de la cota inferior de la temperatura T correspondiente a dicha temperatura inicial. Por tanto, la temperatura se mantendrá tanto más alejada de T^e cuanto mayor se tome la temperatura inicial. \square

El siguiente resultado muestra la dependencia continua de la solución del problema (2.1) respecto a la función H . Se trata de un hecho relevante, puesto que esto nos asegura que las temperaturas calculadas a partir de una aproximación de H (que, en definitiva, es lo que nosotros encontraremos) están cerca de las reales (cuanto mejor aproximemos H , mejores serán las aproximaciones correspondientes de T).

Teorema 2.1.4 (Dependencia continua respecto a la función H) *Bajo las mismas hipótesis que en el Teorema 2.1.2, sean T la solución del problema (2.1) y \mathcal{T} la solución del problema*

$$\begin{cases} \mathcal{T}'(t) = \mathcal{H}(P(t))(T^e - \mathcal{T}(t)) + \alpha P'(t)\mathcal{T}(t), \quad t \in (t_0, t_f) \\ \mathcal{T}(t_0) = T_0, \end{cases}$$

donde \mathcal{H} es una función continua y positiva en $[P_0, P_f]$ verificando

$$\|H - \mathcal{H}\|_{C([P_0, P_f])} < \varepsilon$$

para algún $\varepsilon > 0$. Si denotamos $P'_M = \max_{s \in [t_0, t_f]} P'(s)$, entonces

$$\|T - \mathcal{T}\|_{C([t_0, t_f])} \leq \varepsilon (T_0 e^{\alpha(P_f - P_0)} - T^e) \frac{e^{(H_M + \alpha P'_M)(t_f - t_0)} - 1}{H_M + \alpha P'_M}.$$

DEMOSTRACIÓN. Consideremos la función $z(t) = T(t) - \mathcal{T}(t)$. Para todo $t \in [t_0, t_f]$ se verifica que

$$\begin{aligned} |z'(t)| &= |H(P(t))(T^e - T(t)) - \mathcal{H}(P(t))(T^e - \mathcal{T}(t)) + \alpha P'(t)(T(t) - \mathcal{T}(t))| \\ &\leq |H(P(t)) - \mathcal{H}(P(t))||T^e - T(t)| + H(P(t))|T(t) - \mathcal{T}(t)| + \alpha P'_M |T(t) - \mathcal{T}(t)| \\ &\leq \varepsilon (T_0 e^{\alpha(P_f - P_0)} - T^e) + (H_M + \alpha P'_M) |z(t)|, \end{aligned}$$

donde hemos usado que para \mathcal{T} se tienen análogas acotaciones a las de T , gracias al Teorema 2.1.2. A partir de la desigualdad anterior se tiene

$$\begin{aligned} |z(t)| &= \left| z(t_0) + \int_{t_0}^t z'(s) ds \right| \leq \int_{t_0}^t |z'(s)| ds \\ &\leq \varepsilon (T_0 e^{\alpha(P_f - P_0)} - T^e) (t - t_0) + \int_{t_0}^t (H_M + \alpha P'_M) |z(s)| ds. \end{aligned}$$

Llamando $C_1 = (T_0 e^{\alpha(P_f - P_0)} - T^e)$ y $C_2 = H_M + \alpha P'_M$, y aplicando el Lema de Gronwall en $[t_0, t_f]$, con

$$y(t) = |z(t)|, \quad f(t) = \varepsilon C_1 (t - t_0) \quad \text{y} \quad g(t) = C_2,$$

se tiene que

$$\begin{aligned} |T(t) - \mathcal{T}(t)| &\leq \varepsilon C_1 (t - t_0) + \int_{t_0}^t \varepsilon C_1 (s - t_0) C_2 e^{\int_s^t C_2 dr} ds \\ &= \varepsilon C_1 \left(t - t_0 + C_2 \int_{t_0}^t (s - t_0) e^{C_2(t-s)} ds \right) \\ &= \varepsilon C_1 \left(t - t_0 + C_2 \left[-(s - t_0) \frac{e^{C_2(t-s)}}{C_2} \Big|_{t_0}^t + \frac{1}{C_2} \int_{t_0}^t e^{C_2(t-s)} ds \right] \right) \\ &= -\varepsilon C_1 \frac{e^{C_2(t-s)}}{C_2} \Big|_{t_0}^t = \varepsilon C_1 \frac{e^{C_2(t-t_0)} - 1}{C_2} \leq \varepsilon C_1 \frac{e^{C_2(t_f-t_0)} - 1}{C_2}, \end{aligned}$$

de donde se sigue el resultado. \square

2.2. Escenarios de planteamiento del problema inverso

Dependiendo del conocimiento que se tenga de la solución T en $[t_0, t_f]$, podemos considerar el problema inverso inmerso en diversos escenarios:

E1) En el caso más favorable (y, en la práctica, irreal) de que se conociera la función T en todo el intervalo $[t_0, t_f]$ (y, por tanto, también su derivada) bajo las hipótesis de que $H \in \mathcal{C}([P_0, P_f])$ y sea positiva, la identificación de H se obtendría de la igualdad

$$H(P(t)) = \frac{T'(t) - \alpha P'(t)T(t)}{T^e - T(t)}$$

gracias al crecimiento de P . Donde éste sea estricto, P es inversible y se puede despejar

$$H(s) = \frac{T'(P^{-1}(s)) - \alpha P'(P^{-1}(s))T(P^{-1}(s))}{T^e - T(P^{-1}(s))}.$$

Si en un intervalo la presión toma el valor constante P_c , el cociente

$$\frac{T'(t) - \alpha P'(t)T(t)}{T^e - T(t)} = \frac{T'(t)}{T^e - T(t)}$$

será una función constante en tal intervalo, por lo que podemos tomar cualquier instante t^* en él para determinar $H(P_c) = \frac{T'(t^*)}{T^e - T(t^*)}$ unívocamente.

- E2) Si existe la posibilidad de evaluar la función T , de forma exacta, en un número finito de instantes arbitrarios de tiempo del intervalo $[t_0, t_f]$, el problema de identificar H en $[P_0, P_f]$ se puede abordar como un problema estándar de derivación aproximada (en concreto, para la evaluación de T' , la cual es desconocida, a diferencia de lo que ocurría en el escenario anterior).
- E3) El siguiente escenario se plantea cuando se supone conocida una función \tilde{T} que representa el valor aproximado de la temperatura en todo instante de tiempo.
- E4) No obstante, la situación habitual en la realidad es que tan sólo se conocen una cantidad discreta de valores \hat{T}_k que aproximan los valores de la función T en los instantes correspondientes.

Para acometer el tratamiento de los tres últimos escenarios, buscaremos un método “estable” de aproximar T' a partir de los datos y, con ello, obtener una cantidad discreta de valores aproximados de H en puntos del intervalo $[P_0, P_f]$. Con tal fin, habrá que asegurarse de que los valores de la temperatura se encuentran suficientemente lejos de T^e ; en otro caso, en los instantes correspondientes, el coeficiente H tendría una influencia insignificante en la ecuación, y sería ilusorio pretender identificarlo para los valores de P correspondientes. La acotación (2.4) da cuenta de la separación respecto a T^e de los valores exactos de la temperatura (es decir, cuando trabajamos en el segundo escenario). Para los dos últimos casos se fijará un cierto “umbral” de la siguiente forma:

- a) En el tercer escenario, dada la función \tilde{T} verificando

$$\left\| T - \tilde{T} \right\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} < \delta,$$

consideraremos el umbral

$$\mu = \tilde{m} - T^e,$$

donde

$$\tilde{m} = \min_{t \in [t_0, t_f]} \tilde{T}(t). \quad (2.5)$$

Supondremos siempre que $\mu > \delta$. En caso de que $\mu \leq \delta$ necesitaríamos realizar un experimento que partiera de un valor más alto de la temperatura inicial T_0 , con vistas a obtener una temperatura aproximada mayor, según lo comentado en la Observación 2.1.3.

b) En el cuarto escenario, estamos suponiendo que tenemos a nuestra disposición una serie de mediciones \widehat{T}_k de forma que $|T(\tau_k) - \widehat{T}_k| < \widehat{\delta}$, con $\widehat{\delta} > 0$, donde $\{\tau_0 = t_0, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_p = t_f\}$ es una secuencia de instantes de tiempo. Vamos a denotar por \widetilde{T} a una función que interpole los valores $\{\widehat{T}_0, \widehat{T}_1, \dots, \widehat{T}_p\}$ en los puntos $\{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_p\}$ y a considerar $\delta > 0$, una cota de la norma de la diferencia entre T y \widetilde{T} en el intervalo $[t_0, t_f]$, esto es,

$$\|T - \widetilde{T}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} < \delta.$$

Es decir, δ (que será mayor o igual que $\widehat{\delta}$) mide el error que se comete al aproximar la temperatura T por una función que interpola valores que son, a su vez, aproximaciones de los valores que toma T en los instantes τ_k . El umbral μ se define a partir de esta función \widetilde{T} como en el escenario anterior.

2.3. Identificación a partir de un experimento diseñado *ad hoc*

En esta sección se presenta un método que servirá para identificar la función H en el supuesto de que sea factible realizar un experimento diseñado *ad hoc* y que pasamos a describir.

Supondremos que se van a realizar mediciones de la temperatura en una cantidad par de instantes $\{t_k\}_{k=0}^n$, los cuales forman una partición equiespaciada de $[t_0, t_f]$ de paso h . Se elige la presión aplicada por el equipo como una función continua que aumente linealmente, con la misma pendiente, en los intervalos

$$[t_{2k-1}, t_{2k}], \quad k = 1, 2, \dots, \frac{n-1}{2}$$

y que permanezca constante en el resto de intervalos

$$[t_{2k}, t_{2k+1}], \quad k = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$$

(véase la Figura 2.1). En el supuesto de que este especial aumento de presión sea admisible en el equipo con el que se esté trabajando, se tendrá que

$$P(t_{2k}) = P(t_{2k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$$

y, por tanto, los valores $\{P(t_{2k})\}_{k=0}^{\frac{n-1}{2}}$ constituirán una partición del rango de presiones $[P_0, P_f]$.

Si denotamos las mediciones de la temperatura $\{\widehat{T}_k\}_{k=0}^n$, podemos encontrar las aproximaciones

$$\widetilde{H}_k \simeq H(P(t_{2k})), \quad k = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$$

utilizando la siguiente metodología: para cada $k \in \{0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}\}$ consideramos el intervalo $[t_{2k}, t_{2k+1}]$. En este intervalo la presión es constante, por lo que la solución del problema (2.1) verifica

$$T'(t) = H(P(t_{2k}))(T^e - T(t)), \quad t \in (t_{2k}, t_{2k+1})$$

y, por tanto,

$$T(t) = T^e + (T(t_{2k}) - T^e)e^{-H(P(t_{2k}))(t-t_{2k})}, \quad t \in [t_{2k}, t_{2k+1}].$$

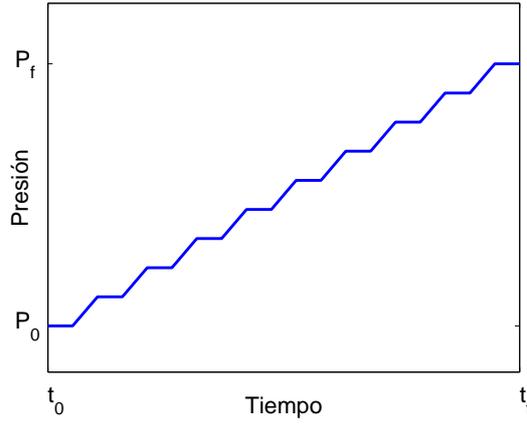


Figura 2.1: Diseño de la curva de presión para el experimento *ad hoc*.

En particular, haciendo $t = t_{2k+1}$, se obtiene

$$H(P(t_{2k})) = \frac{1}{t_{2k+1} - t_{2k}} \ln \left(\frac{T(t_{2k}) - T^e}{T(t_{2k+1}) - T^e} \right) = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{T(t_{2k}) - T^e}{T(t_{2k+1}) - T^e} \right). \quad (2.6)$$

Esto sugiere tomar como aproximación del valor de H en $P(t_{2k})$ la cantidad

$$\tilde{H}_k = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\hat{T}_{2k} - T^e}{\hat{T}_{2k+1} - T^e} \right). \quad (2.7)$$

Introduciendo la notación $T_k = T(t_k)$ y $\sigma_k = \frac{\hat{T}_k - T_k}{T_k - T^e}$, se tiene el siguiente resultado:

Proposición 2.3.1 *El error que se comete al aproximar los valores de H mediante (2.7) viene dado por*

$$\tilde{H}_k - H(P(t_{2k})) = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{1 + \sigma_{2k}}{1 + \sigma_{2k+1}} \right)$$

para $k = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$.

DEMOSTRACIÓN. Teniendo en cuenta la definición de σ_k , escribimos

$$\hat{T}_k - T^e = (1 + \sigma_k)(T_k - T^e) \quad (2.8)$$

para $k = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$. A partir de aquí, basta restar las ecuaciones (2.7) y (2.6) para obtener

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}_k - H(P(t_{2k})) &= \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\hat{T}_{2k} - T^e}{\hat{T}_{2k+1} - T^e} \right) - \frac{1}{h} \ln \left(\frac{T_{2k} - T^e}{T_{2k+1} - T^e} \right) \\
 &= \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\hat{T}_{2k} - T^e}{\hat{T}_{2k+1} - T^e} \frac{T_{2k+1} - T^e}{T_{2k} - T^e} \right) \\
 &= \frac{1}{h} \ln \left(\frac{(1 + \sigma_{2k})(T_{2k} - T^e)}{(1 + \sigma_{2k+1})(T_{2k+1} - T^e)} \frac{T_{2k+1} - T^e}{T_{2k} - T^e} \right) \\
 &= \frac{1}{h} \ln \left(\frac{1 + \sigma_{2k}}{1 + \sigma_{2k+1}} \right). \quad \square
 \end{aligned}$$

Observación 2.3.2 Nótese que si, como en el segundo de los escenarios planteados, las mediciones de la temperatura son exactas (y, en consecuencia, todos los σ_k son nulos) entonces este método proporciona los valores exactos de H . \square

Observación 2.3.3 De la proposición anterior también se deduce que el error cometido cuando se aproxima la función H mediante este método sólo depende del tamaño de los errores relativos entre las mediciones de temperatura (menos T^e) y la temperatura (menos T^e) (véase (2.8)). Como dicho tamaño es característico del equipo de medida, se tiene el poco usual hecho de que el error cometido en la aproximación de la función H es independiente de dicha función. Este hecho queda reflejado en las Figuras 2.3 a 2.10 de la Sección 2.6, en las que puede observarse el mismo valor del error, para cada perturbación, en los cuatro ejemplos de función H . \square

2.4. Un algoritmo numérico para la identificación

Puede ocurrir que el equipo compresor con el que se esté trabajando no permita realizar un experimento como el descrito en la Sección 2.3 o que sólo permita hacerlo con un paso temporal demasiado grande, lo cual conduciría a la identificación en una cantidad muy pequeña de valores de la presión. Ante la eventualidad de esta situación, se describen en esta sección distintas estrategias para identificar nuestro coeficiente H en función del escenario en que nos encontremos inmersos. En primer lugar se aborda el caso más sencillo, en que se conocen valores exactos de la temperatura, mediante el uso de un operador de derivación aproximada de segundo orden. Este operador nos llevará a definir un algoritmo iterativo que utilizaremos en los escenarios más complejos, en los que se considera el posible error en las mediciones.

2.4.1. Identificación a partir de una cantidad finita de valores exactos de la temperatura

Supondremos en este escenario que se conocen $n \in \mathbb{N}$ valores de la temperatura T que corresponden a instantes de tiempo $t_k = t_0 + kh$ para $k = 0, 1, \dots, n$, siendo $h = \frac{t_f - t_0}{n}$ el tiempo transcurrido entre dos cualesquiera de esos instantes. Denotaremos

$$T_k = T(t_k) \text{ y } P_k = P(t_k), \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Puesto que a partir de la ecuación diferencial del problema (2.1) se obtiene

$$H(P(t)) = \frac{T'(t) - \alpha P'(t)T(t)}{T^e - T(t)}, \quad t_0 < t < t_f, \quad (2.9)$$

el objetivo es encontrar, para cada $k = 0, 1, \dots, n$, una aproximación \tilde{H}_k del cociente

$$\frac{T'(t_k) - \alpha P'(t_k)T_k}{T^e - T_k}$$

o, lo que es lo mismo, de $H(P_k)$. Con este fin, consideramos el operador de diferenciación aproximada

$$R_h : \mathcal{C}([t_0, t_f]) \rightarrow \mathcal{C}([t_0, t_f])$$

dado por

$$R_h(v)(t) = \begin{cases} \frac{-3v(t) + 4v(t+h) - v(t+2h)}{2h} + \Psi_h(v)(t_0), & t \in [t_0, t_0+h] \\ \frac{v(t+h) - v(t-h)}{2h}, & t \in [t_0+h, t_f-h] \\ \frac{3v(t) - 4v(t-h) + v(t-2h)}{2h} + \Psi_h(v)(t_f-3h), & t \in [t_f-h, t_f], \end{cases}$$

donde

$$\Psi_h(v)(t) = \frac{v(t+3h) - 3v(t+2h) + 3v(t+h) - v(t)}{2h}.$$

Observación 2.4.1 Este término $\Psi_h(v)$ que aparece en el primer y último intervalos de definición de $R_h(v)$ se introduce para que la imagen por R_h de una función continua sea una función continua. Este operador de derivación aproximada proporciona una cota del error ligeramente peor que la que proporciona el operador habitual de orden 2 (que prescinde del término $\Psi_h(v)$ y con el que también se podría haber desarrollado esta parte). Sin embargo, esta definición de R_h permite considerarlo como un operador del espacio de Banach de las funciones continuas con la norma del supremo, en sí mismo; esto servirá para establecer la analogía con los métodos clásicos que se presentan en la Sección 3.3. \square

Este operador es de orden dos, como se demuestra en el siguiente resultado:

Lema 2.4.2 Si $v \in \mathcal{C}^3([t_0, t_f])$ entonces

$$\|v' - R_h(v)\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} \leq \frac{29}{6}h^2 \|v'''\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])}.$$

DEMOSTRACIÓN. Para cada $t \in [t_0+h, t_f-h]$, $R_h(v)(t)$ proporciona la aproximación estándar de $v'(t)$

$$|v'(t) - R_h(v)(t)| \leq \frac{h^2}{6} \|v'''\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])}. \quad (2.10)$$

Por otra parte, para $t \in [t_0, t_f-3h]$, mediante desarrollos de Taylor, se tiene

$$v(t+3h) - 3v(t+2h) + 3v(t+h) - v(t) = \frac{h^3}{2} \left(9v'''(\zeta_3) - 8v'''(\zeta_2) + v'''(\zeta_1) \right)$$

para algunos $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3 \in (t_0, t_f - 3h)$ y, por tanto,

$$|\Psi_h(v)(t)| \leq \frac{9}{2}h^2 \|v'''\|_{C([t_0, t_f])}, t \in [t_0, t_f - 3h].$$

Ahora, para $t \in [t_0, t_0 + h]$ es fácil demostrar que

$$\begin{aligned} |v'(t) - R_h(v)(t)| &\leq \left| v'(t) - \frac{-3v(t) + 4v(t+h) - v(t+2h)}{2h} \right| + |\Psi_h(v)(t_0)| \\ &\leq \frac{h^2}{3} \|v'''\|_{C([t_0, t_f])} + \frac{9}{2}h^2 \|v'''\|_{C([t_0, t_f])} = \frac{29}{6}h^2 \|v'''\|_{C([t_0, t_f])}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

De manera análoga, para $t \in [t_f - h, t_f]$ se tiene que

$$\begin{aligned} |v'(t) - R_h(v)(t)| &\leq \left| v'(t) - \frac{3v(t) - 4v(t-h) + v(t-2h)}{2h} \right| + |\Psi_h(v)(t_f - 3h)| \\ &\leq \frac{h^2}{3} \|v'''\|_{C([t_0, t_f])} + \frac{9}{2}h^2 \|v'''\|_{C([t_0, t_f])} = \frac{29}{6}h^2 \|v'''\|_{C([t_0, t_f])}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

El resultado se obtiene a partir de las desigualdades (2.10), (2.11) y (2.12). \square

La relación (2.9) sugiere tomar las aproximaciones de los valores $H(P_k)$ como

$$\tilde{H}_k = \frac{R_h(T)(t_k) - \alpha P'(t_k)T_k}{T^e - T_k},$$

para $k = 0, 1, \dots, n$. Si se hace así, se verifica la siguiente acotación del error:

Proposición 2.4.3 Si $T \in C^3([t_0, t_f])$ entonces

$$\max_{k=0,1,\dots,n} |H(P_k) - \tilde{H}_k| \leq \frac{29M_3}{6(m - T^e)} h^2, \quad (2.13)$$

siendo $M_3 = \|T'''\|_{C([t_0, t_f])}$ y $m = \min_{k=0,1,\dots,n} T_k$.

DEMOSTRACIÓN. Basta aplicar el Lema 2.4.2, teniendo en cuenta que

$$|T^e - T_k| = T_k - T^e \geq m - T^e. \quad \square$$

Observación 2.4.4 Gracias a la acotación (2.4) sabemos que $m > T^e$, por lo que la cota anterior no explota. \square

Observación 2.4.5 Nótese que la estimación del error para H resulta ser del orden que tenga el método de derivación aproximada utilizado. Por tanto, si se usara un método de derivación aproximado de un orden superior, se obtendrían mejores estimaciones. \square

2.4.2. Identificación a partir de una función que aproxime la temperatura

En este contexto, supondremos conocida una función $\tilde{T} \in \mathcal{C}([t_0, t_f])$ que aproxime T en el sentido de que

$$\|T - \tilde{T}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} < \delta \quad (2.14)$$

para $0 < \delta < \mu = \tilde{m} - T^e$, donde \tilde{m} viene dado en (2.5) y suponemos que se han tenido en cuenta las consideraciones sobre la temperatura inicial realizadas al describir el tercer escenario.

Utilizando nuevamente la expresión (2.9), definimos la función

$$u(t) = \frac{T'(t) - \alpha P'(t)T(t)}{T^e - T(t)}, \quad t_0 < t < t_f$$

y, basándonos en ella, la aproximación

$$\tilde{u}_h(t) = \frac{R_h(\tilde{T})(t) - \alpha P'(t)\tilde{T}(t)}{T^e - \tilde{T}(t)}, \quad t_0 < t < t_f.$$

Veamos una estimación del error que se comete en dicha aproximación:

Proposición 2.4.6 Si $T \in \mathcal{C}^3([t_0, t_f])$ y $\tilde{T} \in \mathcal{C}([t_0, t_f])$ verifica (2.14) con $0 < \delta < \mu$, entonces

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} \leq \frac{1}{\mu - \delta} \left(\frac{29M_3}{6} h^2 + \frac{4\delta}{\mu h} (\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu) \right) + \frac{\alpha P'_M T^e \delta}{\mu(\mu - \delta)}, \quad (2.15)$$

donde

$$\tilde{m} = \min_{t \in [t_0, t_f]} \tilde{T}(t), \quad \tilde{M} = \max_{t \in [t_0, t_f]} \tilde{T}(t) \quad \text{y} \quad P'_M = \max_{s \in [t_0, t_f]} P'(s).$$

DEMOSTRACIÓN. Antes de comenzar la cadena de desigualdades, destacamos que

$$\begin{cases} |T^e - \tilde{T}(t)| = \tilde{T}(t) - T^e \geq \tilde{m} - T^e = \mu \\ |T^e - T(t)| = T(t) - T^e \geq \tilde{T}(t) - \delta - T^e \geq \mu - \delta. \end{cases}$$

A continuación, pensando en aplicar la desigualdad triangular, para cada $t \in [t_0, t_f]$ escribimos

$$|u(t) - \tilde{u}_h(t)| \leq \left| \frac{T'(t)}{T^e - T(t)} - \frac{R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| + \alpha P'_M \left| \frac{T(t)}{T^e - T(t)} - \frac{\tilde{T}(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right|. \quad (2.16)$$

1) Para acotar el primer sumando del segundo miembro de (2.16), escribimos

$$\begin{aligned} \left| \frac{T'(t)}{T^e - T(t)} - \frac{R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| &\leq \left| \frac{T'(t) - R_h(T)(t)}{T^e - T(t)} \right| + \left| \frac{R_h(T)(t)}{T^e - T(t)} - \frac{R_h(T)(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| \\ &\quad + \left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| \\ &= \left| \frac{T'(t) - R_h(T)(t)}{T^e - T(t)} \right| + |R_h(T)(t)| \left| \frac{T(t) - \tilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \tilde{T}(t))} \right| \\ &\quad + \left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right|. \end{aligned}$$

De estos tres sumandos, el primero puede acotarse, aplicando el Lema 2.4.2, por

$$\frac{29h^2}{6|T^e - T(t)|} \|T'''\|_{C([t_0, t_f])} \leq \frac{29M_3}{6(\mu - \delta)} h^2.$$

Para los otros dos sumandos distinguimos tres casos, en función de la definición del operador R_h :

a) Si $t \in [t_0 + h, t_f - h]$, puesto que

$$|R_h(T)(t)| \leq \frac{T(t_f) - T_0}{2h} \leq \frac{(\widetilde{M} + \delta) - (\widetilde{m} - \delta)}{2h} = \frac{\widetilde{M} - \widetilde{m} + 2\delta}{2h},$$

entonces

$$\left| R_h(T)(t) \frac{T(t) - \widetilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \widetilde{T}(t))} \right| \leq \frac{\widetilde{M} - \widetilde{m} + 2\delta}{2h} \frac{\delta}{\mu(\mu - \delta)}.$$

Para el tercer sumando, usando que

$$\left| R_h(T)(t) - R_h(\widetilde{T})(t) \right| \leq \frac{1}{2h} \left(|T(t+h) - \widetilde{T}(t+h)| + |T(t-h) - \widetilde{T}(t-h)| \right) \leq \frac{\delta}{h},$$

se llega a

$$\left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\widetilde{T})(t)}{T^e - \widetilde{T}(t)} \right| \leq \frac{\delta}{\mu h}.$$

b) Para $t \in [t_0, t_0 + h]$ se tiene que

$$\begin{aligned} |R_h(T)(t)| &\leq \left| \frac{-3T(t) + 4T(t+h) - T(t+2h)}{2h} \right| + |\Psi_h(T)(t_0)| \\ &\leq \frac{4((\widetilde{M} + \delta) - (\widetilde{m} - \delta))}{2h} + \frac{4((\widetilde{M} + \delta) - (\widetilde{m} - \delta))}{2h} \\ &= \frac{4(\widetilde{M} - \widetilde{m} + 2\delta)}{h} \end{aligned}$$

y, por tanto,

$$\left| R_h(T)(t) \frac{T(t) - \widetilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \widetilde{T}(t))} \right| \leq \frac{4(\widetilde{M} - \widetilde{m} + 2\delta)}{h} \frac{\delta}{\mu(\mu - \delta)}.$$

El tercer sumando puede ser mayorado usando

$$\begin{aligned} \left| R_h(T)(t) - R_h(\widetilde{T})(t) \right| &\leq \frac{3|T(t) - \widetilde{T}(t)|}{2h} + \frac{4|T(t+h) - \widetilde{T}(t+h)|}{2h} \\ &\quad + \frac{|T(t+2h) - \widetilde{T}(t+2h)|}{2h} + |\Psi_h(T)(t_0) - \Psi_h(\widetilde{T})(t_0)| \\ &\leq \frac{8\delta}{h}, \end{aligned}$$

para deducir

$$\left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\widetilde{T})(t)}{T^e - \widetilde{T}(t)} \right| \leq \frac{8\delta}{\mu h}.$$

c) En el intervalo $[t_f - h, t_f]$ se obtienen las mismas cotas que en $[t_0, t_0 + h]$.

Con estas tres acotaciones se obtiene

$$\begin{aligned} \left| \frac{T'(t)}{T^e - T(t)} - \frac{R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| &\leq \frac{29M_3}{6(\mu - \delta)} h^2 + \frac{4(\tilde{M} - \tilde{m} + 2\delta)}{h} \frac{\delta}{\mu(\mu - \delta)} + \frac{8\delta}{\mu h} \\ &= \frac{1}{\mu - \delta} \left(\frac{29M_3}{6} h^2 + \frac{4\delta}{\mu h} (\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu) \right). \end{aligned}$$

ii) La sencilla acotación del segundo sumando del término derecho de (2.16)

$$\alpha P'_M \left| \frac{T(t)}{T^e - T(t)} - \frac{\tilde{T}(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| = \alpha P'_M \left| \frac{T^e(T(t) - \tilde{T}(t))}{(T^e - T(t))(T^e - \tilde{T}(t))} \right| \leq \alpha P'_M T^e \frac{\delta}{\mu(\mu - \delta)}$$

conduce a la desigualdad deseada. \square

En la estimación (2.15), el paso de tiempo h aparece multiplicando (elevado al cuadrado) en un sumando y dividiendo en el otro. En consecuencia, la acotación óptima se obtendrá cuando se elija un h que permita balancear ambos sumandos para conseguir el valor mínimo. El siguiente resultado indica cómo elegir tal valor de h y cuánto vale la cota correspondiente:

Proposición 2.4.7 Si $T \in C^3([t_0, t_f])$ y $\tilde{T} \in C([t_0, t_f])$ verifica (2.14) con $0 < \delta < \mu$, entonces el menor valor de la cota en la estimación (2.15) se obtiene cuando se toma como paso temporal

$$h^* = \left(\frac{12(\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu)}{29\mu M_3} \delta \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.17)$$

Para este valor óptimo del paso de tiempo se tiene que

$$\|u - \tilde{u}_{h^*}\|_{C([t_0, t_f])} \leq \frac{1}{\mu - \delta} \left(522M_3 \frac{(\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu)^2}{\mu^2} \delta^2 \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{\alpha P'_M T^e}{\mu(\mu - \delta)} \delta.$$

DEMOSTRACIÓN. Obviamente, el mínimo de la función

$$g(x) = c \left(ax^2 + \frac{b}{x} \right) + d, \quad x > 0$$

con $a, b, c, d > 0$, se alcanza en

$$x_{\min} = \left(\frac{b}{2a} \right)^{\frac{1}{3}}$$

y el valor mínimo es

$$g(x_{\min}) = \frac{3}{2}c (2ab^2)^{\frac{1}{3}} + d.$$

El resultado se sigue sin más que tomar

$$a = \frac{29M_3}{6}, \quad b = \frac{4\delta}{\mu} (\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu), \quad c = \frac{1}{\mu - \delta} \quad \text{y} \quad d = \frac{\alpha P'_M T^e}{\mu(\mu - \delta)} \delta. \quad \square$$

Observación 2.4.8 El valor h^* dado en (2.17) es el que proporciona la mejor acotación (es decir, la más pequeña) en la estimación (2.15). Sin embargo, puede ocurrir que para algún $h \neq h^*$ se tenga que

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{C([t_0, t_f])} \leq \|u - \tilde{u}_{h^*}\|_{C([t_0, t_f])}. \quad \square$$

Mediante la Proposición 2.4.7, tomando como paso de tiempo el valor óptimo h^* dado por (2.17), considerando como n la parte entera¹ de $\frac{t_f - t_0}{h^*}$, denotando $t_k = t_0 + kh^*$ y $\tilde{T}_k = \tilde{T}(t_k)$, y tomando como aproximaciones de $H(P_k)$ los valores

$$\tilde{H}_k = \tilde{u}_{h^*}(t_k) = \frac{R_{h^*}(\tilde{T})(t_k) - \alpha P'(t_k) \tilde{T}_k}{T^e - \tilde{T}_k}, \quad (2.18)$$

para $k = 0, 1, \dots, n$, se puede obtener el resultado fundamental de esta sección, que es el siguiente:

Teorema 2.4.9 *Bajo las hipótesis de la Proposición 2.4.7, y considerando \tilde{H}_k , $k = 0, 1, \dots, n$, dados por (2.18), se verifica que*

$$\max_{k=0,1,\dots,n} |H(P_k) - \tilde{H}_k| \leq \frac{1}{\mu - \delta} \left(522M_3 \frac{(\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu)^2}{\mu^2} \delta^2 \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{\alpha P'_M T^e}{\mu(\mu - \delta)} \delta. \quad (2.19)$$

DEMOSTRACIÓN. Basta tener en cuenta que

$$|H(P_k) - \tilde{H}_k| = |u(t_k) - \tilde{u}_{h^*}(t_k)|$$

para $k = 0, 1, \dots, n$ y aplicar la Proposición 2.4.7. \square

Observación 2.4.10 El orden de error en la estimación anterior es $\delta^{\frac{2}{3}}$. \square

Observación 2.4.11 El Teorema 2.4.9 proporciona una cota del error que se comete cuando se aproxima H tomando como paso temporal el óptimo h^* . El problema es que tal valor es desconocido, pues depende de M_3 , la norma infinito de la derivada tercera de la solución T . En el siguiente apartado introducimos un algoritmo iterativo mediante el que, a partir de unas mediciones de temperatura, se calculan los valores dados en (2.18) para sucesivas aproximaciones de h^* . \square

2.4.3. Identificación a partir de una cantidad finita de valores aproximados de la temperatura

La situación de partida ahora es la de que disponemos de mediciones $\{\hat{T}_0, \hat{T}_1, \dots, \hat{T}_p\}$ correspondientes a los instantes de tiempo $\{\tau_0 = t_0, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_p = t_f\}$ y suponemos que el error cometido en ellas es de orden $\hat{\delta}$. Consideramos una función \tilde{T} que interpola los valores anteriores y suponemos que el método de interpolación utilizado es tal que el error δ entre T y \tilde{T} es del orden del error de medición $\hat{\delta}$, es decir,

$$\delta = C\hat{\delta}.$$

Para ello, eventualmente, será necesario aumentar el número de mediciones.

¹Nótese que, en general, t_n será menor que t_f .

Una vez construida de esta forma la función \tilde{T} nos encontramos en la situación del apartado anterior, por lo que basta considerar el umbral $\mu = \tilde{m} - T^e$, tomar como paso temporal h el dado por (2.17), como n la parte entera de $\frac{t_f - t_0}{h}$ y como $\tilde{T}_k = \tilde{T}(t_k)$, siendo $t_k = t_0 + kh$ para $k = 0, 1, \dots, n$. Con todo ello, las cantidades \tilde{H}_k dadas en (2.18) proporcionan una aproximación de H y se tiene, gracias al Teorema 2.4.9, una cota del error cometido.

En lo que resta de sección vamos a describir un algoritmo para aproximar los valores de H en ciertos puntos P_k del intervalo $[P_0, P_f]$, correspondientes a instantes de tiempo t_k de particiones equiespaciadas de $[t_0, t_f]$. El paso de estas particiones se definirá, de forma iterativa, aproximando el valor de h^* .

Algoritmo para la determinación de la función H

Suponemos conocidas las mediciones aproximadas de temperatura $\{\hat{T}_k\}_{k=0}^p$ y una cota del error de medición $\hat{\delta} > 0$. El algoritmo que se propone comienza con la construcción de la función \tilde{T} que interpola los valores $\{\hat{T}_k\}_{k=0}^p$, tras lo que se determinará una cota $\delta > 0$ del error cometido en dicha interpolación. A continuación se construye el umbral admisible $\mu = \tilde{m} - T^e$ sujeto a la restricción $\mu > \delta$.

El algoritmo se basa en un proceso iterativo en el que se parte de un valor inicial tentativo h del paso óptimo. Con este valor de h se definen los instantes $t_k = t_0 + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$ siendo n la parte entera de $\frac{t_f - t_0}{h}$, y se obtienen los valores $\tilde{T}_k = \tilde{T}(t_k)$.

A continuación, se calcula Λ_3 , aproximación de la norma infinito de la derivada tercera de la temperatura, como el máximo, en valor absoluto, de las cantidades

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{-5\tilde{T}_k + 18\tilde{T}_{k+1} - 24\tilde{T}_{k+2} + 14\tilde{T}_{k+3} - 3\tilde{T}_{k+4}}{2h^3}, & k = 0, 1 \\ \frac{\tilde{T}_{k+2} - 2\tilde{T}_{k+1} + 2\tilde{T}_{k-1} - \tilde{T}_{k-2}}{2h^3}, & k = 2, 3, \dots, n-2 \\ \frac{3\tilde{T}_{k-4} - 14\tilde{T}_{k-3} + 24\tilde{T}_{k-2} - 18\tilde{T}_{k-1} + 5\tilde{T}_k}{2h^3}, & k = n-1, n. \end{array} \right. \quad (2.20)$$

Estas fórmulas están basadas en las aproximaciones progresiva, central y regresiva, respectivamente, de orden 2 de la derivada tercera de una función regular.

A partir de Λ_3 se calcula un nuevo valor del paso temporal mediante la expresión

$$h = \left(\frac{12(\tilde{M} - \tilde{m} + 2\mu)}{29\mu\Lambda_3} \delta \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.21)$$

con el cual se podrá repetir la iteración.

El proceso iterativo se detendrá cuando el paso en el tiempo h se estabilice. Con dicho valor de h de salida de la iteración, se calculan los nuevos instantes t_k , la interpolación de \tilde{T} en ellos y los cocientes

$$\tilde{H}_k = \tilde{u}_h(t_k) = \frac{R_h(\tilde{T})(t_k) - \alpha P'(t_k)\tilde{T}_k}{T^e - \tilde{T}_k}, \quad (2.22)$$

los cuales aproximan los valores de H en las presiones $P_k = P(t_k)$, para $k = 0, 1, \dots, n$.

Algoritmo

- DATOS $\{\widehat{T}_k\}_{k=0}^p$: mediciones de la temperatura.
 $\widehat{\delta} > 0$: cota del error en las mediciones.
 ε : precisión del test de parada.
 h : valor inicial (tentativo) del paso temporal
- Paso 1: Determinar \widetilde{T} y δ en función de $\widehat{\delta}$ de forma que el umbral $\mu = \widetilde{m} - T^e > \delta$.
- Paso 2: Mientras que el error relativo en h sea mayor que la precisión ε :
 a) Determinar la partición $\{t_k\}$ y calcular los valores $\{\widetilde{T}_k\}$.
 b) Calcular el valor de Λ_3 como el máximo en k del valor absoluto de los valores dados por (2.20).
 c) Calcular el nuevo valor de h según la fórmula (2.21).
- Paso 3: Determinar la partición final $\{t_k\}$ y los correspondientes valores $\{\widetilde{T}_k\}$.
- Paso 4: Calcular las aproximaciones $\{\widetilde{H}_k\}$ según la fórmula (2.22).

2.5. Adimensionalización del problema

Antes de realizar los experimentos numéricos con distintos juegos de datos que ilustren el comportamiento de los métodos diseñados, es conveniente hacer un estudio adimensional del problema. La idea es escribir el modelo en función del menor número posible de parámetros adimensionales; tras ello, bastará implementar las diversas pruebas numéricas con valores variados de estos parámetros. En nuestro caso, en lugar de tener que dar valores a todos los datos del problema (t_0, t_f, T_0, T^e, P y α), nos bastará jugar con dos parámetros que serán, como se verá más adelante, la presión y una relación entre la temperatura inicial y la temperatura ambiente.

Para llevar a cabo la transformación adimensional del problema consideraremos las nuevas variables adimensionales

$$t^* = \frac{t - t_0}{t_f - t_0}, \quad T^*(t^*) = \frac{T(t) - T^e}{T_0 - T^e} \quad \text{y} \quad P^*(t^*) = (P(t) - P_0)\alpha.$$

Con objeto de expresar el problema (2.1) en estas nuevas variables tenemos en cuenta que

$$\frac{dT}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \left((T_0 - T^e)T^*(t^*) + T^e \right) = (T_0 - T^e) \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) \frac{dt^*}{dt} = \frac{T_0 - T^e}{t_f - t_0} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*)$$

y

$$\frac{dP}{dt}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{P^*(t^*)}{\alpha} + P_0 \right) = \frac{1}{\alpha(t_f - t_0)} \frac{dP^*}{dt^*}(t^*).$$

Sustituyendo en la ecuación diferencial del problema (2.1), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{T_0 - T^e}{t_f - t_0} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) &= H \left(\frac{P^*(t^*)}{\alpha} + P_0 \right) \left(T^e - (T_0 - T^e)T^*(t^*) - T^e \right) \\ &\quad + \frac{1}{t_f - t_0} \frac{dP^*}{dt^*}(t^*) \left((T_0 - T^e)T^*(t^*) + T^e \right), \end{aligned}$$

de donde

$$\frac{dT^*}{dt^*}(t^*) = -(t_f - t_0)H \left(\frac{P^*(t^*)}{\alpha} + P_0 \right) T^*(t^*) + \frac{dP^*}{dt^*}(t^*) \left(T^*(t^*) + \frac{T^e}{T_0 - T^e} \right).$$

De esta forma, denotando por

$$\begin{cases} H^*(s) = (t_f - t_0)H\left(\frac{s}{\alpha} + P_0\right) & (\Rightarrow H^*(P^*(t^*)) = (t_f - t_0)H(P(t))) \\ T^{ea} = \frac{T^e}{T_0 - T^e}, \end{cases}$$

el problema equivalente adimensionalizado se escribe como

$$\begin{cases} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) = -H^*(P^*(t^*))T^*(t^*) + \frac{dP^*}{dt^*}(t^*)(T^*(t^*) + T^{ea}), & t^* \in (0, 1) \\ T^*(0) = 1. \end{cases} \quad (2.23)$$

Éste será el problema para el que trataremos de identificar el coeficiente H^* . Una vez que se haya obtenido su aproximación, la usaremos para encontrar la distribución de temperaturas correspondiente a distintas funciones P^* (que se mantengan en el rango de la presión P^* original) y distintos valores del parámetro T^{ea} .

Observación 2.5.1 El valor máximo que puede alcanzar la temperatura adimensionalizada viene dado por

$$T_{\max}^* = \frac{T_{\text{ad}} - T^e}{T_0 - T^e},$$

siendo T_{ad} la temperatura máxima que se puede alcanzar en condiciones adiabáticas (i. e., cuando no hay intercambio de calor con el medio externo). Para determinar este valor, basta considerar el problema de valor inicial

$$\begin{cases} T'(t) = \alpha P'(t)T(t), & t \in (t_0, t_f) \\ T(t_0) = T_0, \end{cases} \quad (2.24)$$

cuya solución es

$$T(t) = T_0 e^{\alpha(P(t) - P_0)}, \quad t \in [t_0, t_f].$$

Puesto que la función P es creciente, se tiene que

$$T_{\text{ad}} = T_0 e^{\alpha(P_f - P_0)} = T_0 e^{P^*(1)},$$

lo que permite escribir

$$T_{\max}^* = \frac{T_{\text{ad}} - T^e}{T_0 - T^e} = (1 + T^{ea})e^{P^*(1)} - T^{ea}.$$

Nótese que el valor de T_{ad} no es otro que el de la cota superior obtenida en (2.4). \square

Observación 2.5.2 Una vez identificada la función H^* del problema adimensionalizado (2.23), la expresión

$$H(s) = \frac{1}{t_f - t_0} H^*(\alpha(s - P_0)), \quad s \in [P_0, P_f] \quad (2.25)$$

conduce a la función de partida que se quería identificar. La solución T^* del problema adimensionalizado conduce, deshaciendo el cambio de variable, a la temperatura

$$T(t) = T^e + (T_0 - T^e)T^* \left(\frac{t - t_0}{t_f - t_0} \right), \quad t \in [t_0, t_f],$$

solución del problema de partida. \square

Observación 2.5.3 Si el orden de magnitud de la función H^* en el problema (2.23) es pequeño frente a

$$\frac{dP^*}{dt^*}(t^*) (T^*(t^*) + T^{ea}),$$

puede ocurrir que este término sea muy dominante. Esto implicaría que, prácticamente, cualquier función H^* de ese orden de magnitud proporcionaría las mismas mediciones. Veamos cómo puede modificarse el experimento de partida de forma que el nuevo dé lugar a una función H^* de un orden de magnitud mayor. Si la presión del experimento original es

$$P(t) = a(t - t_0) + P_0, \quad t \in [t_0, t_f],$$

debe considerarse un incremento más suave de presión, durante un tiempo más largo, de forma que se recorra el mismo rango de presiones $[P_0, P_f]$. Es decir, se ha de tomar

$$P_1(t) = ac(t - t_0) + P_0, \quad t \in \left[t_0, t_0 + \frac{t_f - t_0}{c} \right]$$

con $0 < c \leq 1$. Si T_1 es la temperatura que se obtiene con esta curva de presión, los cambios de variable

$$t_1^* = \frac{c(t - t_0)}{t_f - t_0}, \quad T_1^*(t_1^*) = \frac{T_1(t) - T^e}{T_0 - T^e} \quad \text{y} \quad P_1^*(t_1^*) = (P_1(t) - P_0)\alpha$$

conducen a la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{dT_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) &= -\frac{t_f - t_0}{c} H \left(\frac{P_1^*(t_1^*)}{\alpha} + P_0 \right) T_1^*(t_1^*) + \frac{dP_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) \left(T_1^*(t_1^*) + \frac{T^e}{T_0 - T^e} \right) \\ &= -\frac{1}{c} H^*(P_1^*(t_1^*)) T_1^*(t_1^*) + \frac{dP_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) (T_1^*(t_1^*) + T^{ea}), \end{aligned} \quad (2.26)$$

quedando el problema adimensionalizado como

$$\begin{cases} \frac{dT_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) = -\frac{1}{c} H^*(P_1^*(t_1^*)) T_1^*(t_1^*) + \frac{dP_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) (T_1^*(t_1^*) + T^{ea}), & t_1^* \in (0, 1) \\ T_1^*(0) = 1. \end{cases} \quad (2.27)$$

Puesto que

$$\frac{dP_1^*}{dt_1^*}(t_1^*) = \alpha a(t_f - t_0) = \frac{dP^*}{dt^*}(t^*),$$

la ecuación del problema (2.27) es idéntica a la del problema (2.23) salvo en que la función H^* se ha visto amplificada por el factor $\frac{1}{c} \geq 1$. \square

Observación 2.5.4 El problema adimensionalizado se rige por una ecuación distinta de la inicial, y esto habrá que trasladarlo a los métodos que vamos a utilizar:

- a) Para el método que se basa en el experimento *ad hoc* de la Sección 2.3 basta tener en cuenta que, en cada intervalo en que la presión es constante, la temperatura verifica la misma ecuación pero con $T^e = 0$. Por tanto, debemos considerar, en lugar de (2.7), las aproximaciones

$$\tilde{H}_k = \frac{1}{h} \ln \left(\frac{\hat{T}_{2k}}{\hat{T}_{2k+1}} \right).$$

- b) En cuanto al algoritmo iterativo de la Sección 2.4, podemos decir que la expresión (2.21) del paso óptimo h^* y las cantidades (2.20) que se usan para el cálculo de Λ_3 siguen siendo las mismas (cambiando, obviamente, el papel de \tilde{T} por el de la correspondiente \tilde{T}^*), mientras que la aproximación (2.22) de \tilde{H}_k se transforma en

$$\tilde{H}_k = - \frac{R_h(\tilde{T}^*)(t_k^*) - \frac{dP^*}{dt^*}(t_k^*)(\tilde{T}_k^* + T^{ea})}{\tilde{T}_k}. \quad \square$$

2.6. Resultados numéricos

En esta sección vamos a realizar el estudio comparativo de los resultados que se obtienen, en la resolución de distintos ejemplos concretos, cuando se utilizan los dos métodos planteados en este capítulo. Trabajaremos directamente con el problema adimensional aunque, para no recargar la notación, eliminaremos el superíndice * de todas las variables. El valor de T^{ea} y el rango de presiones están ligados a una situación real, aquélla en la que supuestamente se habrían tomado las mediciones experimentales. En concreto, nos basamos en los datos del tratamiento P2 del Capítulo 1 y trabajamos con $T_0 = 313 \text{ °K}$, $T^e = 295 \text{ °K}$ y con un valor del coeficiente α de la ecuación del problema (2.1) de $4.5045 \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$. La elección de la curva de presión se especifica para cada método, aunque en ambos casos su rango va desde la presión atmosférica hasta 360 MPa. Con ello, el valor máximo de la presión adimensionalizada será, también en ambos casos, $a = 0.0162$.

Vamos a mostrar los resultados numéricos obtenidos cuando se trabaja con cuatro tipos de función H , objeto de identificación: una constante, una oscilante, una creciente y una decreciente. Estas funciones se explicitarán en el epígrafe correspondiente a cada método. Cabe destacar que, según muestra la relación (2.25), la función H del experimento *ad hoc* debe ser dos veces la del algoritmo iterativo, si se pretende que ambas se correspondan con la misma función de partida; esto es así porque el experimento del primer método necesita el doble de tiempo de realización que el experimento del segundo.

Los ejemplos de prueba se han generado de la siguiente forma: a partir de una función H dada, se resuelve el problema directo adimensional (2.23), obteniendo la temperatura T . A continuación, se evalúa la función T así obtenida en una partición equiespaciada de instantes de tiempo. Suponemos que en ambos experimentos las mediciones se habrían realizado con la misma cadencia, por lo que trabajaremos con el doble de valores en el primer método que en el segundo (en concreto, tomamos 200 en el experimento *ad hoc* y 100 en el algoritmo iterativo). Las mediciones con error \hat{T}_k se crean a base de perturbar estas evaluaciones T_k mediante oscilaciones aleatorias de un tamaño del orden del 1 % de T_k . De forma precisa,

$$\hat{T}_k = T_k \left(1 + \frac{r(t_k)}{75} \right),$$

donde $r(t) = \text{sen}(q\pi t)$ y q es un entero entre 1 y 99, generado aleatoriamente. La función \tilde{T} se toma como la interpolación lineal a trozos de los valores \hat{T}_k .

En cada uno de los cuatro casos elegidos para la función H se han generado, para posibilitar la comparación, las mismas siete perturbaciones de los valores de la temperatura, las correspondientes a los valores $q = 3, 14, 27, 42, 65, 84$ y 97 . De los siete casos ejecutados, hemos seleccionado en cada ocasión los dos en que se produce, respectivamente, el menor y el mayor error en norma infinito en H .

Una vez identificada H de forma aproximada, se calcula la temperatura que resuelve el problema (2.23) con tal aproximación, y se compara con la solución conocida del problema directo. Asimismo, se prescriben distintos valores a los parámetros del problema adimensional (la curva de presión y T^{ea}) y se calcula, también con dicha aproximación, la solución correspondiente. Ésta es comparada con la temperatura exacta asociada a esos parámetros, con objeto de dar cuenta de la bondad de la identificación realizada. En cada situación mostraremos: la identificación aproximada de la función H , la temperatura calculada a partir de dicha aproximación y los perfiles de temperatura, calculados usando esta identificación, para nueve juegos de valores de los parámetros del problema, siempre junto a las correspondientes soluciones exactas.

Los citados juegos de valores se generan multiplicando por los factores $d = 2$, $d = 1$ y $d = \frac{1}{2}$ el valor de partida de T^{ea} y eligiendo como funciones para la presión (véase la Figura 2.2)

- a) $P(t) = a \operatorname{sen} t$
- b) $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$
- c) $P(t) = \frac{a}{2} t(3 - t)$.

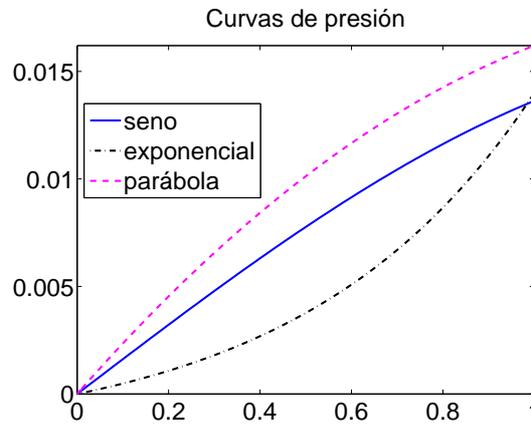


Figura 2.2: Presiones consideradas en las pruebas numéricas realizadas tras la identificación de H .

Sobre los gráficos de H , identificado como “Error”, se muestra el error cometido en norma infinito. Sobre los gráficos de las temperaturas se muestra, con la denominación “% Error”, el error relativo porcentual, es decir, el porcentaje que, de la norma infinito de cada temperatura, supone el error cometido en dicha norma. Dicho de otra forma, si se tienen valores \tilde{T}_k que aproximan T_k para $k = 1, 2, \dots, n$, entendemos por error relativo porcentual la cantidad

$$\frac{\max_k |\tilde{T}_k - T_k|}{\max_k |T_k|} \times 100. \quad (2.28)$$

Primer método: experimento *ad hoc*

Para este método el valor correspondiente al primer parámetro del problema adimensionalizado es $T^{ea} = 295/18$, mientras que la pendiente de la presión (en los tramos en que no es constante) vale $0.0324 (= 2a)$; con esto se consigue que la presión recorra todo el rango de presiones $[0, a]$ en el tiempo $[0, 1]$.

Las funciones H (constante, oscilante, creciente y decreciente) con las que vamos a trabajar son:

$$1) H(s) = 12$$

$$2) H(s) = 3 \left(2 + \operatorname{sen} \left(4\pi \frac{s}{a} \right) \right)$$

$$3) H(s) = 4 e^{\frac{s}{a}}$$

$$4) H(s) = 12 \left(1 + e^{-\frac{s}{a}} \right).$$

Como el intervalo $[0, a]$ (el rango de presiones para el problema adimensionalizado) de nuestros ejemplos es pequeño, para elegir las funciones H hemos partido de funciones “reconocibles” en el intervalo $[0, 1]$, cuya variable hemos dividido entre a , con objeto de dilatar el intervalo y que el dibujo de nuestras funciones en $[0, a]$ sea como el de las de partida en $[0, 1]$.

En el caso de la función H constante, su identificación aproximada y la temperatura obtenida a partir de ella, para el caso en que se produce el menor error, se muestran en la Figura 2.3. Asimismo, en dicha figura se dibujan las temperaturas exactas y las que se obtienen con el coeficiente H identificado y variando los parámetros del problema. De igual forma, en la Figura 2.4 se representan resultados análogos para la perturbación que proporciona el mayor error en H .

Para el segundo caso de la función H oscilante, los resultados correspondientes al menor error en H se pueden ver en la Figura 2.5, mientras que la Figura 2.6 muestra los relativos al mayor error. Las Figuras 2.7 y 2.8 recogen, respectivamente, los resultados para cuando se produce el menor y mayor error en H , para la elección de tipo creciente. Lo análogo ocurre con las Figuras 2.9 y 2.10 en el caso de la función decreciente.

Este método (que, recordemos, proporciona los valores exactos si el error de medición es nulo) está muy influido por lo oscilatoria que sea la perturbación: el error en H crece con el valor de q , siendo menor para $q = 3$ (esto es, cuando la perturbación es la más suave de las elegidas) y mayor para $q = 97$ (la perturbación más oscilatoria).

Segundo método: algoritmo iterativo

Al considerar ahora el problema adimensionalizado el valor de $T^{ea} = 295/18$ no cambia. Sí lo hace la pendiente con que crece la presión, puesto que ahora no hay tramos constantes; en concreto, se tiene que $P(t) = 0.0162t$.

Como ya se ha comentado, las funciones H (constante, oscilante, creciente y decreciente) que se corresponden con las elegidas para el método anterior son su mitad, es decir,

$$1) H(s) = 6$$

$$2) H(s) = \frac{3}{2} \left(2 + \operatorname{sen} \left(4\pi \frac{s}{a} \right) \right)$$

$$3) H(s) = 2 e^{\frac{s}{a}}$$

$$4) H(s) = 6 \left(1 + e^{-\frac{s}{a}} \right).$$

Los cuatro pares formados por las Figuras 2.11 y 2.12, las Figuras 2.13 y 2.14, las Figuras 2.15 y 2.16 y las Figuras 2.17 y Figura 2.18 muestran los resultados obtenidos mediante este algoritmo, para el caso del menor y mayor error en H , y para cada uno de los cuatro tipos de función considerados: por este orden, constante, oscilante, creciente y decreciente.

Puesto que este algoritmo utiliza la interpolación de los valores aproximados de T en puntos que no son de la partición en que se toman las mediciones, su comportamiento no está ligado directamente a lo oscilatorio de las perturbaciones. Así, los casos de menor y mayor error se obtienen para valores variados de q .

En ambos métodos se puede apreciar que, aunque el tamaño del error en H sea moderado, las temperaturas calculadas a partir de las identificaciones aproximadas son bastante precisas (el error cometido es siempre del orden del error en las mediciones). El primero suele proporcionar una mejor aproximación de la temperatura cuando se resuelve con los parámetros iniciales. Sin embargo, si se observa la temperatura identificada para los nueve juegos de datos, el segundo método es en general más exacto en los casos del peor error en H y, por tanto, puede considerarse más robusto.

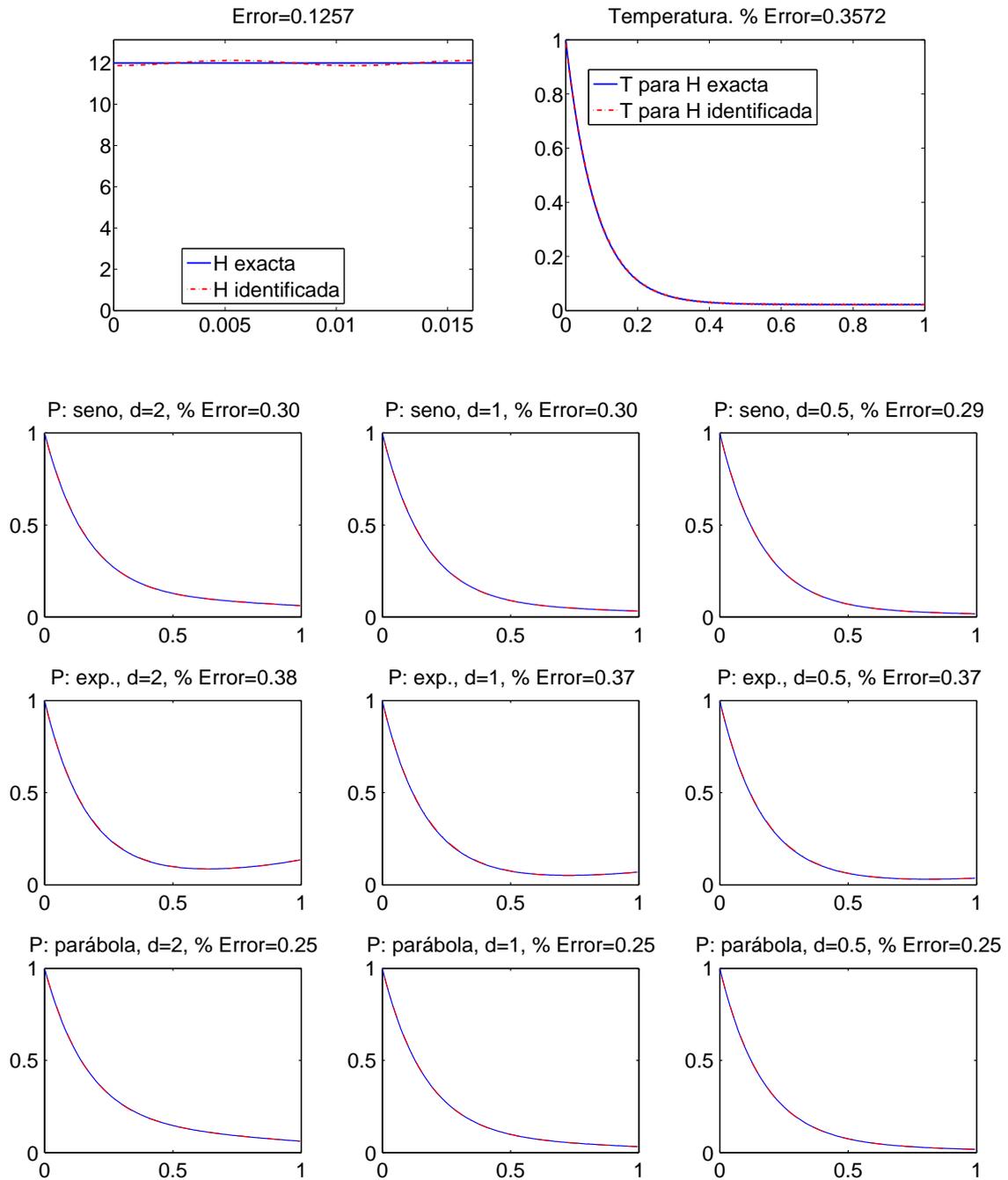


Figura 2.3: Experimento *ad hoc* y H constante (menor error en H). Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

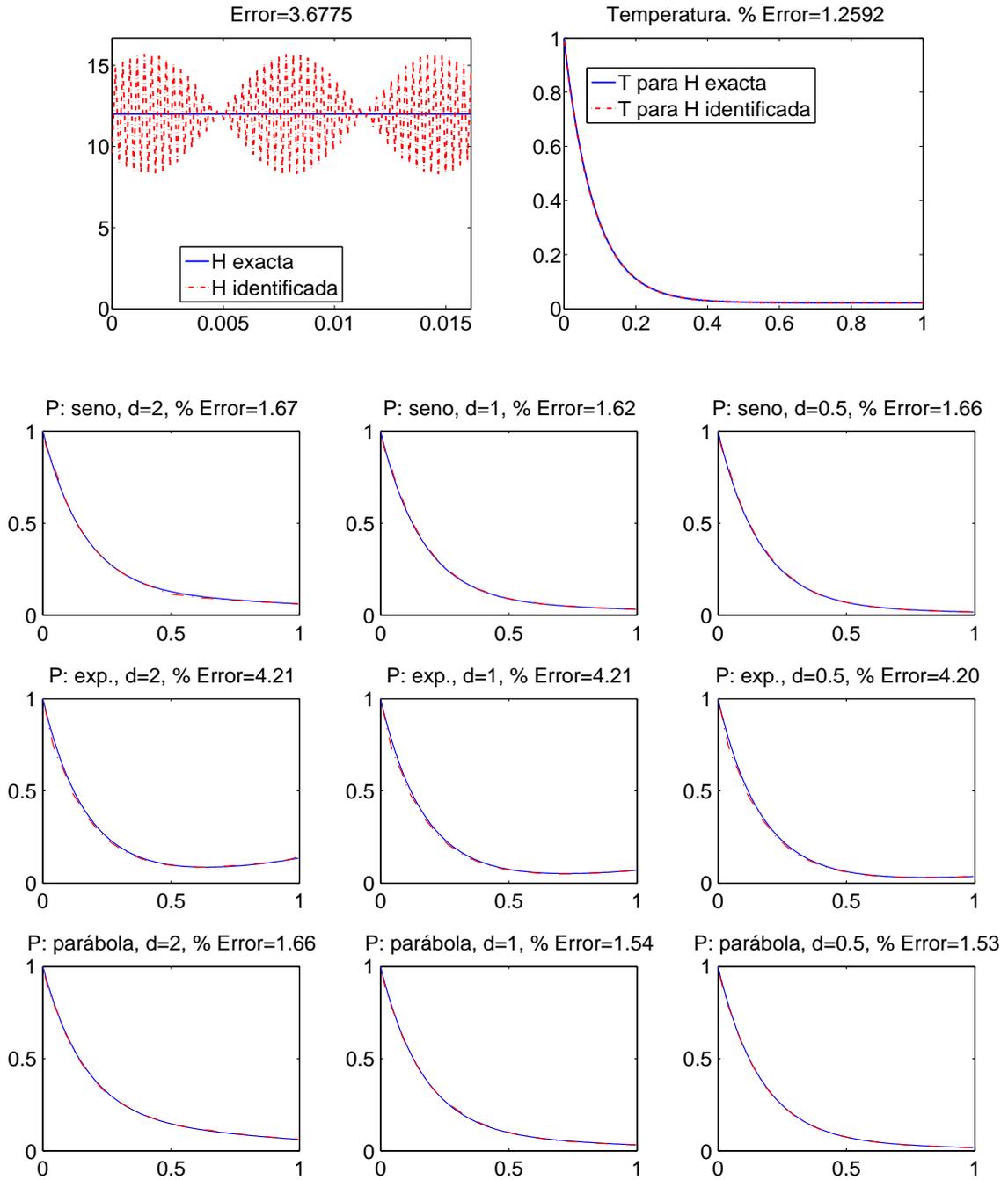


Figura 2.4: Experimento *ad hoc* y H constante (mayor error en H). Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

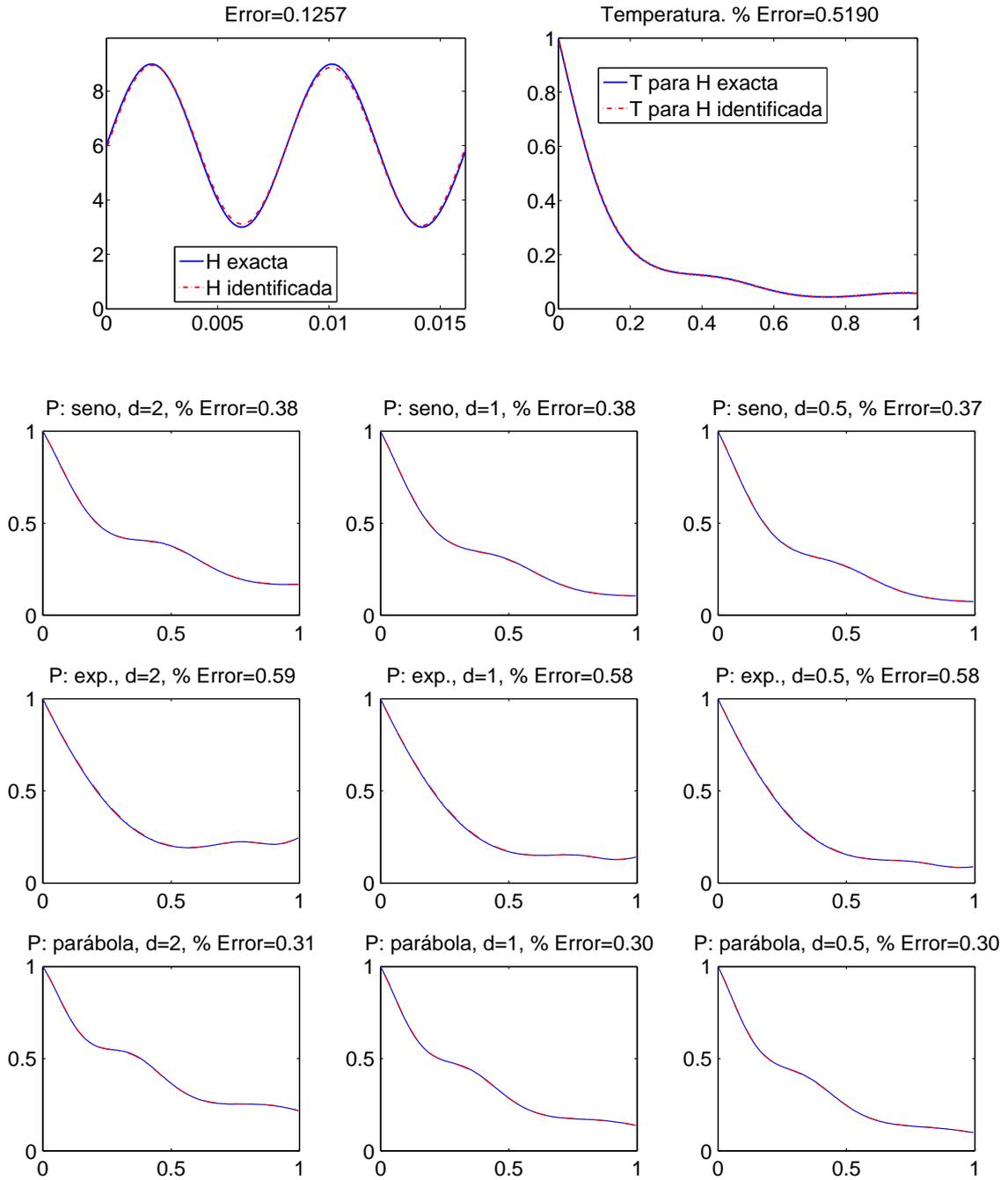


Figura 2.5: Experimento *ad hoc* y H oscilante (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3-t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

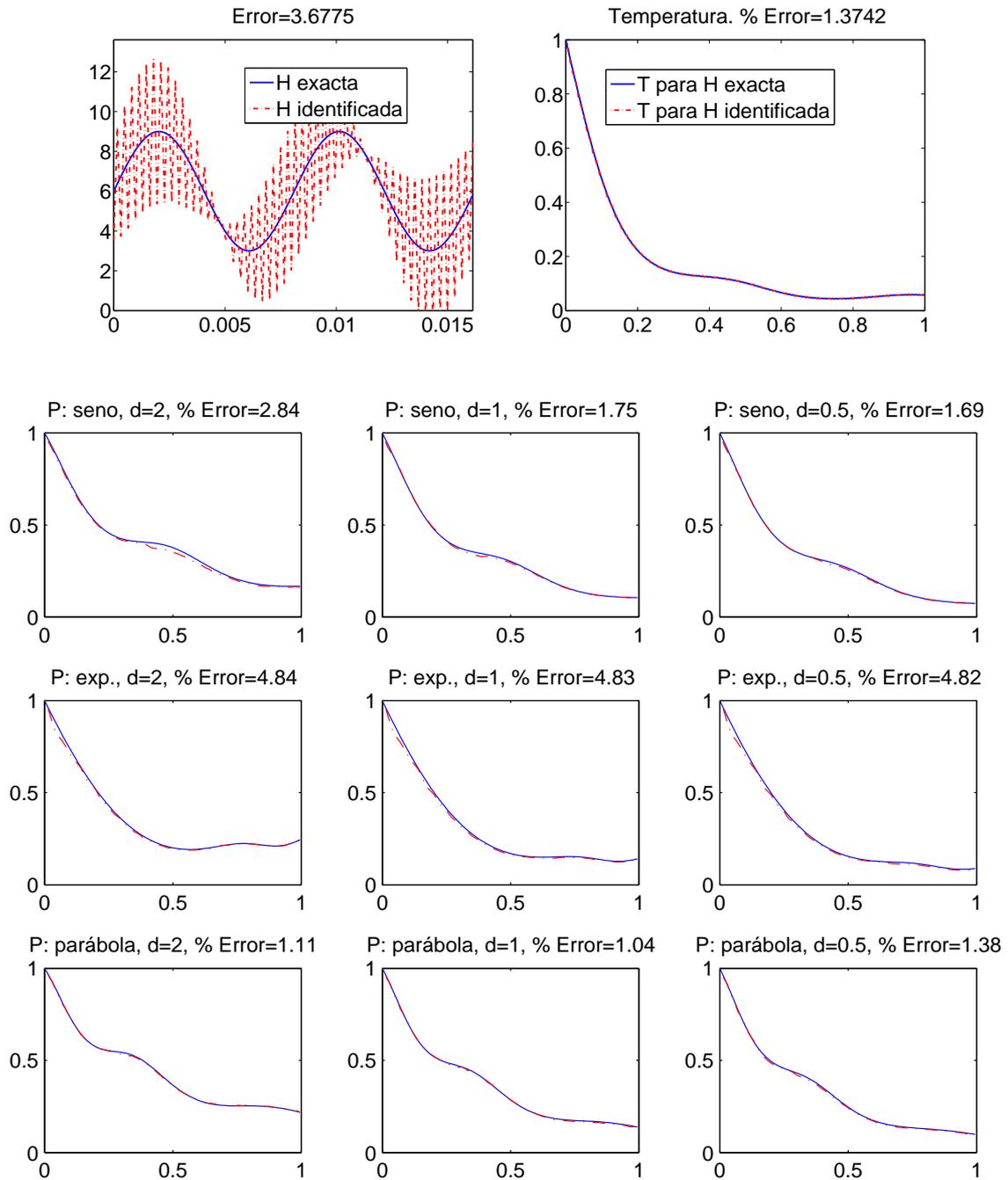


Figura 2.6: Experimento *ad hoc* y H oscilante (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \sin t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3-t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

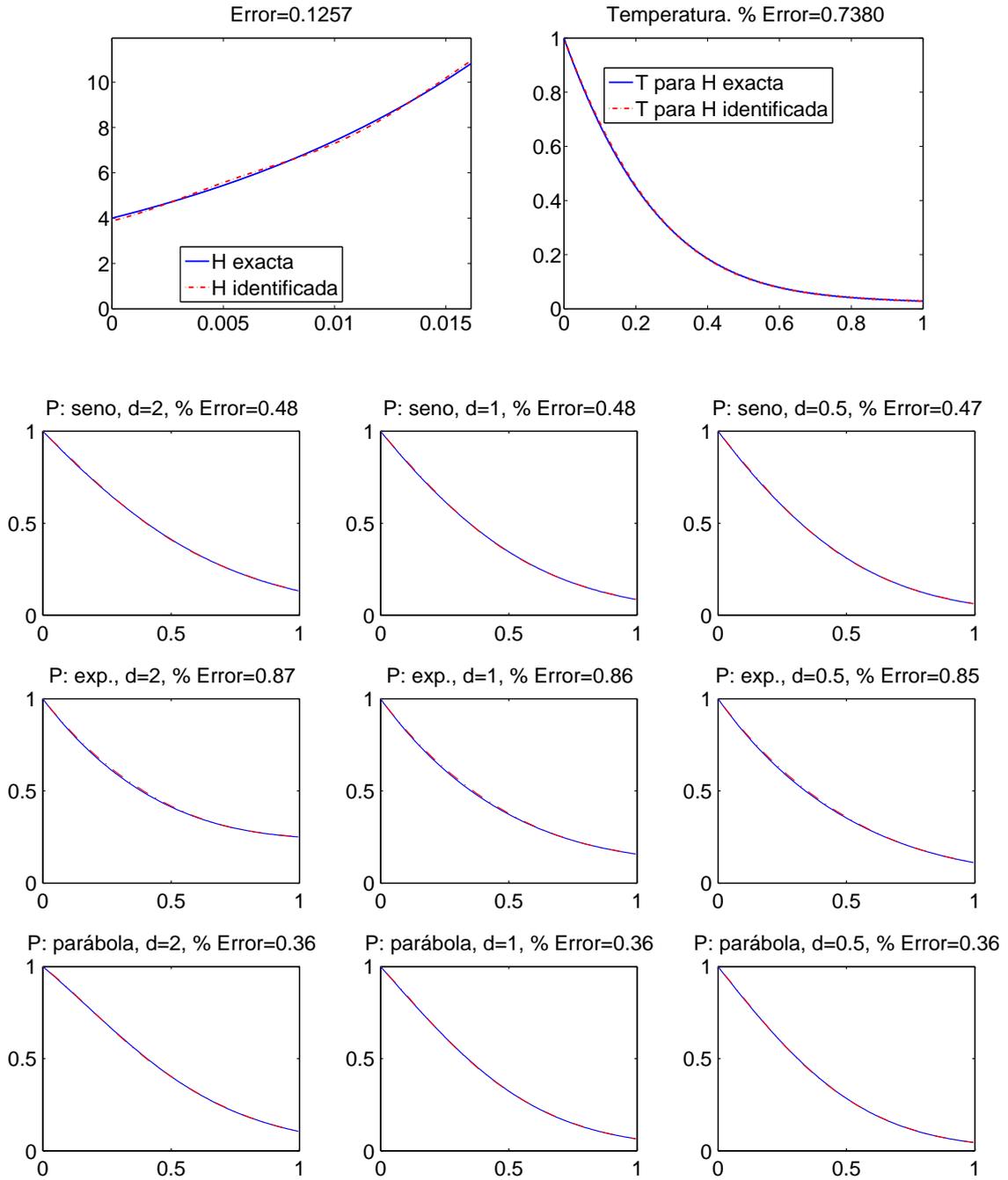


Figura 2.7: Experimento *ad hoc* y H creciente (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

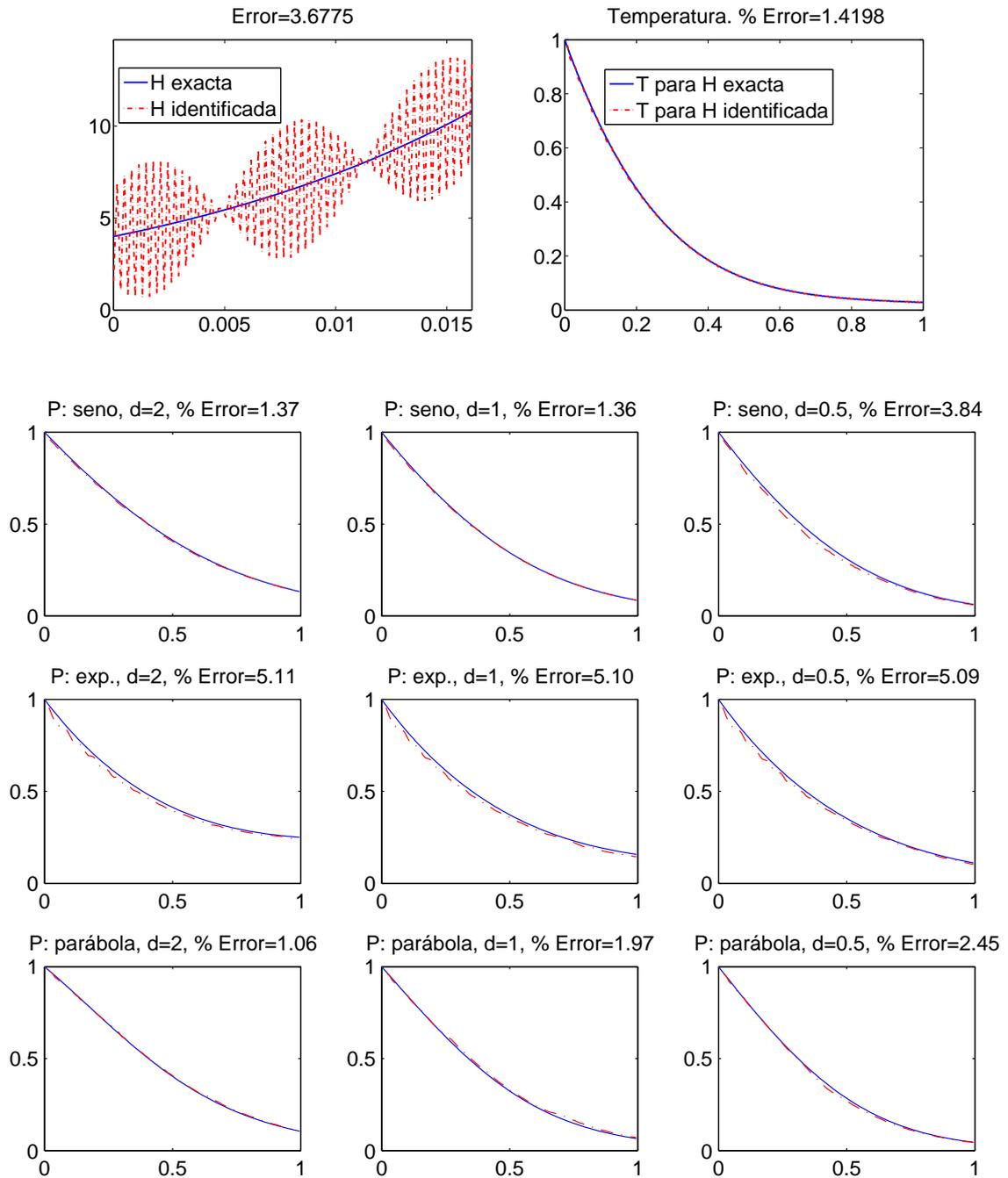


Figura 2.8: Experimento *ad hoc* y H creciente (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \operatorname{sen} t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3-t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

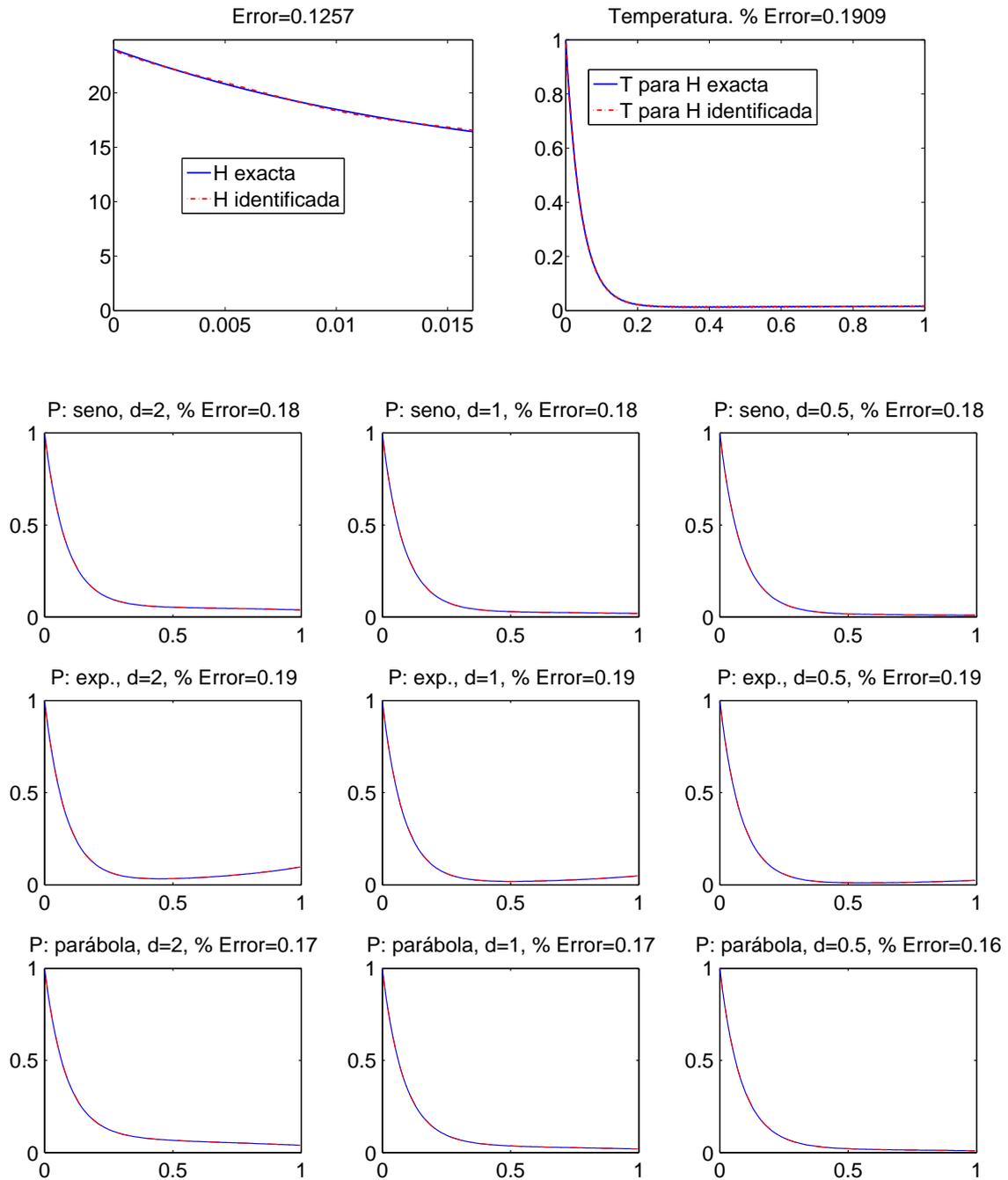


Figura 2.9: Experimento *ad hoc* y H decreciente (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

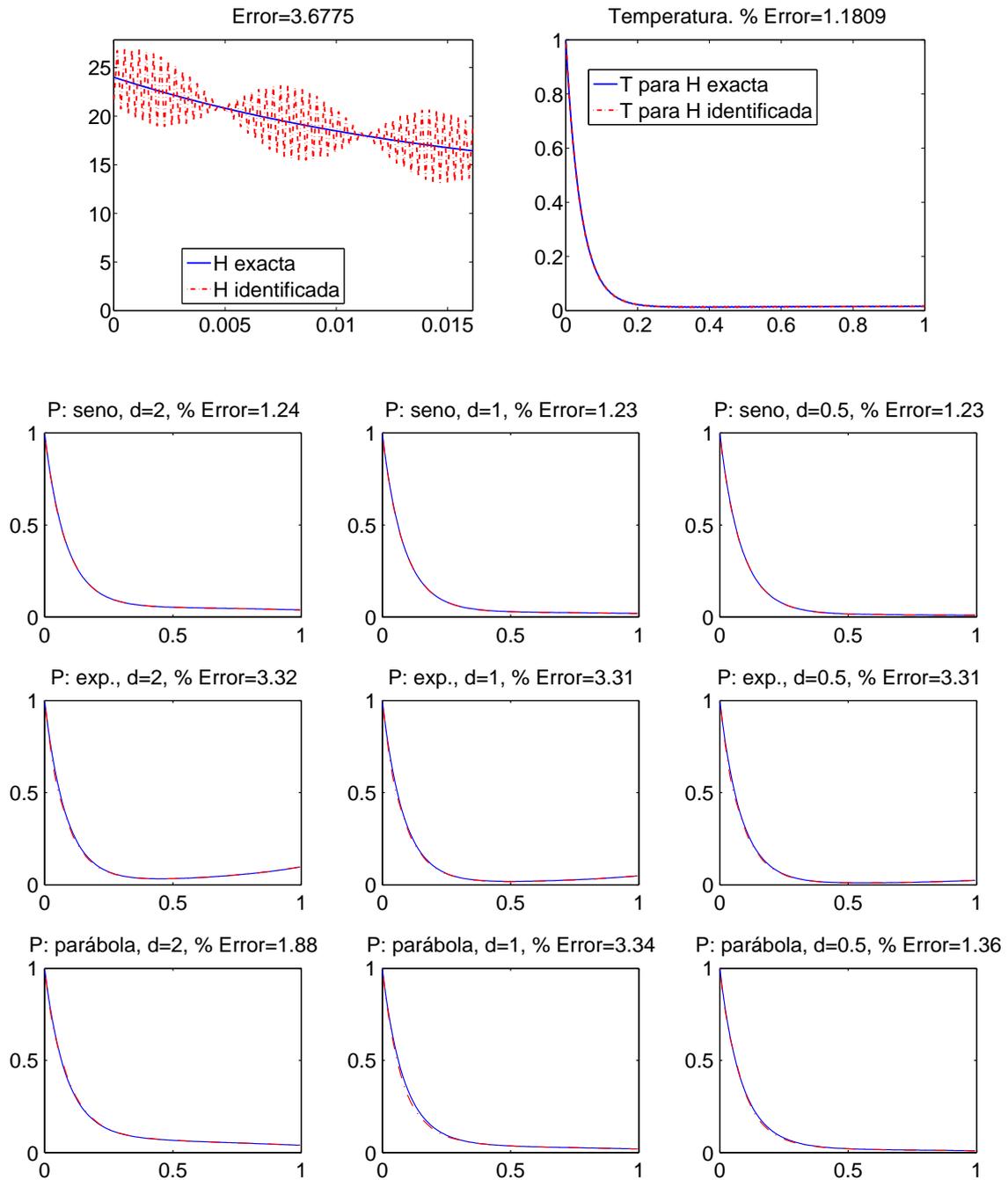


Figura 2.10: Experimento *ad hoc* y H decreciente (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \sin t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3-t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

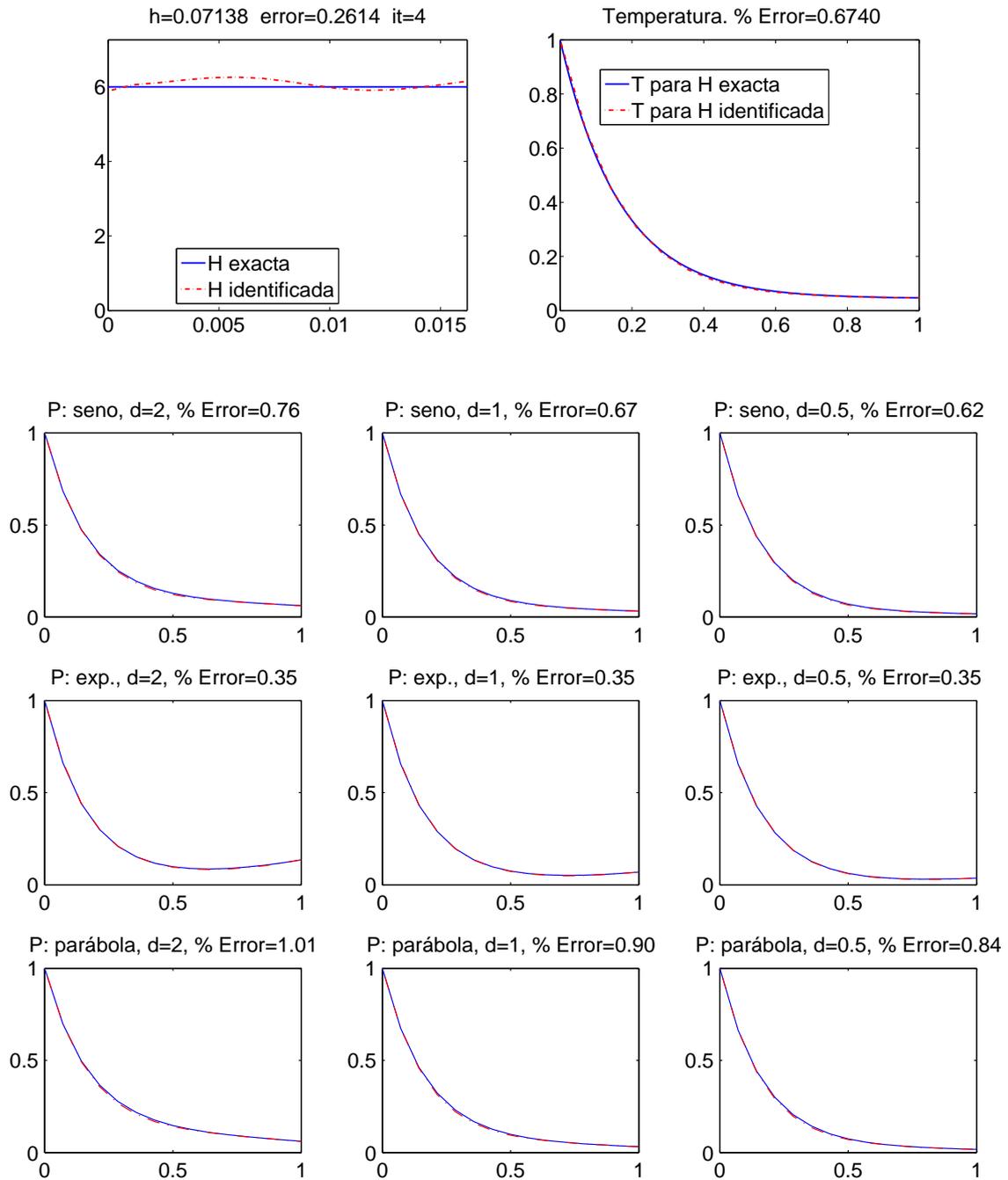


Figura 2.11: Algoritmo iterativo y H constante (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3-t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

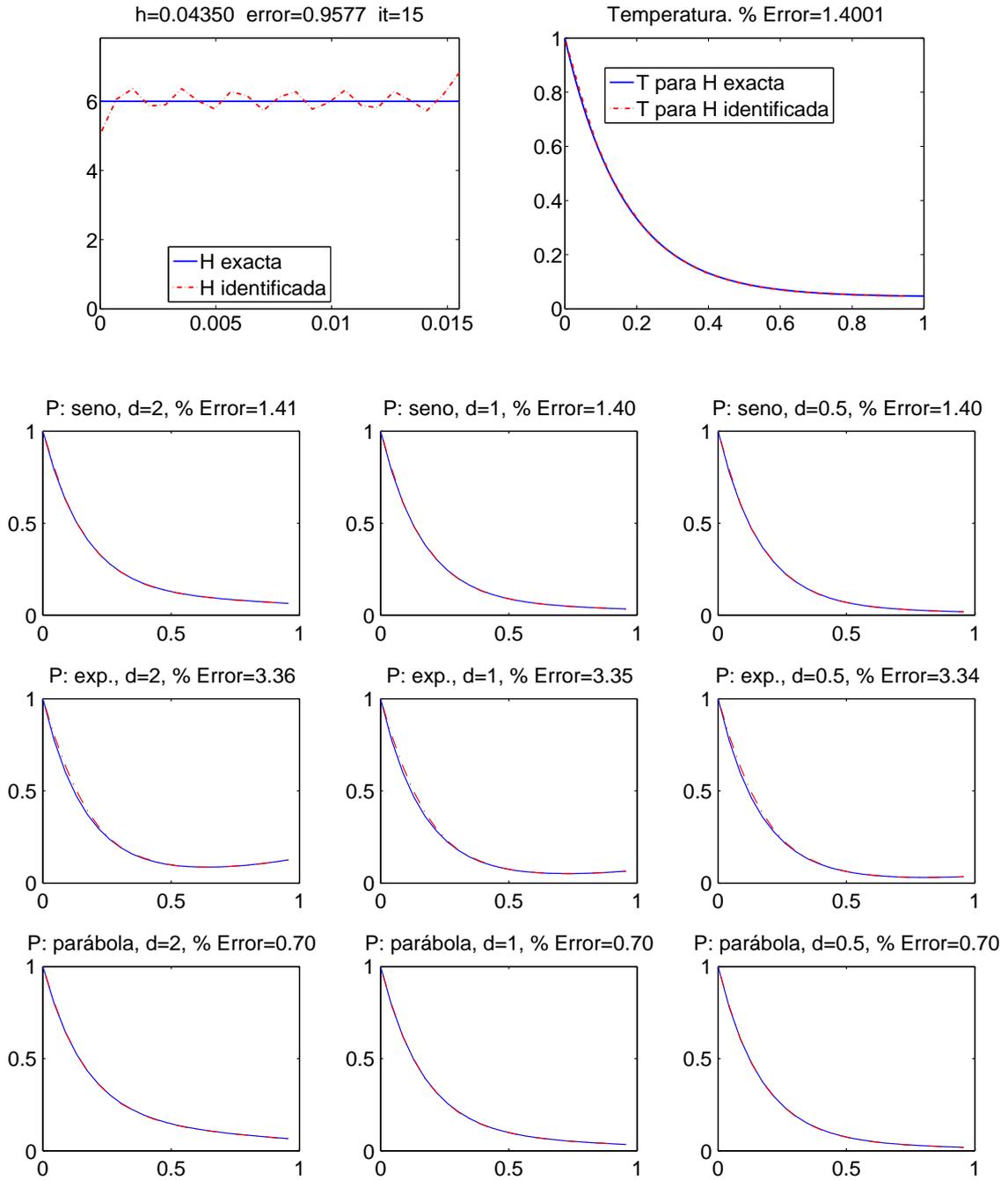


Figura 2.12: Algoritmo iterativo y H constante (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

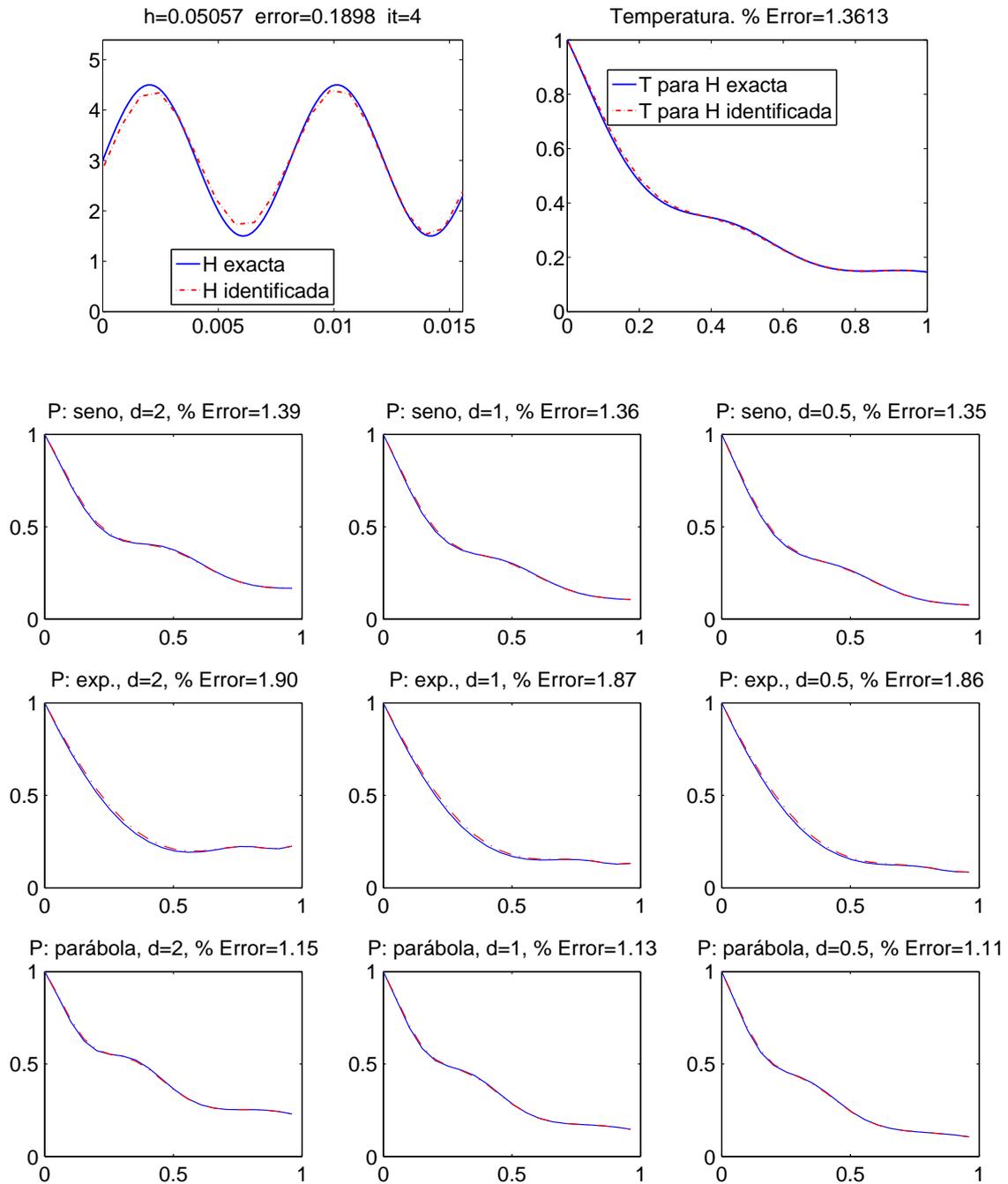


Figura 2.13: Algoritmo iterativo y H oscilante (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3-t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

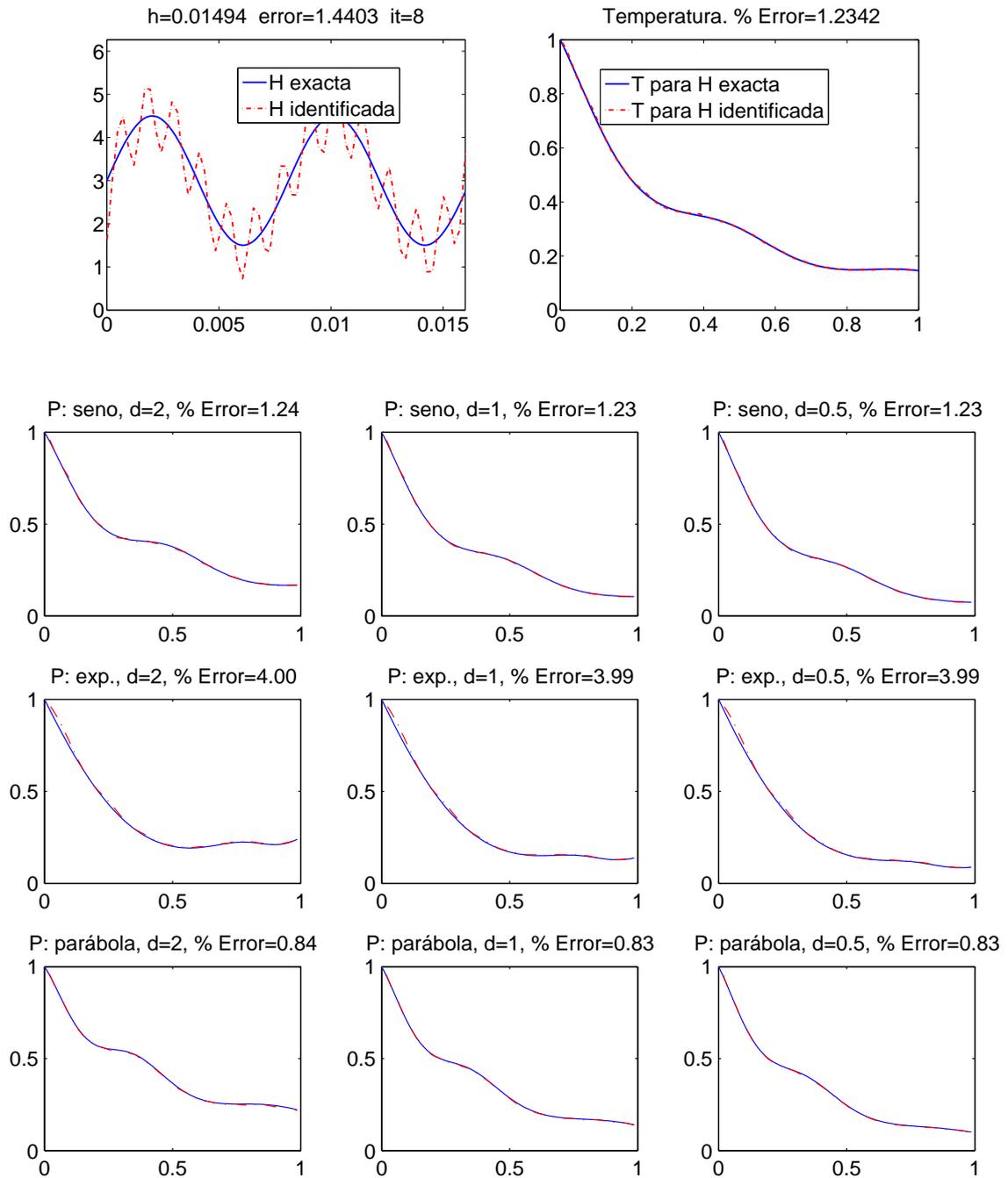


Figura 2.14: Algoritmo iterativo y H oscilante (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (Arriba), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (Centro) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (Abajo), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (Izquierda), $d = 1$ (Centro) y $d = 0.5$ (Derecha).

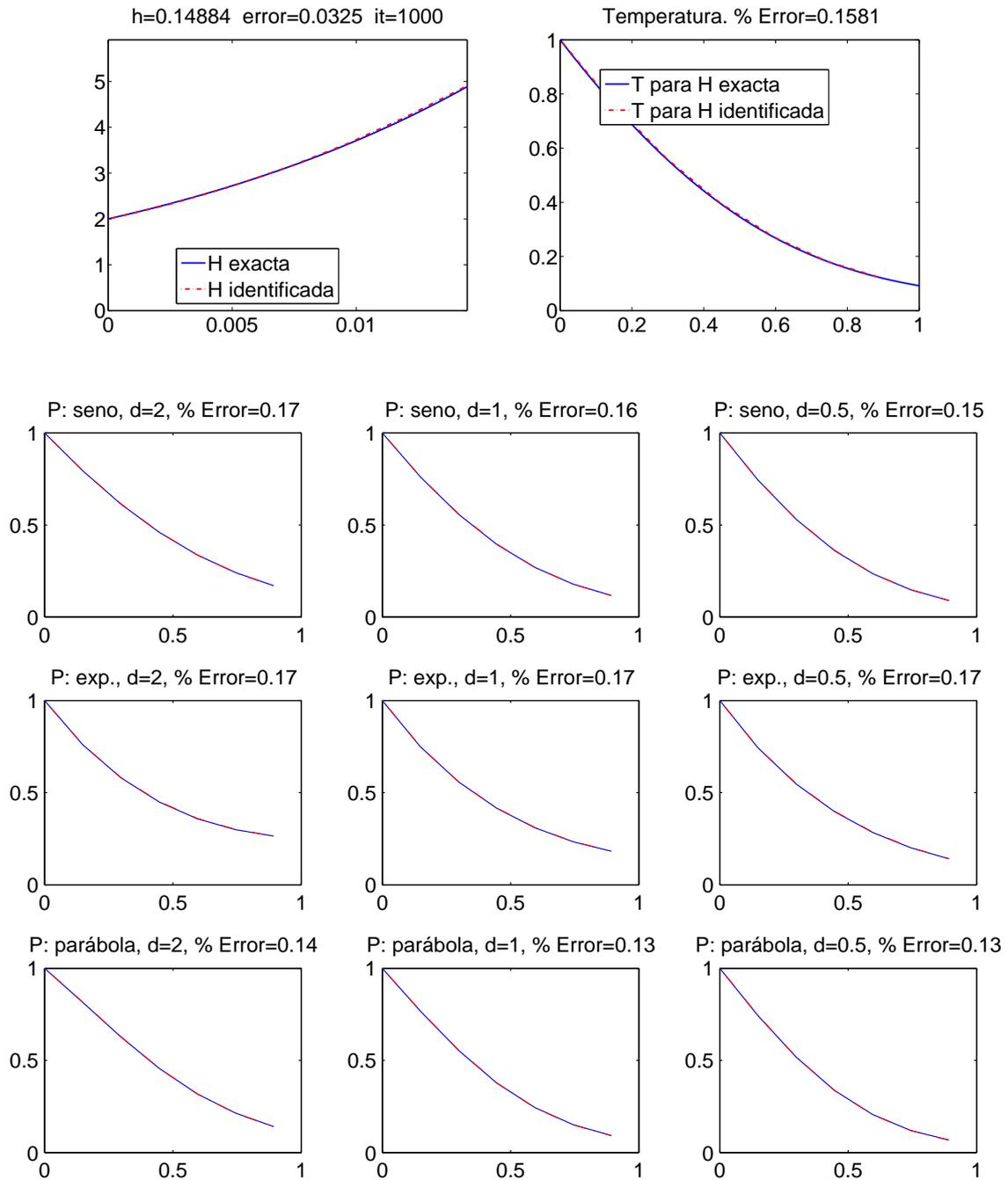


Figura 2.15: Algoritmo iterativo y H creciente (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3-t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

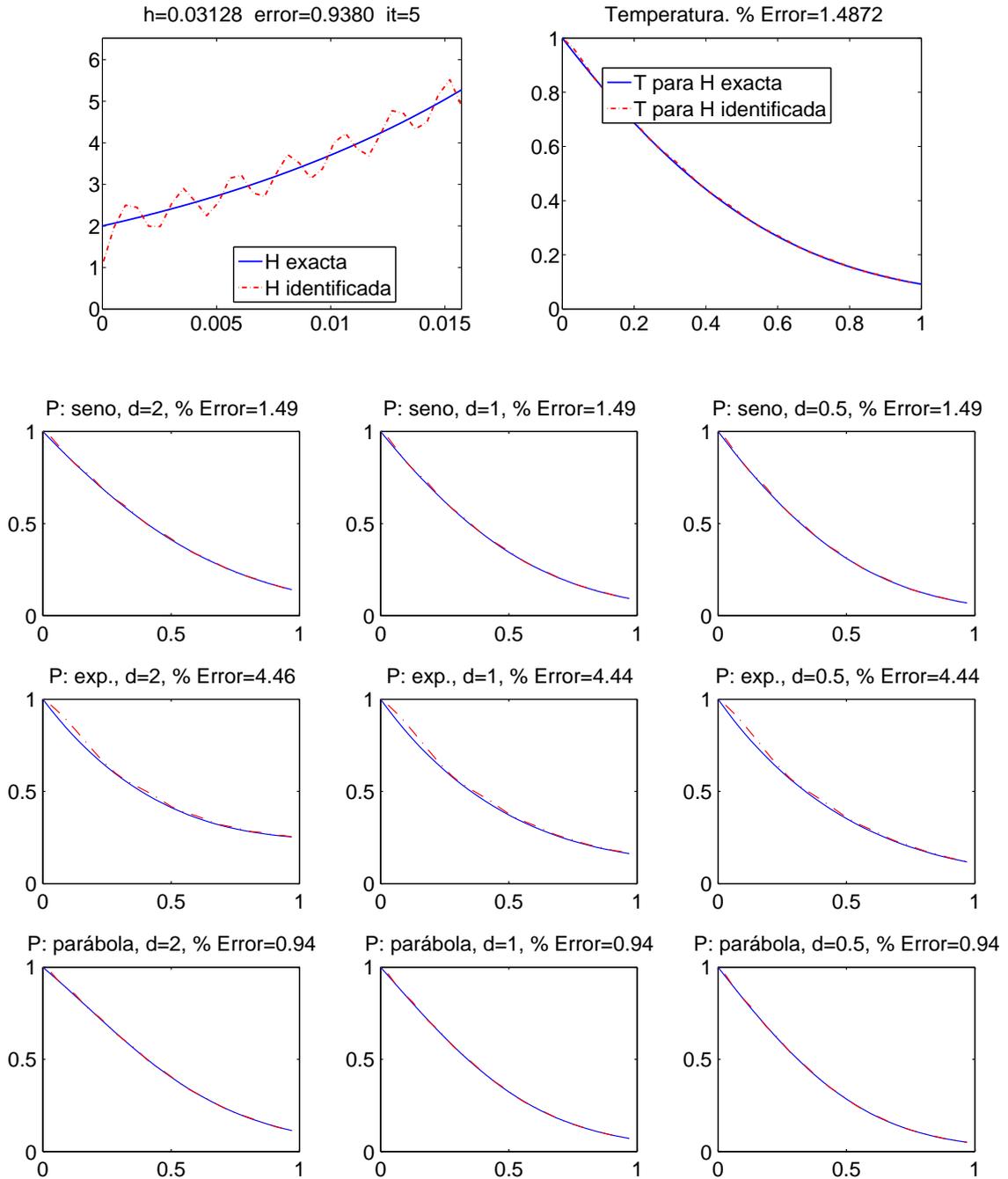


Figura 2.16: Algoritmo iterativo y H creciente (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3 - t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

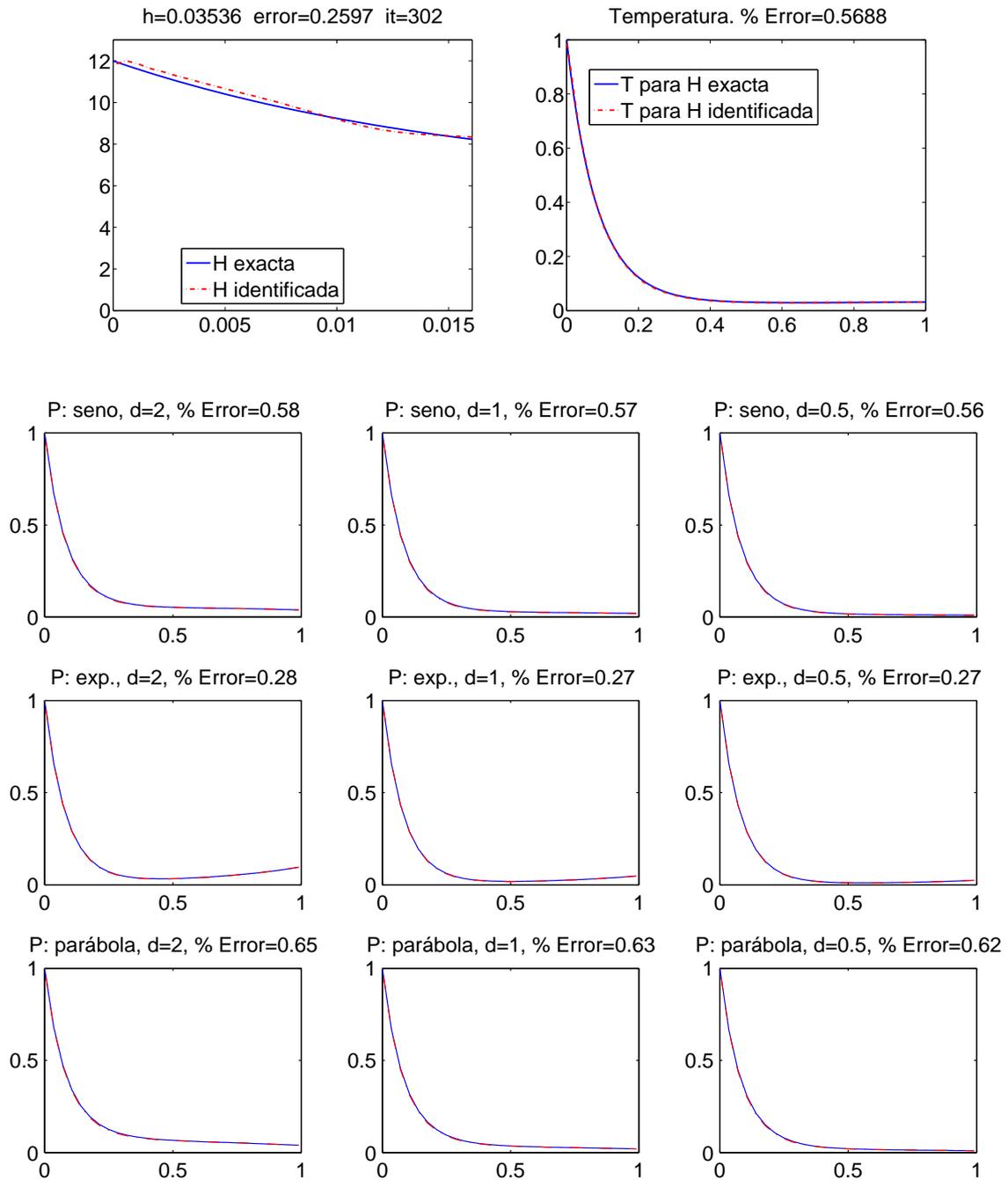


Figura 2.17: Algoritmo iterativo y H decreciente (menor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \text{sen } t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3-t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

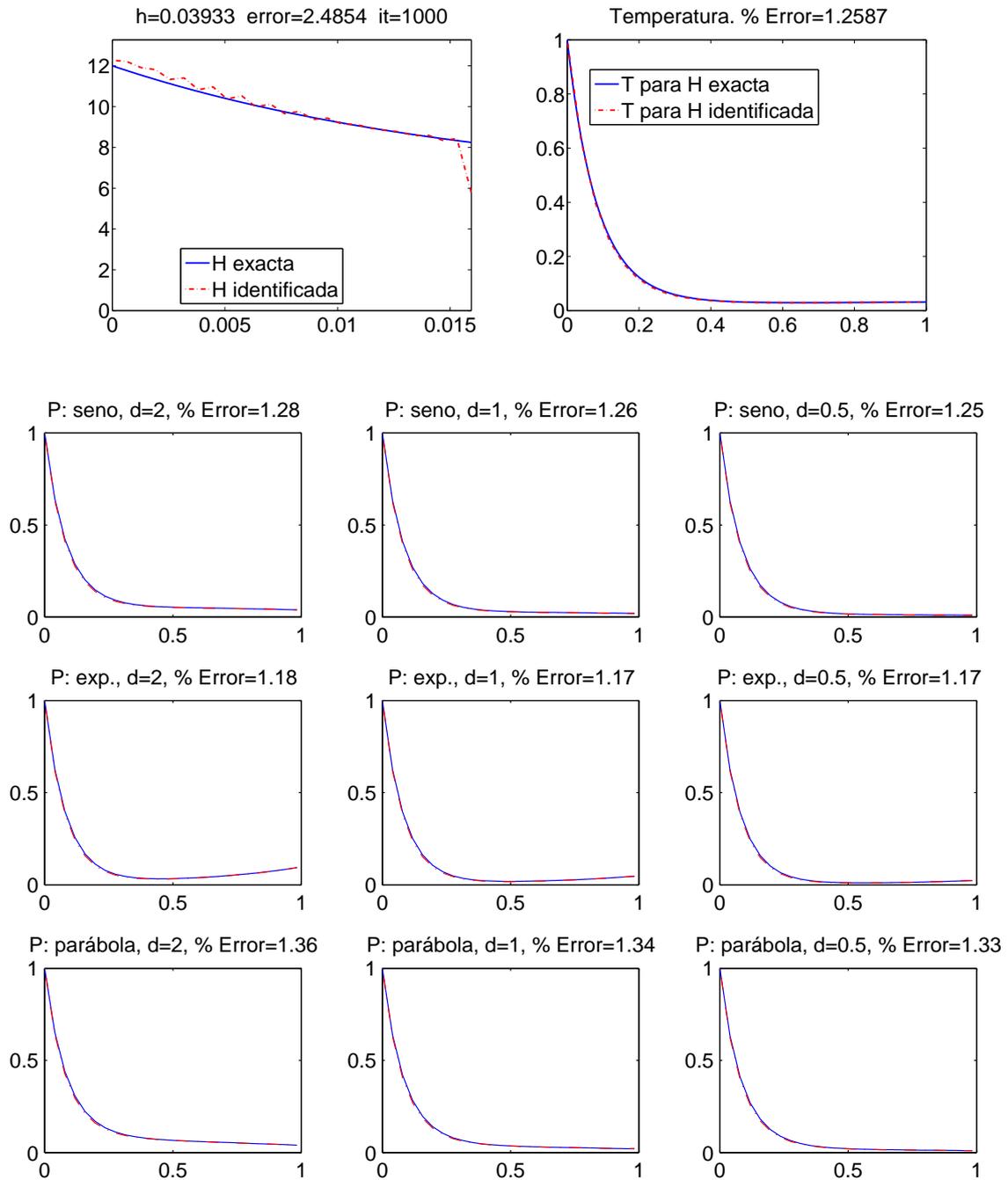


Figura 2.18: Algoritmo iterativo y H decreciente (mayor error en H): Perfiles de temperatura correspondientes a las curvas de presión $P(t) = a \sin t$ (**Arriba**), $P(t) = a(e^{2t-2} - e^{-2})$ (**Centro**) y $P(t) = at(3-t)/2$ (**Abajo**), y a los factores sobre T^{ea} $d = 2$ (**Izquierda**), $d = 1$ (**Centro**) y $d = 0.5$ (**Derecha**).

Capítulo 3

Identificación de un coeficiente de intercambio de calor que varía con la temperatura

Introducción

Como se comentó en la introducción a la segunda parte de la memoria, en el presente capítulo abordamos un estudio paralelo al realizado en el Capítulo 2, aunque ahora bajo el supuesto de que el coeficiente de intercambio de calor que se pretende identificar es función de la temperatura y no de la presión. Por un lado, el hecho de que H dependa de la solución de la ecuación de estado complica sustancialmente la resolución del problema inverso. Por otro, su independencia respecto a la presión permitirá trabajar a presión constante.

En concreto, se supone que el fenómeno físico que se estudia está modelizado por el problema de valor inicial

$$\begin{cases} T'(t) = H(T(t))(T^e - T(t)), & t \geq t_0 \\ T(t_0) = T_0, \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $T(t)$ representa la temperatura en el instante de tiempo t , T_0 es la temperatura inicial, T^e denota la temperatura del medio exterior y la función $H(T)$ es el coeficiente de intercambio de calor que se pretende identificar.

Las hipótesis sobre los datos del problema que configuran el contexto en el que vamos a trabajar son las siguientes:

- La temperatura exterior T^e es constante.
- La temperatura inicial T_0 es estrictamente menor que la temperatura ambiente T^e (un estudio totalmente análogo se podría realizar si, como se hacía en el Capítulo 2, se partiera de $T_0 > T^e$). Como se verá en la Sección 3.1, esto permite asegurar que la solución T es una función creciente que toma sus valores en el intervalo $[T_0, T^e]$.
- La función H es continua y positiva en $[T_0, T^e]$.

El objetivo es, también en este capítulo, identificar de forma aproximada el coeficiente H , supuestas conocidas una serie de mediciones experimentales (y, por tanto, afectadas de un cierto

error) de la temperatura. Esta aproximación deberá servir para proporcionar soluciones satisfactorias del problema cuando se cambian los datos de partida. Destacamos que ahora tales datos son, simplemente, la temperatura inicial y la exterior.

Para obtener la identificación de H en el mayor rango de temperaturas posible, será conveniente tomar las mediciones durante un experimento que parta de una temperatura inicial y se realice a una temperatura externa que, dentro de lo admisible en el contexto físico, sean la más baja y más alta, respectivamente, posibles.

El desarrollo de este capítulo discurre en paralelo al del Capítulo 2; a continuación describimos su organización:

En primer lugar (Sección 3.1), se realiza un análisis cualitativo del problema directo, estudiando la existencia y unicidad de solución, así como propiedades de regularidad y dependencia continua. Seguidamente, en la Sección 3.2, se estudian los distintos escenarios en los que se va a tratar el problema inverso; en esta ocasión, la elección de los umbrales de trabajo deberá ser un tanto más sofisticada que la efectuada en el Capítulo 2, y servirá para delimitar el intervalo temporal en el que podremos realizar la identificación. A continuación, la Sección 3.3 muestra cómo abordar el problema mediante algoritmos clásicos basados en la teoría de regularización, como son el principio de discrepancia de Morozov o el método iterativo de Landweber. En la Sección 3.4 se hace un estudio paralelo al realizado en la Sección 2.4 y, en particular, se presenta una adaptación del algoritmo iterativo allí introducido. Finalmente, los resultados numéricos obtenidos mediante los distintos métodos y para diversas situaciones de partida, están recogidos en la Sección 3.5.

Una aproximación al problema análoga a la de este capítulo, utilizando esquemas de orden uno, puede encontrarse en el trabajo [15].

3.1. Análisis cualitativo del problema directo

Los resultados que se recogen en esta sección describen propiedades cualitativas de la solución del problema directo. El primero de ellos nos habla de la existencia y unicidad de solución, así como de su crecimiento y comportamiento asintótico.

Teorema 3.1.1 *Sea H una función continua y positiva en el intervalo $[T_0, T^e]$. Entonces, existe una única solución T del problema (3.1) con las siguientes propiedades:*

- a) $T(t)$ está definida para todo $t \geq t_0$ y $T \in C^1([t_0, +\infty))$.
- b) $T'(t) > 0$ para todo $t \geq t_0$ y, por tanto, T es una función creciente.
- c) $T_0 \leq T(t) < T^e$ para todo $t \geq t_0$.
- d) Para todo $t \geq t_0$ se verifica que

$$T^e - (T^e - T_0)e^{-H_m(t-t_0)} \leq T(t) \leq T^e - (T^e - T_0)e^{-H_M(t-t_0)},$$

$$\text{donde } H_m = \min_{s \in [T_0, T^e]} H(s) \text{ y } H_M = \max_{s \in [T_0, T^e]} H(s).$$

- e) $\lim_{t \rightarrow +\infty} T(t) = T^e$. Es decir, todas las soluciones tienden asintóticamente al único punto de equilibrio T^e de la ecuación diferencial.

f) Para todo $t \geq t_0$ se verifica que

$$H_m(T^e - T_0)e^{-H_M(t-t_0)} \leq T'(t) \leq H_M(T^e - T_0)e^{-H_m(t-t_0)}.$$

DEMOSTRACIÓN. Gracias a resultados clásicos (véase, v. gr., [13, Teorema 1, pág. 51]), se puede asegurar que el problema (3.1) admite una única solución T definida en un cierto intervalo a la derecha de t_0 . Además, si consideramos H extendida por continuidad de forma constante a toda la recta real, la acotación de dicha extensión permite afirmar (cf., por ejemplo, [13, Corolario 4, pág. 192]) que esta (única) solución está definida en todo $[t_0, +\infty)$. Por otra parte, es claro que existe $\delta > 0$ tal que

$$T'(t) > 0 \text{ y } T_0 \leq T(t) < T^e \text{ para todo } t \in [t_0, t_0 + \delta).$$

Veamos que, de hecho, las desigualdades anteriores se cumplen para todo $t \geq t_0$. En otro caso, teniendo en cuenta que

$$T'(t^*) = 0 \Leftrightarrow T(t^*) = T^e,$$

existiría $t^* > t_0$ tal que

$$\begin{cases} T'(t) > 0 \text{ y } T_0 \leq T(t) < T^e, & t \in [t_0, t^*) \\ T'(t^*) = 0 \text{ y } T(t^*) = T^e. \end{cases}$$

Entonces, puesto que $T(t)$ puede expresarse implícitamente como

$$\int_{T_0}^{T(t)} \frac{dz}{H(z)(T^e - z)} = \int_{t_0}^t ds = t - t_0$$

y $H_M > 0$, se llegaría a la contradicción

$$t^* - t_0 = \int_{T_0}^{T^e} \frac{dz}{H(z)(T^e - z)} \geq \frac{1}{H_M} \int_{T_0}^{T^e} \frac{dz}{T^e - z} = -\frac{1}{H_M} \ln(T^e - z) \Big|_{T_0}^{T^e} = +\infty.$$

De esta forma, quedan demostrados los tres primeros apartados. Para demostrar el apartado d) basta integrar en la cadena de desigualdades

$$0 < H_m \leq H(T(t)) = \frac{T'(t)}{T^e - T(t)} \leq H_M \text{ para todo } t \geq t_0.$$

El apartado e) se deduce haciendo tender t a $+\infty$ en la desigualdad d).

Finalmente, el último apartado se obtiene escribiendo

$$T'(t) = H(T(t))(T^e - T(t)) \leq H_M(T^e - T_0)e^{-H_m(t-t_0)},$$

donde se ha utilizado la estimación izquierda de d) reescrita como

$$T^e - T(t) \leq (T^e - T_0)e^{-H_m(t-t_0)}.$$

Análogamente se obtiene la otra desigualdad. \square

El Lema de Gronwall (cf. el Lema 2.1.1) servirá para demostrar un resultado de dependencia continua de la solución del problema (3.1) respecto a la función H , cuando se trabaja en un intervalo temporal acotado $[t_0, t_f]$. De nuevo se trata de un resultado importante, pues permite asegurar que las temperaturas calculadas con una aproximación de H serán cercanas a las correspondientes a la H exacta (de forma que una mejor aproximación de H supone mejores aproximaciones de T).

Teorema 3.1.2 (Dependencia continua respecto a la función H) Sean T la solución del problema (3.1) y \mathcal{T} la solución del problema

$$\begin{cases} \mathcal{T}'(t) = \mathcal{H}(\mathcal{T}(t))(T^e - \mathcal{T}(t)), & t \in (t_0, t_f) \\ \mathcal{T}(t_0) = T_0, \end{cases}$$

con $t_f > t_0$ arbitrario, y donde supondremos que:

a) H es positiva y lipschitziana en $[T_0, T^e]$, con constante de Lipschitz $L > 0$.

b) \mathcal{H} es continua y positiva en $[T_0, T^e]$.

c) $\|H - \mathcal{H}\|_{\mathcal{C}([T_0, T^e])} < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$.

Entonces,

$$\|T - \mathcal{T}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} \leq \varepsilon(T^e - T_0) \frac{e^{C(t_f - t_0)} - 1}{C},$$

siendo $C = H_M + L(T^e - T_0)$.

DEMOSTRACIÓN. Consideremos la función $z(t) = T(t) - \mathcal{T}(t)$. Para todo $t \in [t_0, t_f]$ se verifica que

$$\begin{aligned} |z'(t)| &= |H(T(t))(T^e - T(t)) - \mathcal{H}(\mathcal{T}(t))(T^e - \mathcal{T}(t))| \\ &\leq |H(T(t))(T^e - T(t)) - H(T(t))(T^e - \mathcal{T}(t))| \\ &\quad + |H(T(t))(T^e - \mathcal{T}(t)) - H(\mathcal{T}(t))(T^e - \mathcal{T}(t))| \\ &\quad + |H(\mathcal{T}(t))(T^e - \mathcal{T}(t)) - \mathcal{H}(\mathcal{T}(t))(T^e - \mathcal{T}(t))| \\ &\leq H(T(t))|T(t) - \mathcal{T}(t)| + |H(T(t)) - H(\mathcal{T}(t))||T^e - \mathcal{T}(t)| \\ &\quad + |H(\mathcal{T}(t)) - \mathcal{H}(\mathcal{T}(t))||T^e - \mathcal{T}(t)| \\ &\leq H_M|z(t)| + L|z(t)|(T^e - T_0) + \varepsilon(T^e - T_0) \\ &= C|z(t)| + \varepsilon(T^e - T_0), \end{aligned}$$

donde se ha utilizado el apartado c) del Teorema 3.1.1 aplicado a la función \mathcal{T} . Así pues,

$$|z(t)| = \left| z(t_0) + \int_{t_0}^t z'(s) ds \right| \leq \int_{t_0}^t |z'(s)| ds \leq \int_{t_0}^t C|z(s)| ds + \varepsilon(T^e - T_0)(t - t_0).$$

El resultado se tiene, igual que en el Teorema 2.1.4, sin más que aplicar el Lema de Gronwall (Lema 2.1.1) en $[t_0, t_f]$ con

$$y(t) = |z(t)|, \quad f(t) = \varepsilon(T^e - T_0)(t - t_0) \quad \text{y} \quad g(t) = C. \quad \square$$

A continuación presentamos un resultado que proporciona una relación cualitativa adicional entre las funciones H y T .

Teorema 3.1.3 Sea $H \in \mathcal{C}^1([T_0, T^e])$ tal que

$$H(s) > 0 \quad \text{para todo} \quad s \in [T_0, T^e].$$

Son equivalentes:

- a) La solución T del problema (3.1) es cóncava en $[t_0, +\infty)$.
- b) La función $H(s)(T^e - s)$ es decreciente en $[T_0, T^e]$.

DEMOSTRACIÓN. Derivando la ecuación diferencial del problema (3.1) se obtiene

$$T''(t) = \frac{d}{dT} \left(H(T)(T^e - T) \right) T'(t),$$

de donde se sigue el resultado, teniendo en cuenta que $T'(t) > 0$. \square

Observación 3.1.4

- a) Nótese que la función $G(s) = H(s)(T^e - s)$ no puede ser creciente en todo el intervalo $[T_0, T^e]$ puesto que, al ser $G(T^e) = 0$, la función H debería ser negativa. En consecuencia, T no puede ser una función convexa en todo el intervalo $[t_0, +\infty)$.
- b) Una condición suficiente para que esta función G sea decreciente en $[T_0, T^e]$ es que

$$H' < 0 \text{ en } [T_0, T^e],$$

puesto que, entonces,

$$\frac{d}{dT} \left(H(T)(T^e - T) \right) = H'(T)(T^e - T) - H(T) < 0.$$

- c) Si las mediciones observadas tienen una distribución creciente y cóncava, entonces la función H identificada, si se supone que es suficientemente “suave”, deberá ser tal que la función G correspondiente sea decreciente. \square

3.2. Escenarios de planteamiento del problema inverso

Nótese que el modelo (3.1) es poco sensible a cambios de $H(s)$ para valores de s cercanos a T^e en el siguiente sentido: si para un cierto tiempo t_μ la función T alcanza un cierto valor $T^e - \mu$ entonces, por ser T creciente, a partir de este instante, toda la función T permanece en el intervalo $[T^e - \mu, T^e]$ independientemente de los valores que tome la función H . Por este motivo, resulta ilusorio (e innecesario) pretender indentificar la función H en temperaturas cercanas a T^e . Por otra parte, puede ocurrir que el mayor valor conocido de la temperatura quede distante de la temperatura exterior. En ese caso, la falta de información hace imposible la identificación de H en temperaturas cercanas a T^e .

Estas consideraciones nos llevan a plantear el problema de identificar la función H en los siguientes términos:

- 1) Se fijará un *umbral* $\mu > 0$, que dependerá del rango admisible de valores en los que se necesita aproximar la temperatura, de forma que la identificación de la función H en el intervalo $[T^e - \mu, T^e]$ no forma parte de nuestros objetivos. A partir de este umbral se determinará (mediante los argumentos que se explicarán más adelante) un tiempo $t_f = t_f(\mu, T, T^e)$ para el que se verifique

$$T(t) \geq T^e - \mu, \quad t \geq t_f. \quad (3.2)$$

- II) Para la identificación de la función H en el intervalo $[T_0, T^e - \mu]$ utilizaremos el modelo (3.1) planteado en el intervalo $[t_0, t_f]$. De esta forma, se obtiene una identificación de H en el intervalo $[T_0, T(t_f)]$ que contiene a $[T_0, T^e - \mu]$.

Observación 3.2.1 Si, una vez fijado el umbral μ , se requiere alargar el intervalo temporal en el que trabajar (por ejemplo, si fuera necesario aumentar el número de mediciones, y éstas no se pudieran espaciar menos en el tiempo, debido a las limitaciones del equipo de medida) bastaría con disminuir la temperatura inicial T_0 , siempre que esto fuera físicamente posible. La explicación de ello es que la solución T es una función creciente y que dos soluciones no pueden cruzarse al ser la solución única para todo instante y valor inicial (de hecho, al ser la ecuación del problema (3.1) autónoma, la solución para la nueva temperatura inicial será una traslación en t de la solución para el T_0 original). La acotación

$$(T^e - T_0)e^{-H_M(t_f - t_0)} \leq T^e - T(t),$$

la cual se deduce, de forma trivial, del apartado *d*) del Teorema 3.1.1, da idea de cómo están relacionados, en estos términos, $(t_f - t_0)$ y T_0 . \square

Al igual que ocurría en el Capítulo 2, en función de la información disponible sobre la temperatura T en $[t_0, t_f]$, el problema inverso se plantea en cuatro escenarios:

- E1) El primer escenario que consideramos es el caso de que se conozca la función T en todo el intervalo $[t_0, t_f]$ (y, por tanto, también su derivada); como ya se ha comentado, se trata de un problema meramente académico. Bajo las hipótesis realizadas sobre H , su identificación se obtendría de manera inmediata a partir de la igualdad

$$H(T(t)) = \frac{T'(t)}{T^e - T(t)}$$

o, equivalentemente,

$$H(s) = \frac{T'(T^{-1}(s))}{T^e - s},$$

dado que la función T es inyectiva, por ser creciente. De esta forma, la solución del problema inverso puede determinarse de manera única.

- E2) Si se conocen los valores de la función T , de forma exacta, en un número finito de instantes arbitrarios de tiempo del intervalo $[t_0, t_f]$, el problema se reduce, como en el Capítulo 2 a un problema estándar de derivación aproximada.
- E3) El tercer escenario en que nos situamos es cuando se conoce una función \tilde{T} que aproxima la temperatura en todo instante de tiempo.
- E4) Finalmente, consideramos la situación más interesante en que tan sólo se conoce una cantidad discreta de valores \hat{T}_k que aproximan los correspondientes valores de la función T .

Con objeto de llevar a cabo la identificación en los tres últimos escenarios, buscaremos un método “estable” que aproxime T' en ciertos instantes de tiempo; estas aproximaciones servirán para calcular una cantidad discreta de valores aproximados de H en puntos del intervalo $[T_0, T(t_f)]$.

Veamos cómo proceder a la determinación de t_f en las distintas situaciones que pueden plantearse:

- a) En el primer escenario, el valor de t_f (con propiedad, el mínimo valor de t_f que verifica (3.2)) es la solución de la ecuación $T(t) = T^e - \mu$; es decir,

$$t_f = T^{-1}(T^e - \mu).$$

- b) En el segundo escenario tendremos en consideración sólo los valores de T en el rango en que trabajamos, es decir, los que estén por debajo de $T^e - \mu$. Para ello, se razonará como sigue: supuestos conocidos $p + 1$ valores exactos de la temperatura $\{T_0, T_1, \dots, T_p\}$ en los instantes $\{\tau_0 = t_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_p\}$, se definen las cantidades

$$\mu_k = T^e - T_k.$$

En la práctica, el valor de μ se modifica para que coincida con uno de los μ_k . Si el umbral de partida μ es menor que todas las cantidades μ_k (i. e., cuando los valores conocidos de la temperatura están lejos de T^e), se toma $\mu = \mu_p$ y se define $t_f = \tau_p$; en caso contrario, se define $m = \max\{k : \mu \leq \mu_k\}$ y se toma $\mu = \mu_m$ y $t_f = \tau_m$.

- c) En el tercer escenario, suponemos que la función \tilde{T} se conoce en un intervalo $[t_0, t^*]$, en el que se verifica

$$\left\| T - \tilde{T} \right\|_{\mathcal{C}([t_0, t^*])} < \delta,$$

y que $\mu > \delta$ (en caso de que $\mu \leq \delta$ necesitaríamos aumentar el valor de μ). La elección de t_f se hará como sigue:

- Si $\tilde{T}(t) < T^e - \mu + \delta$ para todo $t \leq t^*$ (es decir, si los valores aproximados que tenemos de la temperatura están alejados de T^e) tomaremos $t_f = t^*$, pero deberemos aumentar el valor de μ y tomar $\mu = T^e - \tilde{T}(t^*) + \delta$.
- En caso contrario, se considera $t_f = \min\{t : \tilde{T}(t) = T^e - \mu + \delta\}$.

En resumen, tomamos

$$t_f = \begin{cases} t^*, & \text{si } \tilde{T}(t) < T^e - \mu + \delta \text{ para todo } t \leq t^* \\ \min\{t : \tilde{T}(t) = T^e - \mu + \delta\}, & \text{en caso contrario,} \end{cases} \quad (3.3)$$

con el valor de μ adecuado a cada caso. Nótese que, con esta elección de t_f , se tiene que

$$T(t) \geq T(t_f) \geq \tilde{T}(t_f) - \delta = T^e - \mu, \quad t \geq t_f;$$

es decir, los valores de la temperatura aproximada que no se utilizan (o que no se conocen) corresponden a instantes de tiempo en los que la temperatura exacta está fuera del rango en que trabajamos.

Observación 3.2.2 La elección de t_f y la monotonía de T hacen que se verifique, si $t \leq t_f$,

$$\begin{cases} T^e - T(t) \geq T^e - T(t_f) \geq T^e - \tilde{T}(t_f) - \delta = \mu - 2\delta \\ T^e - \tilde{T}(t) \geq T^e - T(t) - \delta \geq \mu - 3\delta. \end{cases} \quad (3.4)$$

Para garantizar que estas cotas inferiores sean positivas necesitaremos imponer al umbral la restricción $\mu > 3\delta$. \square

d) En el cuarto escenario, la elección del valor t_f se hará de una forma un poco más laboriosa. Los datos de partida son las mediciones \widehat{T}_k para las que suponemos que $|T(\tau_k) - \widehat{T}_k| < \widehat{\delta}$, con $\widehat{\delta} > 0$, donde $\{\tau_0 = t_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_p\}$ es una secuencia de instantes de tiempo. A partir de ellos se construye \widetilde{T} como una función interpoladora de los valores $\{\widehat{T}_0, \widehat{T}_1, \dots, \widehat{T}_p\}$ en los instantes $\{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_p\}$, y se considera $\delta > 0$ tal que

$$\left\| T - \widetilde{T} \right\|_{C([\tau_0, \tau_p])} < \delta.$$

Nuevamente, δ (que será mayor o igual que $\widehat{\delta}$) da cuenta del error cometido al aproximar la temperatura por una función que ahora interpola, no ya los valores de T , sino valores que son, a su vez, aproximaciones de los valores de T en los puntos τ_k .

A partir de esta función \widetilde{T} la elección de t_f se hace como en el escenario anterior.

3.3. Teoría de regularización. Algoritmos clásicos

En esta sección supondremos que el contexto en que trabajamos es el caso más general del cuarto escenario. Una vez determinado el valor de t_f , partimos del problema de valor inicial

$$\begin{cases} T'(t) = H(T(t))(T^e - T(t)), & t \in [t_0, t_f] \\ T(t_0) = T_0, \end{cases} \quad (3.5)$$

en el que se pretende determinar la función H continua y positiva, cuando se tiene una función \widetilde{T} (generada a partir de un número finito de mediciones, eventualmente, con error) que aproxima la temperatura T .

Con este objetivo, presentamos la teoría de regularización y dos algoritmos clásicos fundamentados en ella. Previamente, debemos plantear el problema inverso en un marco funcional adecuado, cuando los datos vienen dados sin error.

3.3.1. Marco funcional del problema inverso

A partir de la ecuación diferencial de (3.5), y denotando

$$u(t) = H(T(t)), \quad t \in [t_0, t_f],$$

se tiene que

$$\int_{t_0}^t u(s) ds = \int_{t_0}^t H(T(s)) ds = \int_{t_0}^t \frac{T'(s)}{T^e - T(s)} ds = -\ln \left(\frac{T^e - T(t)}{T^e - T_0} \right).$$

De esta forma, eligiendo unos espacios funcionales adecuados X e Y , y definiendo el operador $K : X \rightarrow Y$ mediante

$$Kx(t) = \int_{t_0}^t x(s) ds, \quad (3.6)$$

nuestro problema puede plantearse como

$$Ku = y$$

donde

$$y(t) = -\ln\left(\frac{T^e - T(t)}{T^e - T_0}\right), \quad t \in [t_0, t_f]. \quad (3.7)$$

Nótese que, gracias al Teorema 3.1.1, podemos afirmar que la función y está bien definida y es positiva (de hecho, es de clase uno).

Con vistas a aplicar la teoría clásica de regularización, la cual se enmarca en espacios de Hilbert (véanse [9], [35] y [42], por ejemplo), elegiremos $X = Y = L^2(t_0, t_f)$, siendo

$$L^2(t_0, t_f) = \left\{ f : (t_0, t_f) \rightarrow \mathbb{R} : \int_{t_0}^{t_f} (f(s))^2 ds < \infty \right\}.$$

También utilizaremos el espacio de Sobolev $H^1(t_0, t_f)$ de las funciones de cuadrado integrable cuya derivada en sentido de distribuciones (cf., por ejemplo, [4]) también lo es, i. e.,

$$H^1(t_0, t_f) = \{ f \in L^2(t_0, t_f) : f' \in L^2(t_0, t_f) \}.$$

La siguiente proposición recoge algunas de las propiedades del operador K . Previamente, enunciaremos un resultado (Teorema A.33 de [42, pág. 230]) que usaremos en la demostración de dicha proposición:

Teorema 3.3.1 *Sea $k \in L^2((c, d) \times (a, b))$. El operador $K : L^2(a, b) \rightarrow L^2(c, d)$ definido por*

$$Kx(t) = \int_a^b k(t, s)x(s) ds, \quad t \in (c, d), \quad x \in L^2(a, b),$$

es compacto de $L^2(a, b)$ en $L^2(c, d)$. \square

Proposición 3.3.2 *El operador $K : L^2(t_0, t_f) \rightarrow L^2(t_0, t_f)$ definido en (3.6) es lineal y compacto. Además:*

- $\|K\| \leq \frac{t_f - t_0}{\sqrt{2}}$. (Aquí $\|\cdot\|$ representa la norma en $\mathcal{L}(L^2(t_0, t_f), L^2(t_0, t_f))$).
- Para cada $x \in L^2(t_0, t_f)$ se verifica que $(Kx)' = x$; en consecuencia, $Kx \in H^1(t_0, t_f)$.
- El operador K es inyectivo.
- El rango de K es denso en $L^2(t_0, t_f)$.
- El adjunto de K es el operador $K^* : L^2(t_0, t_f) \rightarrow L^2(t_0, t_f)$ dado por

$$K^*y(t) = \int_t^{t_f} y(s) ds.$$

DEMOSTRACIÓN. Veamos, en primer lugar, que el operador K lleva las funciones de $L^2(t_0, t_f)$ en funciones de ese mismo espacio, por lo que está bien definido. Para ello, basta considerar $x \in L^2(t_0, t_f)$ y escribir

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_f} |Kx(t)|^2 dt &\leq \int_{t_0}^{t_f} \left(\int_{t_0}^t |x(s)| ds \right)^2 dt \leq \int_{t_0}^{t_f} \left(\int_{t_0}^t 1^2 ds \right) \left(\int_{t_0}^t |x(s)|^2 ds \right) dt \\ &\leq \int_{t_0}^{t_f} (t - t_0) \left(\int_{t_0}^{t_f} |x(s)|^2 ds \right) dt = \frac{(t_f - t_0)^2}{2} \|x\|_{L^2(t_0, t_f)}^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Por otra parte, es claro que el operador K es lineal. Que es compacto se deduce directamente del Teorema 3.3.1, tomando como la función $k(t, s)$ que en él aparece, para cada $t \in (t_0, t_f)$, la función característica del intervalo (t_0, t) , i. e.,

$$k(t, s) = \begin{cases} 1, & t_0 < s < t \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Probemos el resto de propiedades:

- a) Es consecuencia directa de la desigualdad (3.8).
- b) Demostremos que la derivada generalizada de Kx es $x \in L^2(t_0, t_f)$. Para ello, consideramos $\mathcal{C}_c^\infty(t_0, t_f)$, el espacio de las funciones infinitamente derivables con soporte compacto en (t_0, t_f) ; para cada función test $\varphi \in \mathcal{C}_c^\infty(t_0, t_f)$ se tiene que

$$\langle (Kx)', \varphi \rangle = -\langle Kx, \varphi' \rangle = -\int_{t_0}^{t_f} \left(\int_{t_0}^t x(s) ds \right) \varphi'(t) dt = \int_{t_0}^{t_f} x(t) \varphi(t) dt = \langle x, \varphi \rangle.$$

Aquí estamos usando la notación habitual $\langle \cdot, \cdot \rangle$ para denotar el producto de dualidad entre el espacio de las distribuciones en (t_0, t_f) y el espacio de funciones test $\mathcal{C}_c^\infty(t_0, t_f)$.

- c) El operador K es inyectivo puesto que, si $x \in L^2(t_0, t_f)$, se tiene que:

$$Kx = 0 \Rightarrow (Kx)' = 0 \Rightarrow x = 0.$$

- d) Claramente, el rango de K es el conjunto

$$R(K) = \{v \in H^1(t_0, t_f) : v(t_0) = 0\} \supset \mathcal{C}_c^\infty(t_0, t_f).$$

El resultado se sigue teniendo en cuenta la densidad de $\mathcal{C}_c^\infty(t_0, t_f)$ en $L^2(t_0, t_f)$ (cf., por ejemplo, [4]).

- e) Dado $y \in L^2(t_0, t_f)$, consideramos

$$Y(t) = \int_{t_f}^t y(s) ds.$$

Razonando como en a) se tiene que la derivada generalizada de Y verifica $Y' = y$. Así, para cada $u \in L^2(t_0, t_f)$, puesto que tanto Y como Ku están en $H^1(t_0, t_f)$, podemos escribir

$$\begin{aligned} (Ku, y)_{L^2(t_0, t_f)} &= \int_{t_0}^{t_f} \left(\int_{t_0}^t u(s) ds \right) y(t) dt = \left(\int_{t_0}^t u(s) ds \right) Y(t) \Big|_{t_0}^{t_f} - \int_{t_0}^{t_f} u(t) Y(t) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_f} u(t) (-Y(t)) dt = (u, -Y)_{L^2(t_0, t_f)}. \end{aligned}$$

Por tanto,

$$K^*y(t) = -Y(t) = \int_t^{t_f} y(s) ds. \quad \square$$

Recuperando ahora el problema original en el que nuestros datos son valores de la temperatura afectados de un cierto error, partimos de unas mediciones \hat{T}_k tales que $|T(\tau_k) - \hat{T}_k| < \hat{\delta}$, y una función interpoladora de ellas \tilde{T} de forma que

$$\|T - \tilde{T}\|_{C([t_0, t_f])} < \delta.$$

Esto nos proporcionará un segundo miembro

$$y_\delta(t) = -\ln\left(\frac{T^e - \tilde{T}(t)}{T^e - T_0}\right) \quad (3.9)$$

para el problema aproximado

$$Ku_\delta = y_\delta.$$

Observación 3.3.3 La segunda acotación de (3.4) nos permite asegurar que si la interpolación \tilde{T} es regular (por ejemplo, lineal a trozos) entonces $y_\delta \in H^1(t_0, t_f)$ (y es, por tanto, continua). Como el valor de la medición de la temperatura en el instante inicial es, obviamente, T_0 , se tiene que $y_\delta(t_0) = 0$ y, por tanto, que y_δ está en el rango de K . \square

El siguiente resultado da cuenta de cómo aproxima y_δ a y en función de cómo sea la aproximación de \tilde{T} a T .

Proposición 3.3.4 Consideremos las funciones y e y_δ dadas en (3.7) y (3.9), respectivamente, y supongamos que $\mu > 3\delta$ (véase la Observación 3.2.2). Entonces

$$\|y - y_\delta\|_{C([t_0, t_f])} < \frac{\delta}{\mu - 3\delta}.$$

En consecuencia,

$$\|y - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)} < e(\delta),$$

siendo

$$e(\delta) = \frac{\sqrt{t_f - t_0}}{\mu - 3\delta} \delta. \quad (3.10)$$

DEMOSTRACIÓN. A partir de la definición de las funciones y e y_δ , y evaluando en el punto $\tilde{T}(t)$ el desarrollo de Taylor de primer orden de la función $s \mapsto \ln(T^e - s)$ alrededor del punto $T(t)$, para cada $t \in [t_0, t_f]$ se tiene que

$$|y(t) - y_\delta(t)| = \left| \ln(T^e - \tilde{T}(t)) - \ln(T^e - T(t)) \right| = \left| \frac{T(t) - \tilde{T}(t)}{T^e - T_\theta} \right|,$$

donde T_θ es un valor intermedio entre $T(t)$ y $\tilde{T}(t)$ que expresamos en la forma

$$T_\theta = \theta T(t) + (1 - \theta)\tilde{T}(t),$$

con $0 < \theta < 1$.

Usando ahora las estimaciones (3.4), podemos escribir

$$\begin{aligned} T^e - T_\theta &= \theta(T^e - T(t)) + (1 - \theta)(T^e - \tilde{T}(t)) \\ &\geq \theta(\mu - 2\delta) + (1 - \theta)(\mu - 3\delta) \\ &= \mu - (3 - \theta)\delta > \mu - 3\delta, \end{aligned}$$

por lo que

$$|y(t) - y_\delta(t)| < \frac{|T(t) - \tilde{T}(t)|}{\mu - 3\delta} \leq \frac{\delta}{\mu - 3\delta},$$

obteniéndose la primera acotación.

La segunda acotación se deduce sin más que tomar norma en $L^2(t_0, t_f)$ en la anterior desigualdad. \square

Observación 3.3.5 Nótese que $e(\delta)$ es una $O(\delta)$, es decir, $e(\delta)$ y δ tienen el mismo orden de convergencia a cero. \square

3.3.2. Estrategias de regularización

Antes de desarrollar la estrategias de regularización para nuestro problema en concreto, es conveniente introducir alguna terminología que ayudará a entender el contexto en que éstas se plantean; las definiciones y resultados principales pueden encontrarse en el libro de A. Kirsch [42].

En primer lugar, definimos el concepto de estrategia de regularización, lo cual no es más que una sucesión de operadores que, en algún sentido, converja al inverso del operador que rija el problema.

Definición 3.3.6 Sean X, Y espacios de Hilbert y $\mathcal{K} : X \rightarrow Y$ un operador lineal, compacto e inyectivo. Se denomina *estrategia de regularización* del operador \mathcal{K} a una familia de operadores lineales acotados

$$R_\alpha : Y \rightarrow X, \quad \alpha > 0,$$

tales que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} R_\alpha \mathcal{K} x = x$$

para todo $x \in X$. Es decir, $R_\alpha \mathcal{K}$ converge puntualmente a la identidad cuando α tiende a 0. \square

Estas familias de operadores regularizantes se utilizan del siguiente modo: Cuando se pretende resolver el problema $\mathcal{K}x = y$, pero en lugar del dato exacto y se tiene una aproximación y_δ con $\|y - y_\delta\|_Y \leq \delta$, se definen las soluciones aproximadas

$$x_{\alpha, \delta} = R_\alpha y_\delta.$$

La idea es elegir los operadores R_α y $\alpha = \alpha(\delta)$, tendiendo a cero cuando lo hace δ , de forma que $\|x_{\alpha(\delta), \delta} - x\|_X$ tienda a cero con δ . Esto da pie a la siguiente definición:

Definición 3.3.7 Una estrategia de regularización asociada al parámetro $\alpha = \alpha(\delta)$ se dice *admisible* si

- $\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0$.
- $\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{y_\delta \in Y} \{ \|R_{\alpha(\delta)} y_\delta - x\|_X : \|Kx - y_\delta\|_Y \leq \delta \} = 0$, para cada x en X . \square

Observación 3.3.8 Puesto que

$$\|x_{\alpha, \delta} - x\|_X \leq \|R_\alpha y_\delta - R_\alpha y\|_X + \|R_\alpha y - x\|_X \leq \delta \|R_\alpha\| + \|R_\alpha \mathcal{K} x - x\|_X, \quad (3.11)$$

una forma de conseguir una estrategia de regularización admisible es elegir $R_{\alpha(\delta)}$, con $\alpha(\delta)$ tendiendo a cero con δ , e intentar minimizar la cota superior en (3.11) respecto a α . Puede probarse (cf. Teorema 2.2 de [42, pág. 25]) que $\|R_{\alpha(\delta)}\|$ tiende a infinito cuando δ tiende a cero; el argumento para decidir la elección es que esta convergencia sea de orden δ^{-s} con $0 < s < 1$, habida cuenta de que $\|R_{\alpha(\delta)}\mathcal{K}x - x\|_X$ converge a cero cuando δ tiende a cero, por la propia definición de estrategia de regularización. \square

Regularización de Tikhonov. Principio de discrepancia de Morozov

La estrategia introducida por Tikhonov (véase, v. gr., [71] o [72]) para resolver un problema como el que nos planteamos,

$$Ku_\delta = y_\delta,$$

consiste en minimizar el denominado funcional de Tikhonov

$$J_\alpha(x) = \|Kx - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)}^2 + \alpha \|x\|_{L^2(t_0, t_f)}^2 \quad (3.12)$$

con $\alpha = \alpha(\delta) > 0$ elegido adecuadamente (véanse la Observación 3.3.12 y el Principio de discrepancia de Morozov, más adelante). El funcional (3.12) tiene un único mínimo $u_{\alpha, \delta}$ que es, a su vez, la única solución de la ecuación de Tikhonov

$$(\alpha I + K^*K)x = K^*y_\delta \quad (3.13)$$

(cf. el Teorema 2.11 de [42, pág. 38]). En este caso, la estrategia de regularización viene dada por la familia de operadores lineales

$$R_\alpha : L^2(t_0, t_f) \rightarrow L^2(t_0, t_f)$$

definidos como

$$R_\alpha y = (\alpha I + K^*K)^{-1}K^*y. \quad (3.14)$$

Observación 3.3.9 Nótese que si se toma $\alpha = 0$ en la ecuación (3.13) se obtienen las ecuaciones normales del operador K , asociadas a la minimización del funcional (cuadrático) J_0 , minimización que constituye un problema mal planteado en el sentido de Hadamard, puesto que no hay continuidad de la solución respecto a los datos (cf. el Lema 2.10 de [42, pág. 37]). Ésta es la razón de que se introduzca esta penalización en términos de α . \square

Veamos que la solución de (3.13) es, a su vez, solución de un problema de contorno de segundo orden.

Proposición 3.3.10 *La solución $u_{\alpha, \delta}$ de la ecuación de Tikhonov (3.13) es solución del problema de contorno*

$$\begin{cases} -\alpha x''(t) + x(t) = y'_\delta(t), & t \in (t_0, t_f) \\ x'(t_0) = 0 \\ x(t_f) = 0. \end{cases} \quad (3.15)$$

Además, si denotamos por $\gamma(r) = \frac{t_f - r}{\sqrt{\alpha}}$, dicha solución puede escribirse como

$$u_{\alpha, \delta}(t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(\varphi_{\alpha, \delta}(t) \cosh \gamma(t) + \psi_{\alpha, \delta}(t) \sinh \gamma(t) \right), \quad (3.16)$$

siendo

$$\begin{cases} \varphi_{\alpha,\delta}(t) = \int_t^{t_f} y'_\delta(s) \sinh \gamma(s) ds \\ \psi_{\alpha,\delta}(t) = \int_{t_0}^t y'_\delta(s) \cosh \gamma(s) ds - \tanh \gamma(t_0) \varphi_{\alpha,\delta}(t_0). \end{cases}$$

DEMOSTRACIÓN. A partir de la Proposición 3.3.2, la ecuación (3.13) se escribe como

$$\alpha x(t) + \int_t^{t_f} \left(\int_{t_0}^s x(\tau) d\tau \right) ds = \int_t^{t_f} y_\delta(s) ds,$$

de donde se deduce, en primer lugar, que $x(t_f) = 0$. Además, como $y_\delta \in H^1(t_0, t_f)$ e $y_\delta(t_0) = 0$ (véase la Observación 3.3.3), podemos derivar la expresión anterior para obtener

$$\alpha x'(t) - \int_{t_0}^t x(s) ds = -y_\delta(t),$$

con lo que, en particular, $x'(t_0) = -y'_\delta(t_0) = 0$. Derivando nuevamente, se concluye que

$$\alpha x''(t) - x(t) = -y'_\delta(t),$$

de donde se deduce que x es solución del problema (3.15).

La expresión de la solución (3.16) se obtiene utilizando (tediosas) técnicas estándar de resolución de problemas de contorno en dimensión uno. \square

Enunciamos a continuación un resultado que da idea de cómo conseguir que la estrategia de regularización de Tikhonov sea admisible:

Teorema 3.3.11 Sea $\mathcal{K} : X \rightarrow Y$ un operador lineal y compacto. Si se elige $\alpha = \alpha(\delta)$ verificando

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0 \text{ y } \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta^2}{\alpha(\delta)} = 0,$$

entonces la estrategia de regularización de Tikhonov para \mathcal{K} ,

$$R_\alpha = (\alpha I + \mathcal{K}^* \mathcal{K})^{-1} \mathcal{K}^*,$$

es admisible.

DEMOSTRACIÓN. Véase el Teorema 2.12 de [42, pág. 39]. \square

Observación 3.3.12 Puesto que el operador K es lineal y compacto (cf. la Proposición 3.3.2), aplicando el Teorema 3.3.11 obtenemos que si se elige $\alpha = \alpha(\delta)$ de forma que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0 \text{ y } \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{(e(\delta))^2}{\alpha(\delta)} = 0,$$

entonces la estrategia de regularización de Tikhonov para K es admisible. Por tanto, se verifica que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|u_{\alpha(\delta),\delta} - u\|_{L^2(t_0, t_f)} = 0$$

ya que, gracias a la Proposición 3.3.4, se tiene que $\|y - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)} < e(\delta)$. \square

Observación 3.3.13 Nótese que, cualquiera que sea $\alpha \neq 0$, la solución del problema (3.16) se anula en t_f . Esto es así porque la condición de contorno es, en realidad,

$$\alpha x(t_f) = 0.$$

El hecho de que la solución aproximada se anule en el instante final es un mal condicionante para todas las aproximaciones que se basen en la estrategia de Tikhonov, pues la solución sin error no verifica, en general, esta propiedad. Esto hace que, aunque el error en $L^2(t_0, t_f)$ sea pequeño, el error en $\mathcal{C}([t_0, t_f])$ con la norma del supremo pueda ser grande. Trataremos de evitar ese problema con una metodología alternativa que desarrollaremos en la Sección 3.4. \square

El principio de discrepancia de Morozov (véase [55]) determina una forma de elegir el parámetro $\alpha = \alpha(\delta)$ en la estrategia de regulación de Tikhonov. En concreto, se trata de elegir $\alpha(\delta)$ de forma que la solución $u_{\alpha(\delta), \delta}$ de la ecuación (3.13), dada por la expresión (3.16), verifique que

$$\|Ku_{\alpha(\delta), \delta} - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)} = e(\delta) \quad (3.17)$$

supuesto que

$$\|y - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)} < e(\delta) < \|y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)}.$$

En esta situación, los Teoremas 2.16 y 2.17 de [42, pág. 48 y ss.] aseguran que existe un único α que verifique (3.17) y de forma que la estrategia de regularización definida por los operadores (3.14) asociados a esta elección de α sea admisible.

Así pues, gracias a este principio, la solución de nuestro problema para los datos y_δ descritos en (3.9) vendrá dada por la fórmula (3.16) cuando se elige α como la única raíz de la función

$$F(\alpha) = \|Ku_\alpha - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)}^2 - (e(\delta))^2,$$

donde u_α , y_δ y $e(\delta)$ vienen dados por (3.16), (3.9) y (3.10), respectivamente.

Como se verá en la Sección 3.5, utilizaremos el método de la secante para aproximar numéricamente la (única) solución de esta ecuación no lineal.

Otras metodologías para la elección del parámetro α de forma que la regularización de Tikhonov siga produciendo una estrategia admisible (por ejemplo, el método de la L-curva) pueden encontrarse en trabajos como [22] y [23].

Método iterativo de Landweber

El método iterativo introducido por Landweber en [45] viene dado por

$$\begin{cases} x_0 = 0 \\ x_m = (I - a\mathcal{K}^*\mathcal{K})x_{m-1} + a\mathcal{K}^*y, \quad m = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (3.18)$$

donde a es un número real positivo. Esta iteración puede verse como la correspondiente a un método de gradiente con paso a , aplicado a la minimización del funcional $\psi : X \rightarrow \mathbb{R}$ definido por

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \|\mathcal{K}x - y\|_Y^2.$$

Por otra parte, es muy sencillo probar por inducción que la iteración (3.18) permite escribir $x_m = R_m y$, donde los operadores $R_m : Y \rightarrow X$ están definidos por

$$R_m = a \sum_{k=0}^{m-1} (I - a\mathcal{K}^*\mathcal{K})^k \mathcal{K}^*.$$

De esta forma, el método de Landweber queda también enmarcado en el contexto de las estrategias de regularización.

En nuestro problema asociado al operador K , siguiendo el Teorema 2.19 de [42, pág. 53], tomaremos un parámetro a que verifique

$$0 < a < \frac{1}{\|K\|^2} \quad (3.19)$$

y usaremos como test de parada de las iteraciones el hecho de que

$$\|Kx_m - y_\delta\|_{L^2(t_0, t_f)}^2 \leq r(e(\delta))^2$$

siendo $r > 1$ tal que

$$\|y_\delta\| \geq re(\delta).$$

Observación 3.3.14 La acotación de $\|K\|$ dada en el apartado a) de la Proposición 3.3.2 permite asegurar que si se elige el parámetro a verificando

$$0 < a < \frac{2}{(t_f - t_0)^2}$$

se cumplirá la condición (3.19). \square

Observación 3.3.15 Hay que destacar que, puesto que $x_0(t_f) = 0$, y al aplicar K^* a cualquier función, la imagen se anula en t_f , todas las iteraciones de Landweber verificarán también

$$x_m(t_f) = 0.$$

Nuevamente, las aproximaciones que se obtengan mediante este método tendrán esta “mala” propiedad. \square

3.4. Un algoritmo numérico para la identificación

Presentamos en esta sección la adaptación al problema que ahora nos ocupa de los argumentos desarrollados en la Sección 2.4. Como allí se hizo, recogemos las distintas formas de abordar el problema de identificar el coeficiente H en función de la información que se tenga de la temperatura, es decir, del escenario en que se plantee el problema inverso; en el tratamiento del cuarto escenario se describe un algoritmo iterativo que proporcionará una aproximación de H . En todos los casos, supondremos que se ha fijado el valor de t_f según lo prescrito en la Sección 3.2 y, por tanto, el problema directo se plantea en la forma (3.5).

3.4.1. Identificación a partir de una cantidad finita de valores exactos de la temperatura

Partimos de $n \in \mathbb{N}$ valores de la temperatura $T_k = T(t_k)$ que se suponen conocidos; aquí $t_k = t_0 + kh$ para $k = 0, 1, \dots, n$, donde $h = \frac{t_f - t_0}{n}$.

Teniendo en cuenta que la ecuación diferencial del problema (3.1) puede reescribirse como

$$\frac{T'(t)}{T^e - T(t)} = H(T(t)), \quad t_0 < t < t_f,$$

nuestro objetivo será encontrar, para $k = 0, 1, \dots, n$, valores \tilde{H}_k que aproximen los cocientes

$$\frac{T'(t_k)}{T^e - T(t_k)}$$

o, lo que es lo mismo, que aproximen $H(T_k)$. Para ello, consideraremos los cocientes

$$\tilde{H}_k = \frac{R_h(T)(t_k)}{T^e - T_k}$$

para $k = 0, 1, \dots, n$; de nuevo tomamos como R_h el operador de derivación aproximada introducido en el apartado 2.4.1 y que reproducimos a continuación:

$$R_h(v)(t) = \begin{cases} \frac{-3v(t) + 4v(t+h) - v(t+2h)}{2h} + \Psi_h(v)(t_0), & t \in [t_0, t_0 + h] \\ \frac{v(t+h) - v(t-h)}{2h}, & t \in [t_0 + h, t_f - h] \\ \frac{3v(t) - 4v(t-h) + v(t-2h)}{2h} + \Psi_h(v)(t_f - 3h), & t \in [t_f - h, t_f] \end{cases}$$

donde

$$\Psi_h(v)(t) = \frac{v(t+3h) - 3v(t+2h) + 3v(t+h) - v(t)}{2h}.$$

Para los valores de \tilde{H}_k así definidos se verifica la siguiente acotación del error:

Proposición 3.4.1 Si $T \in \mathcal{C}^3([t_0, t_f])$ entonces

$$\max_{k=0,1,\dots,n} |H(T_k) - \tilde{H}_k| \leq \frac{29M_3}{6\mu} h^2, \quad (3.20)$$

donde $M_3 = \|T'''\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])}$.

DEMOSTRACIÓN. La monotonía de T implica que

$$T^e - T_k \geq T^e - T(t_f) = \mu.$$

Por tanto, basta aplicar el Lema 2.4.2 para tener el resultado. \square

3.4.2. Identificación a partir de una función que aproxime la temperatura

Recordemos que en este escenario se supone conocida una función $\tilde{T} \in \mathcal{C}([t_0, t_f])$ con

$$\|T - \tilde{T}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} < \delta \quad (3.21)$$

para algún $\delta \in (0, \mu)$. Por simplicidad y consistencia con las propiedades de T , asumiremos que $\tilde{T}(t) \geq T_0$, $t \in [t_0, t_f]$ (en otro caso, bastaría truncar $\tilde{T}(t)$ por T_0 o despreciar las mediciones que estén por debajo de la temperatura inicial). Definiendo

$$u(t) = \frac{T'(t)}{T^e - T(t)}, \quad t_0 < t < t_f$$

y su aproximación

$$\tilde{u}_h(t) = \frac{R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)}, \quad t_0 < t < t_f,$$

obtenemos la estimación del error análoga a la de la Proposición 2.4.6:

Proposición 3.4.2 Sean $T \in C^3([t_0, t_f])$ y $\tilde{T} \in C([t_0, t_f])$ verificando (3.21) con $0 < \delta < \frac{\mu}{3}$. Entonces,

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{C([t_0, t_f])} \leq \frac{1}{\mu - 2\delta} \left(\frac{29M_3}{6} h^2 + \frac{4\delta}{h} \frac{T^e - T_0 + \mu - 2\delta}{\mu - 3\delta} \right). \quad (3.22)$$

DEMOSTRACIÓN. La demostración discurre paralelamente a la de la Proposición 2.4.6, sin más que utilizar las acotaciones (3.4) y el hecho de que los valores menor y mayor de \tilde{T} son T_0 y $T^e + \delta$, respectivamente.

Escribiendo

$$u(t) - \tilde{u}_h(t) = \frac{T'(t) - R_h(T)(t)}{T^e - T(t)} + R_h(T)(t) \frac{T(t) - \tilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \tilde{T}(t))} + \frac{R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)},$$

el primer sumando se acota, gracias al Lema 2.4.2, por

$$\frac{29h^2}{6(T^e - T(t))} \|T'''\|_{C([t_0, t_f])} \leq \frac{29M_3}{6(\mu - 2\delta)} h^2.$$

El segundo y tercer sumandos se tratan en función de los intervalos de definición del operador R_h :

a) Cuando $t \in [t_0 + h, t_f - h]$ tenemos

$$|R_h(T)(t)| \leq \frac{T(t_f) - T_0}{2h} \leq \frac{\tilde{T}(t_f) + \delta - T_0}{2h} = \frac{T^e - T_0 - \mu + 2\delta}{2h}.$$

Así pues,

$$\begin{aligned} \left| R_h(T)(t) \frac{T(t) - \tilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \tilde{T}(t))} \right| &\leq \frac{T^e - T_0 - \mu + 2\delta}{2h} \frac{\delta}{(\mu - 2\delta)(\mu - 3\delta)} \\ &= \frac{\delta}{2(\mu - 3\delta)h} \left(\frac{T^e - T_0}{\mu - 2\delta} - 1 \right). \end{aligned}$$

Por otra parte,

$$\left| R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t) \right| \leq \frac{1}{2h} \left(\left| T(t+h) - \tilde{T}(t+h) \right| + \left| T(t-h) - \tilde{T}(t-h) \right| \right) \leq \frac{\delta}{h},$$

y, con ello,

$$\left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| \leq \frac{1}{h} \frac{\delta}{\mu - 3\delta}.$$

b) En el intervalo $[t_0, t_0 + h]$ se tiene

$$\begin{aligned} |R_h(T)(t)| &\leq \left| \frac{-3T(t) + 4T(t+h) - T(t+2h)}{2h} \right| + |\Psi_h(T)(t_0)| \\ &\leq \frac{4(T(t_f) - T_0)}{2h} + \frac{4(T(t_f) - T_0)}{2h} \\ &\leq \frac{4(\tilde{T}(t_f) + \delta - T_0)}{h} = \frac{4(T^e - T_0 - \mu + 2\delta)}{h}. \end{aligned}$$

Consecuentemente,

$$\begin{aligned} \left| R_h(T)(t) \frac{T(t) - \tilde{T}(t)}{(T^e - T(t))(T^e - \tilde{T}(t))} \right| &\leq \frac{4(T^e - T_0 - \mu + 2\delta)}{h} \frac{\delta}{(\mu - 2\delta)(\mu - 3\delta)} \\ &= \frac{4\delta}{(\mu - 3\delta)h} \left(\frac{T^e - T_0}{\mu - 2\delta} - 1 \right). \end{aligned}$$

En cuanto al tercer sumando, teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} \left| R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t) \right| &\leq \frac{3|T(t) - \tilde{T}(t)|}{2h} + \frac{4|T(t+h) - \tilde{T}(t+h)|}{2h} \\ &\quad + \frac{|T(t+2h) - \tilde{T}(t+2h)|}{2h} + \left| \Psi_h(T)(t_0) - \Psi_h(\tilde{T})(t_0) \right| \\ &\leq \frac{8\delta}{h}, \end{aligned}$$

se concluye

$$\left| \frac{R_h(T)(t) - R_h(\tilde{T})(t)}{T^e - \tilde{T}(t)} \right| \leq \frac{1}{h} \frac{8\delta}{\mu - 3\delta}.$$

- c) Finalmente, si $t \in [t_f - h, t_f]$ se obtienen las mismas acotaciones que en el primer intervalo $[t_0, t_0 + h]$.

Reuniendo estas desigualdades obtenemos

$$\begin{aligned} \|u - \tilde{u}_h\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} &\leq \frac{29M_3}{6(\mu - 2\delta)} h^2 + \frac{4\delta}{(\mu - 3\delta)h} \left(\frac{T^e - T_0}{\mu - 2\delta} - 1 \right) + \frac{8\delta}{(\mu - 3\delta)h} \\ &\leq \frac{29M_3}{6(\mu - 2\delta)} h^2 + \frac{4\delta}{(\mu - 3\delta)h} \left(1 + \frac{T^e - T_0}{\mu - 2\delta} \right) \\ &= \frac{1}{\mu - 2\delta} \left(\frac{29M_3}{6} h^2 + \frac{4\delta}{h} \frac{T^e - T_0 + \mu - 2\delta}{\mu - 3\delta} \right). \quad \square \end{aligned}$$

Observación 3.4.3 Tiene interés comparar la acotación (3.22) con la acotación (3.11) relativa a la estrategias de regularización, que se analiza en la Observación 3.3.8, aunque el marco funcional sea distinto, puesto que la teoría de regularización se ha planteado en espacios de Hilbert.

Consideremos el operador

$$K : \mathcal{C}([t_0, t_f]) \rightarrow \mathcal{C}([t_0, t_f])$$

que a cada función u le hace corresponder la solución del problema

$$\begin{cases} T'(t) = u(t)(T^e - T(t)), & t \in [t_0, t_f] \\ T(t_0) = T_0, \end{cases}$$

es decir, $Ku = T$, donde

$$T(t) = T^e - (T^e - T_0)e^{-\int_{t_0}^t u(s) ds}.$$

Definimos la familia de operadores

$$\mathcal{R}_h : \mathcal{C}([t_0, t_f]) \rightarrow \mathcal{C}([t_0, t_f])$$

mediante

$$\mathcal{R}_h y = \frac{R_h(I_h(y))}{T^e - I_h(y)},$$

donde I_h es el operador de interpolación que estamos usando para construir \tilde{T} . Si este operador de interpolación verifica

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|I_h(y) - y\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} = 0, \quad y \in \mathcal{C}([t_0, t_f])$$

(esto ocurre si, por ejemplo, se trabaja con interpolación lineal a trozos), dicha familia constituye una estrategia de regularización del operador K (aquí h juega el papel del parámetro de regularización α de la Definición 3.3.6). Así pues, el algoritmo que estamos considerando en esta sección puede pensarse en el marco de la teoría de regularización, aunque trabajando en este caso con el espacio de las funciones continuas.

La cantidad

$$\frac{1}{\mu - 2\delta} \left(\frac{29M_3}{6} h^2 \right)$$

en (3.22) es la correspondiente $\|\mathcal{R}_h K u - u\|$ de (3.11). Asimismo, el factor que aparece multiplicando a δ en (3.22) se corresponde con el término $\|\mathcal{R}_h\|$ de (3.11).

En consecuencia, como se decía en la Observación 3.3.8, la idea será elegir h en función de δ de forma que se minimice el valor de la cota obtenido en (3.22). \square

El siguiente resultado versa sobre esta minimización:

Proposición 3.4.4 *Bajo las hipótesis de la Proposición 3.4.2, el valor mínimo del segundo miembro de la desigualdad (3.22) se obtiene cuando se toma como paso temporal*

$$h^* = \left(\frac{12(T^e - T_0 + \mu - 2\delta)}{29(\mu - 3\delta)M_3} \delta \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.23)$$

En este caso, la acotación (3.22) se escribe

$$\|u - \tilde{u}_{h^*}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} \leq \frac{1}{\mu - 2\delta} \left(522M_3 \frac{(T^e - T_0 + \mu - 2\delta)^2}{(\mu - 3\delta)^2} \delta^2 \right)^{\frac{1}{3}}.$$

DEMOSTRACIÓN. La demostración es la misma que la de la Proposición 2.4.7, tomando

$$a = \frac{29M_3}{6}, \quad b = 4\delta \left(\frac{T^e - T_0 + \mu - 2\delta}{\mu - 3\delta} \right) \quad \text{y} \quad c = \frac{1}{\mu - 2\delta}. \quad \square$$

Observación 3.4.5 Situándonos de nuevo en el contexto de la teoría de regularización, el resultado anterior demuestra que la familia de operadores \mathcal{R}_h definida en la Observación 3.4.3 constituye una estrategia de regularización admisible siempre que se tome h en función de δ según la relación (3.23). \square

Eligiendo h^* como en (3.23), tomando n como la parte entera de $\frac{t_f - t_0}{h^*}$ y con la notación correspondiente, $t_k = t_0 + kh^*$, $\tilde{T}_k = \tilde{T}(t_k)$ y

$$\tilde{H}_k = \tilde{u}_{h^*}(t_k) = \frac{R_{h^*}(\tilde{T})(t_k)}{T^e - \tilde{T}_k}$$

para $k = 0, 1, \dots, n$, podemos enunciar el principal resultado de esta sección:

Teorema 3.4.6 Si $H \in \mathcal{C}^1([T_0, T^e])$ y $\tilde{T} \in \mathcal{C}([t_0, t_f])$ satisface (3.21) con $0 < \delta < \frac{\mu}{3}$, entonces

$$\max_{k=0,1,\dots,n} \left| H(\tilde{T}_k) - \tilde{H}_k \right| \leq \delta \|H'\|_{\mathcal{C}([T_0, T^e])} + \frac{1}{\mu - 2\delta} \left(522M_3 \frac{(T^e - T_0 + \mu - 2\delta)^2}{(\mu - 3\delta)^2} \delta^2 \right)^{\frac{1}{3}}.$$

DEMOSTRACIÓN. Mediante la desigualdad triangular obtenemos

$$\begin{aligned} \left| H(\tilde{T}_k) - \tilde{H}_k \right| &\leq \left| H(\tilde{T}_k) - H(T_k) \right| + \left| H(T_k) - \tilde{H}_k \right| \\ &\leq \|H'\|_{\mathcal{C}([T_0, T^e])} \left\| T - \tilde{T} \right\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} + \|u - \tilde{u}_{h^*}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])}. \end{aligned}$$

El resultado se completa sin más que tener en cuenta la Proposición 3.4.4. \square

Observación 3.4.7 Al igual que ocurría en el Capítulo 2, el error cometido es de orden $\delta^{\frac{2}{3}}$. Por otra parte, también ahora será necesario aproximar el valor óptimo h^* del paso temporal; con este objetivo, diseñaremos un algoritmo iterativo en el próximo apartado. \square

3.4.3. Identificación a partir de una cantidad finita de valores aproximados de la temperatura

Nos adentramos finalmente en el cuarto escenario, en el que disponemos de mediciones experimentales de la temperatura $\{\hat{T}_0, \hat{T}_1, \dots, \hat{T}_p\}$ que están afectadas por un error de tamaño $\hat{\delta}$. Vamos a trabajar con la hipótesis de que el método de interpolación utilizado para obtener la función \tilde{T} a partir de estos valores es tal que el error δ entre T y \tilde{T} es del mismo orden que el error de medición, i. e., $\delta = C\hat{\delta}$.

Por ejemplo, si \tilde{T} es la interpolación lineal a trozos de las mediciones y llamamos T_{int} a la interpolación lineal a trozos de los valores que T toma en los instantes τ_k de medición, la monotonía de T permite escribir

$$\begin{aligned} \left\| T - \tilde{T} \right\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} &\leq \|T - T_{\text{int}}\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} + \left\| T_{\text{int}} - \tilde{T} \right\|_{\mathcal{C}([t_0, t_f])} \\ &\leq \max_{1 \leq k \leq p} |T(\tau_k) - T(\tau_{k-1})| + \hat{\delta} \\ &\leq \max_{1 \leq k \leq p} \left(|\tilde{T}(\tau_k) - \tilde{T}(\tau_{k-1})| + 2\hat{\delta} \right) + \hat{\delta} \\ &= \max_{1 \leq k \leq p} |\hat{T}_k - \hat{T}_{k-1}| + 3\hat{\delta}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, cuando se usa este tipo de interpolación, δ y $\hat{\delta}$ son del mismo orden siempre que la diferencia entre dos medidas consecutivas sea del orden de $\hat{\delta}$, lo cual es una hipótesis bastante razonable, si bien puede requerir un incremento del número de mediciones.

Algoritmo para la determinación de la función H

El algoritmo que se propone es una adaptación del que se introduce en el apartado 2.4.3, con ligeras modificaciones. Aún así, las sutiles diferencias en su aplicación nos llevan a describirlo con todo detalle.

Suponemos conocidas las mediciones $\{\widehat{T}_0, \widehat{T}_1, \dots, \widehat{T}_p\}$, una cota del error de medida $\widehat{\delta}$ y el umbral admisible $\mu > 0$. El algoritmo que se propone comienza con la construcción de la función \widetilde{T} que interpola los valores $\{\widehat{T}_k\}_{k=0}^p$, tras lo que se determinará una cota, $\delta > 0$, del error cometido en dicha interpolación. Mediante los valores δ y μ se determina el tiempo final t_f utilizando la relación (3.3).

Tras ello, comienza un proceso iterativo en el que se parte de un valor tentativo inicial del paso temporal h . A partir de él, se definen los instantes $t_k = t_0 + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$, siendo n la parte entera de $\frac{t_f - t_0}{h}$, y se obtienen los valores $\widetilde{T}_k = \widetilde{T}(t_k)$.

A continuación, se calcula Λ_3 , aproximación de la norma infinito de la derivada tercera de la temperatura, como el máximo, en valor absoluto, de las cantidades

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{-5\widetilde{T}_k + 18\widetilde{T}_{k+1} - 24\widetilde{T}_{k+2} + 14\widetilde{T}_{k+3} - 3\widetilde{T}_{k+4}}{2h^3}, & k = 0, 1 \\ \frac{\widetilde{T}_{k+2} - 2\widetilde{T}_{k+1} + 2\widetilde{T}_{k-1} - \widetilde{T}_{k-2}}{2h^3}, & k = 2, 3, \dots, n. \end{array} \right. \quad (3.24)$$

Los valores $\widetilde{T}_{n+1} = \widetilde{T}(t_{n+1})$ y $\widetilde{T}_{n+2} = \widetilde{T}(t_{n+2})$ estarán definidos si la elección de t_f ha dejado fuera suficientes mediciones. Si no fuera así, la derivada tercera en los dos últimos puntos se calculará mediante una fórmula regresiva, la misma que se usaba en el apartado 2.4.3.

Con el valor de Λ_3 obtenido se calcula un nuevo valor del paso temporal mediante la expresión

$$h = \left(\frac{12(T^e - T_0 + \mu - 2\delta)}{29(\mu - 3\delta)\Lambda_3} \delta \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.25)$$

con el cual se podrá repetir la iteración.

El proceso iterativo se detendrá cuando el paso en el tiempo h se estabilice. Con dicho valor final de h , se calculan los nuevos instantes t_k y la interpolación de \widetilde{T} en ellos. Por último, se calculan los valores

$$\widetilde{H}_k = \widetilde{u}_h(t_k) = \frac{R_h(\widetilde{T})(t_k)}{T^e - \widetilde{T}_k}, \quad (3.26)$$

los cuales aproximan los valores de H en las temperaturas \widetilde{T}_k , para $k = 0, 1, \dots, n$.

Algoritmo

- DATOS $\{\widehat{T}_k\}_{k=0}^p$: mediciones de la temperatura.
 $\widehat{\delta} > 0$: cota del error en las mediciones.
 $\mu > 0$: umbral considerado.
 ε : precisión del test de parada.
 h : valor inicial (tentativo) del paso temporal
- Paso 1: Determinar \widetilde{T} y δ en función de $\widehat{\delta}$.
Paso 2: Fijar t_f según (3.3) adaptando, si procede, el valor de μ .
Paso 3: Mientras que el error relativo en h sea mayor que la precisión ε :
a) Determinar la partición $\{t_k\}$ y calcular los valores $\{\widetilde{T}_k\}$.
b) Calcular el valor de Λ_3 como el máximo en k del valor absoluto de los valores dados por (3.24).
c) Calcular el nuevo valor de h según la fórmula (3.25).
Paso 4: Determinar la partición final $\{t_k\}$ y los correspondientes valores $\{\widetilde{T}_k\}$.
Paso 5: Calcular las aproximaciones $\{\widetilde{H}_k\}$ según la fórmula (3.26).

3.5. Resultados numéricos. Comparación entre los métodos descritos

Antes de pasar a describir los ejemplos sobre los que se han probado los tres algoritmos presentados, y comparar los resultados obtenidos con ellos, vamos a hacer algunas consideraciones relativas al problema adimensional correspondiente.

3.5.1. Sobre la adimensionalización del problema

Llegaremos al problema adimensionalizado de forma paralela a como se hizo en la Sección 2.5, haciendo que la temperatura adimensional tome el valor cero en el menor valor de la temperatura original (allí en T^e , aquí en T_0).

Considerando las nuevas variables adimensionales

$$t^* = \frac{t - t_0}{t_f - t_0} \quad \text{y} \quad T^*(t^*) = \frac{T(t) - T_0}{T^e - T_0},$$

y teniendo en cuenta que

$$\frac{dT}{dt}(t) = \frac{d}{dt}(T_0 + (T^e - T_0)T^*(t^*)) = (T^e - T_0) \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) \frac{dt^*}{dt} = \frac{T^e - T_0}{t_f - t_0} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*),$$

la ecuación diferencial del problema (3.5) se escribe como

$$\frac{T^e - T_0}{t_f - t_0} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) = H(T_0 + (T^e - T_0)T^*(t^*))(T^e - T_0 - (T^e - T_0)T^*(t^*)).$$

Si denotamos

$$H^*(s) = (t_f - t_0)H((T^e - T_0)s + T_0) \quad (\Rightarrow H^*(T^*(t^*)) = (t_f - t_0)H(T(t)))$$

el problema equivalente adimensionalizado se escribe como

$$\begin{cases} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) = H^*(T^*(t^*))(1 - T^*(t^*)), & t^* \in (0, 1) \\ T^*(0) = 0, \end{cases} \quad (3.27)$$

problema que, en principio, no depende de ningún parámetro.

Recordemos que el objetivo era identificar H para luego poder calcular la temperatura, en distintas situaciones, sin necesidad de nuevas pruebas experimentales. Estas situaciones vendrán dadas por distintas elecciones de la temperatura inicial (por encima de T_0) y ambiente (menor que T^e). Sin pérdida de generalidad, podemos suponer fija la temperatura inicial; además, se tomará una temperatura ambiente T^e , con $T_0 < T^e < T^*$, y se supondrá que el tiempo de evolución llega hasta t_f . El problema adimensionalizado correspondiente a esta situación es

$$\begin{cases} \frac{dT^*}{dt^*}(t^*) = H^*(T^*(t^*))(T^{ea} - T^*(t^*)), & t^* \in (0, 1) \\ T^*(0) = 0, \end{cases} \quad (3.28)$$

donde

$$T^{ea} = \frac{T^e - T_0}{T^e - T_0}.$$

Así pues, las distintas situaciones se verán reflejadas resolviendo el problema (3.28) para distintos valores de T^{ea} entre cero y uno.

3.5.2. Estudio comparativo de los resultados numéricos

Presentamos aquí los resultados obtenidos en la resolución de cuatro ejemplos concretos, mediante los tres algoritmos descritos en este capítulo: el basado en el principio de discrepancia de Morozov, el método de Landweber y el algoritmo iterativo descrito en la Sección 3.4. Trabajaremos con el problema adimensionalizado (3.27), aunque prescindiremos del superíndice $*$ en todas las variables, con objeto de aligerar la notación. La batería de pruebas la generamos, como se hizo en el Capítulo 2, resolviendo el problema directo para cada función H dada, evaluando la solución obtenida en 100 instantes de tiempo y generando las *mediciones con error* tras perturbar dichas evaluaciones de la forma descrita en la Sección 2.6; el tamaño de dichas perturbaciones es, recuérdese, del orden del 1 %.

Nuevamente trabajaremos con cuatro tipos de funciones H : constante, oscilatoria, creciente y decreciente. En concreto, nuestros ejemplos de prueba van a ser:

- 1) $H(s) = 6$
- 2) $H(s) = \frac{3}{2}(2 + \text{sen}(4\pi s))$
- 3) $H(s) = 2e^s$
- 4) $H(s) = 6e^{-s}$.

También aquí (como se hizo en la Sección 2.6) se han elegido las mismas siete perturbaciones de la temperatura y se presentan, para cada caso, las dos que producen el menor y mayor error en H (medido en norma L^2 para los métodos de Morozov y Landweber y en norma infinito en el algoritmo iterativo). Una vez identificada H con cada uno de los tres métodos, se resuelve el problema (3.28) usando dicha aproximación, con valores del parámetro T^{ea} que hemos tomado como una cierta proporción dT^{ea} de él, con valores $d = 0.75, 0.50$ y 0.25 . La solución así calculada se compara con la temperatura exacta correspondiente; el error en las temperaturas siempre se mide en norma infinito.

Cada figura está compuesta por diez gráficos; los cinco de arriba muestran los resultados para el menor error en H , mientras que los cinco de abajo son los correspondientes al mayor error.

En cada una de estas dos situaciones, los dos primeros gráficos comparan, por una parte, el coeficiente H exacto con la aproximación calculada; por otra, la temperatura exacta con la temperatura hallada con esta aproximación para el valor de partida de $T^{ea} = 1$. A su vez, los tres gráficos restantes muestran las temperaturas exactas para los otros tres valores propuestos del parámetro T^{ea} , junto con las soluciones calculadas mediante la identificación aproximada de H . Al igual que en el Capítulo 2, en los gráficos aparece etiquetado como “Error” el error en H en las normas correspondientes y como “% Error” el error relativo porcentual en la temperatura (cf. (2.28)).

Para construir la función aproximada \tilde{T} se utiliza la interpolación lineal a trozos de las mediciones. Todas las integrales definidas que aparecen en los cálculos realizados se han implementado mediante la regla de los trapecios, usando como puntos donde valorar la función, exactamente los puntos donde se tienen las medidas. Así pues, estos cálculos son independientes de la interpolación empleada (o, dicho de otra forma, no cambiarán si, en lugar de interpolación lineal a trozos, se usa otro tipo de interpolación).

Se ha elegido como valor inicial del umbral $\mu = 0.2$. Una vez construida la función \tilde{T} , este valor habrá que corregirlo de acuerdo con lo establecido en la Sección 3.2, con vistas a fijar el valor de t_f dado por (3.3).

Primer método: Principio de discrepancia de Morozov

En la aplicación del principio de discrepancia de Morozov, para el cálculo del valor del parámetro α que resuelve la ecuación (3.17) hemos aplicado el método de la secante a la función

$$F(\alpha) = \|Ku_{\alpha,\delta} - y_\delta\|_{L^2(t_0,t_f)}^2 - (e(\delta))^2,$$

donde $u_{\alpha,\delta}$, y_δ y $e(\delta)$ vienen dados por (3.16), (3.9) y (3.10), respectivamente.

Como puede observarse en las Figuras 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4, este método proporciona, salvo en el caso constante, una identificación de H poco adecuada: las temperaturas aproximadas quedan relativamente alejadas de las exactas, especialmente en el caso de la función oscilante, con errores relativos porcentuales (cf. (2.28)) altos; la situación empeora cuando se disminuye el valor de T^{ea} , debido al mal comportamiento de la aproximación de H para los valores más pequeños de la temperatura.

Segundo método: Método de Landweber

De acuerdo con la Observación 3.3.14, se ha tomado como valor del parámetro a en la iteración (3.18) el proporcionado, en cada caso, por $a = \frac{0.9}{t_f^2}$. Para otros valores de dicho parámetro (dentro del rango admisible) los resultados obtenidos son muy similares.

Las Figuras 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8 recogen los resultados obtenidos cuando se aplica el método de Landweber. Puede observarse ahora, en los tres casos en que el método anterior proporcionaba resultados poco adecuados, un comportamiento mucho mejor, aunque todavía se producen errores poco aceptables en el caso de la función oscilatoria, sobre todo, como ocurría en el método basado en el principio de discrepancia de Morozov, cuando se disminuye el valor de la temperatura exterior.

Tercer método: Algoritmo iterativo

Los gráficos comparativos para este método (Figuras 3.9, 3.10, 3.11 y 3.12) muestran un comportamiento adecuado en todos los casos. Los errores relativos en la temperatura son siempre del orden del 1 %. Es de destacar el buen comportamiento de este método cuando se disminuye la temperatura exterior; dicho comportamiento se explica por el hecho de que, con este método, la mayor discrepancia en la identificación de H se da en los valores más grandes de la temperatura. Además, recordamos que este método soslaya la mala propiedad de los anteriores de que obligatoriamente la aproximación de H deba anularse en $T(t_f)$.

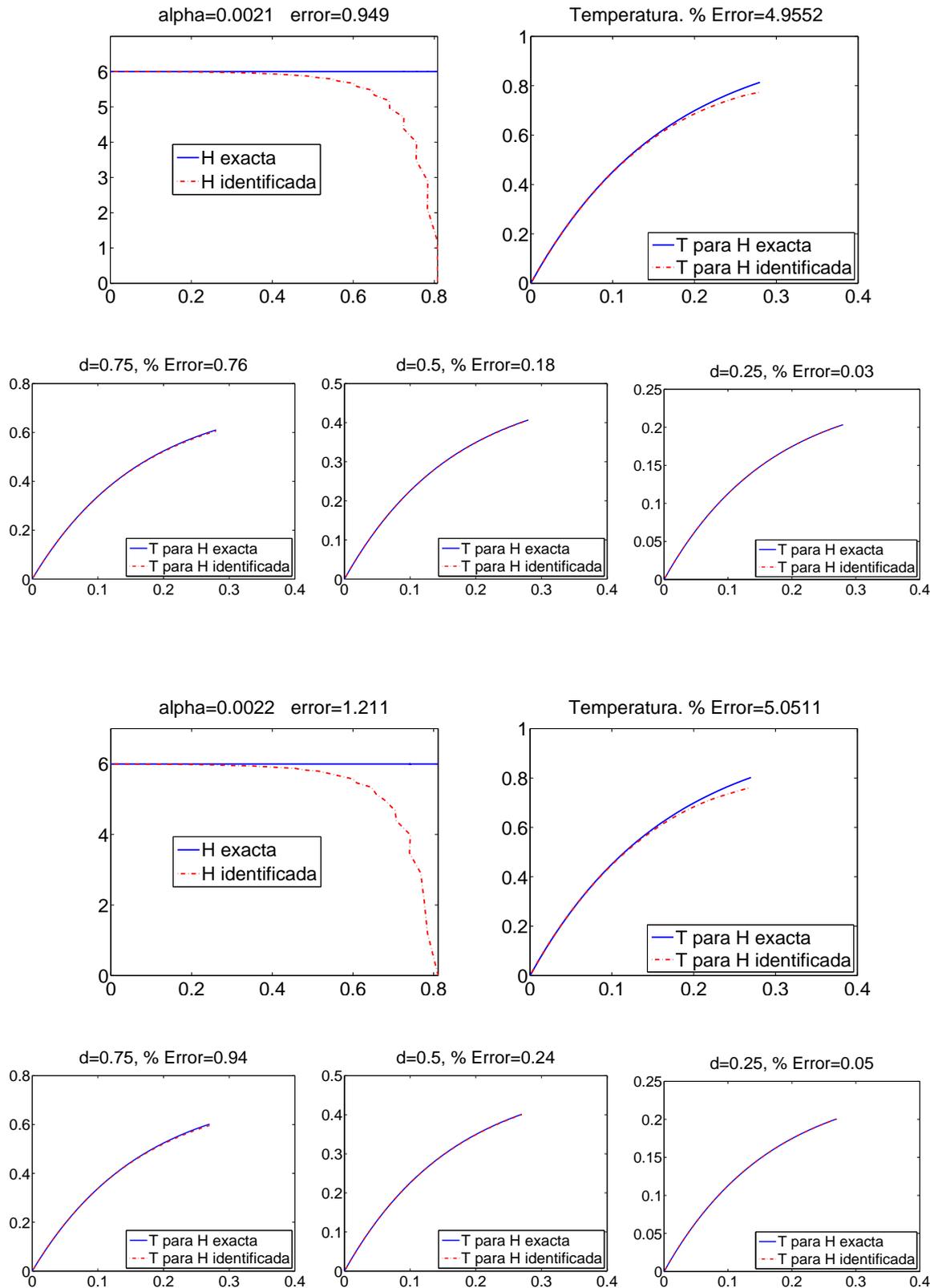


Figura 3.1: Principio de Morozov y H constante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

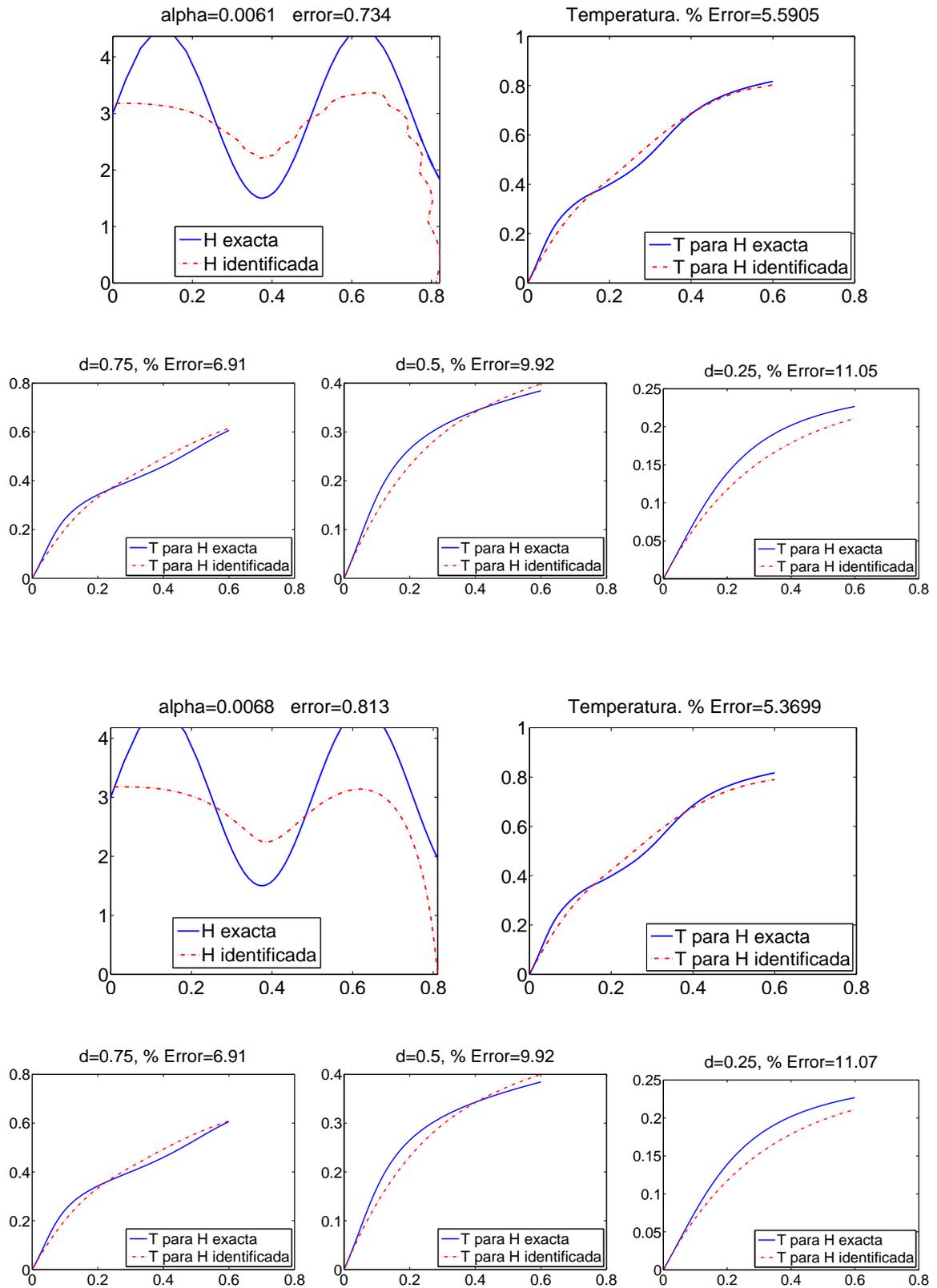


Figura 3.2: Principio de Morozov y H oscilante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

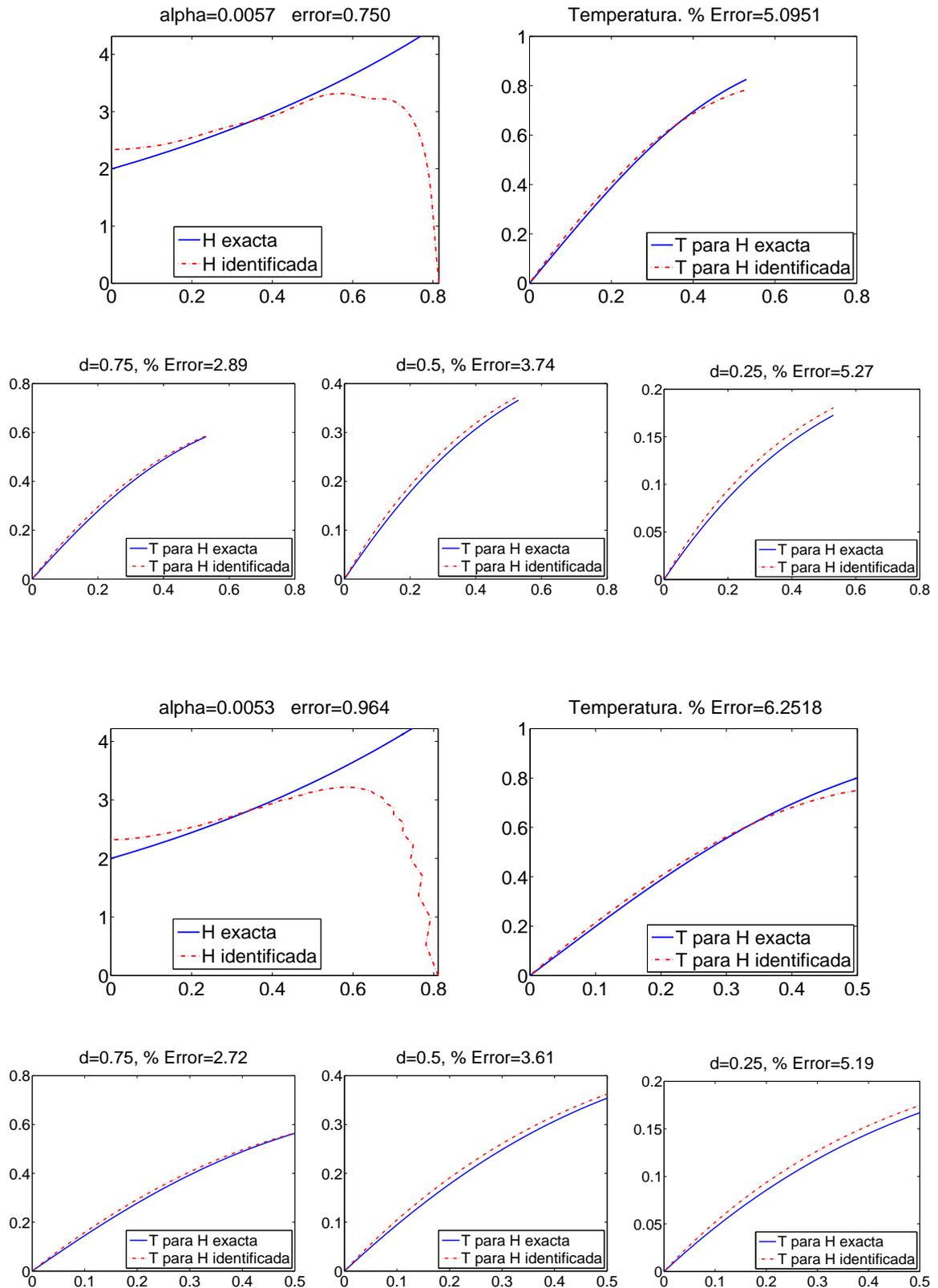


Figura 3.3: Principio de Morozov y H creciente. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

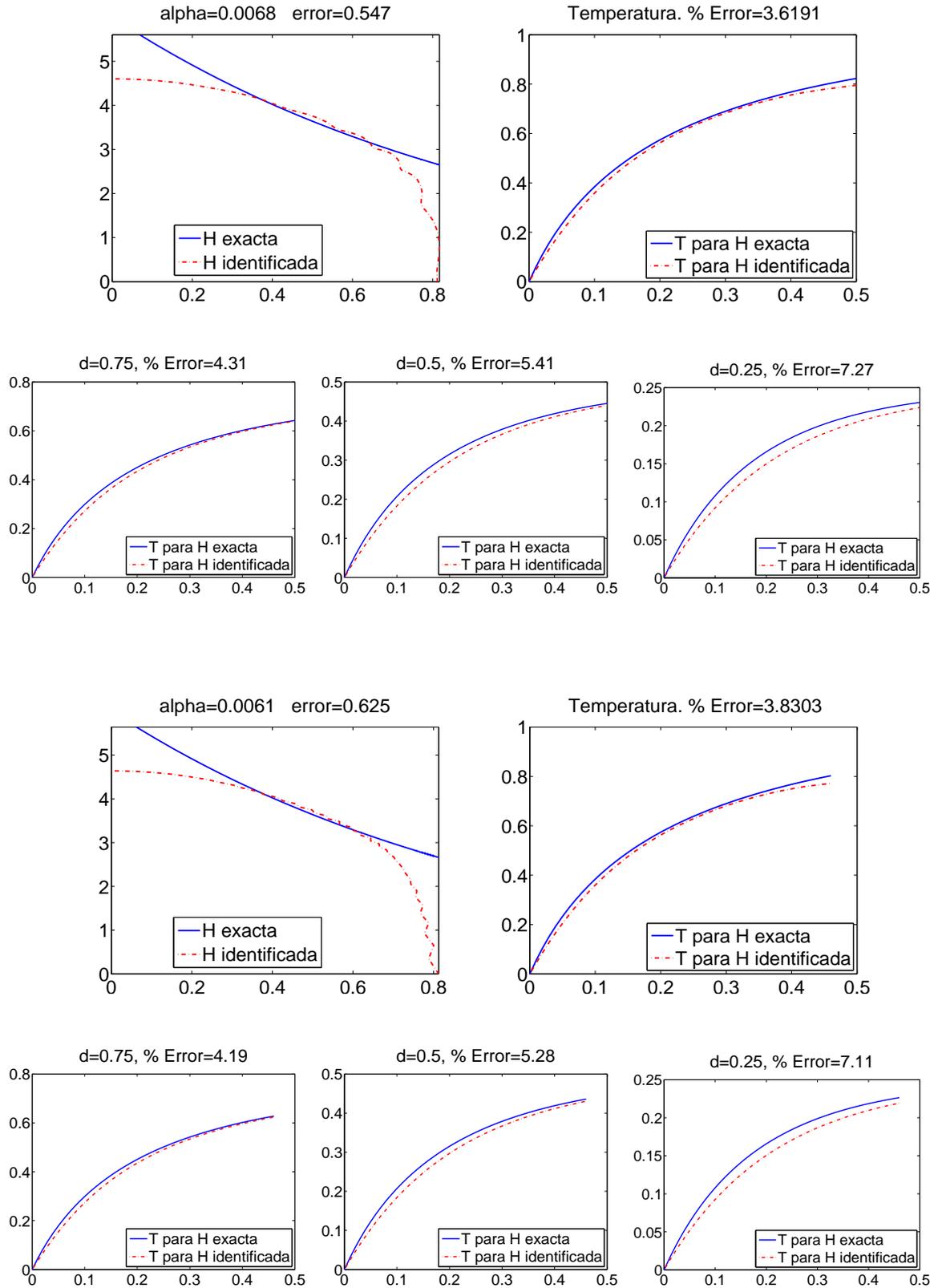


Figura 3.4: Principio de Morozov y H decreciente. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

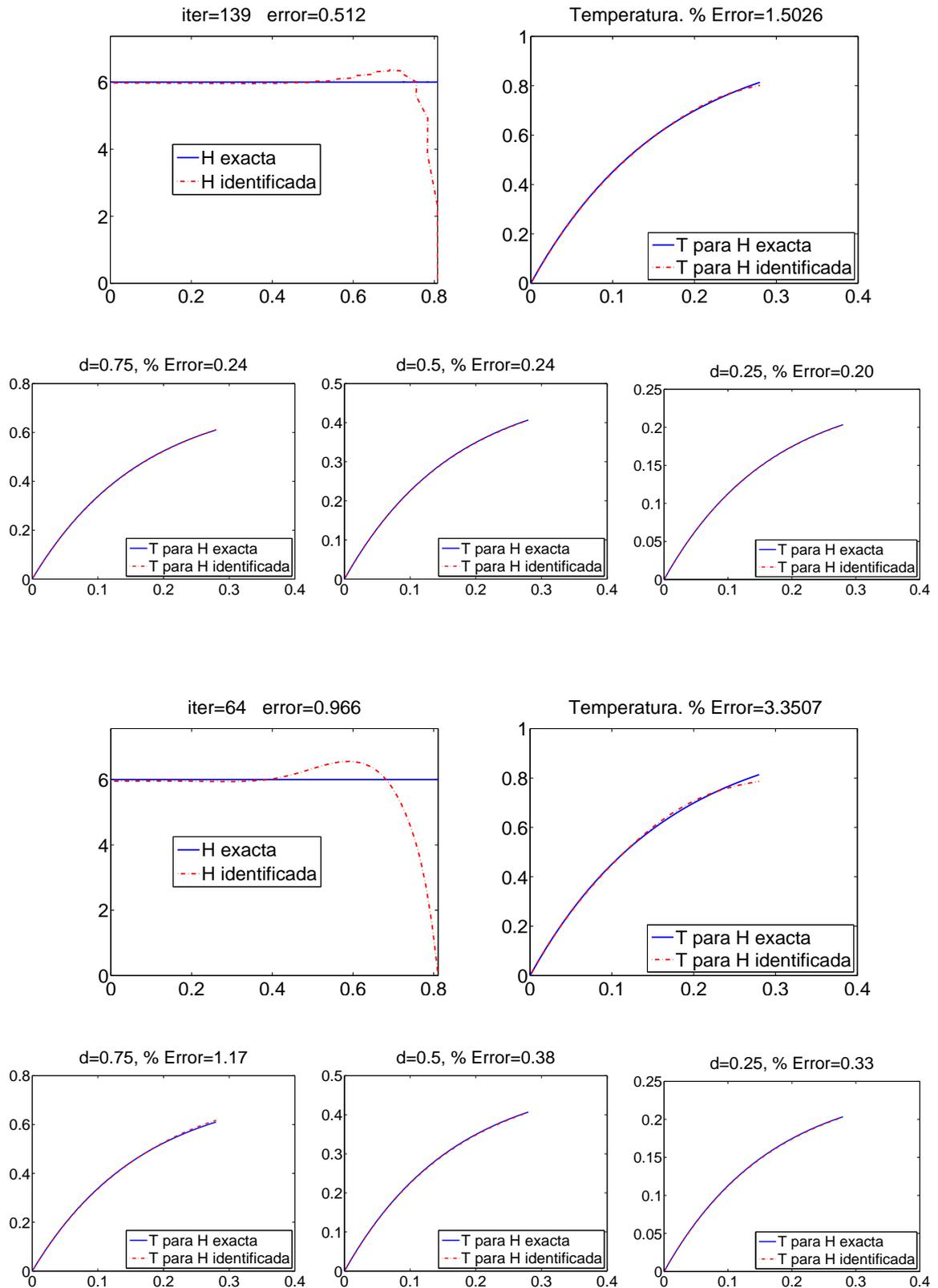


Figura 3.5: Método de Landweber y H constante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

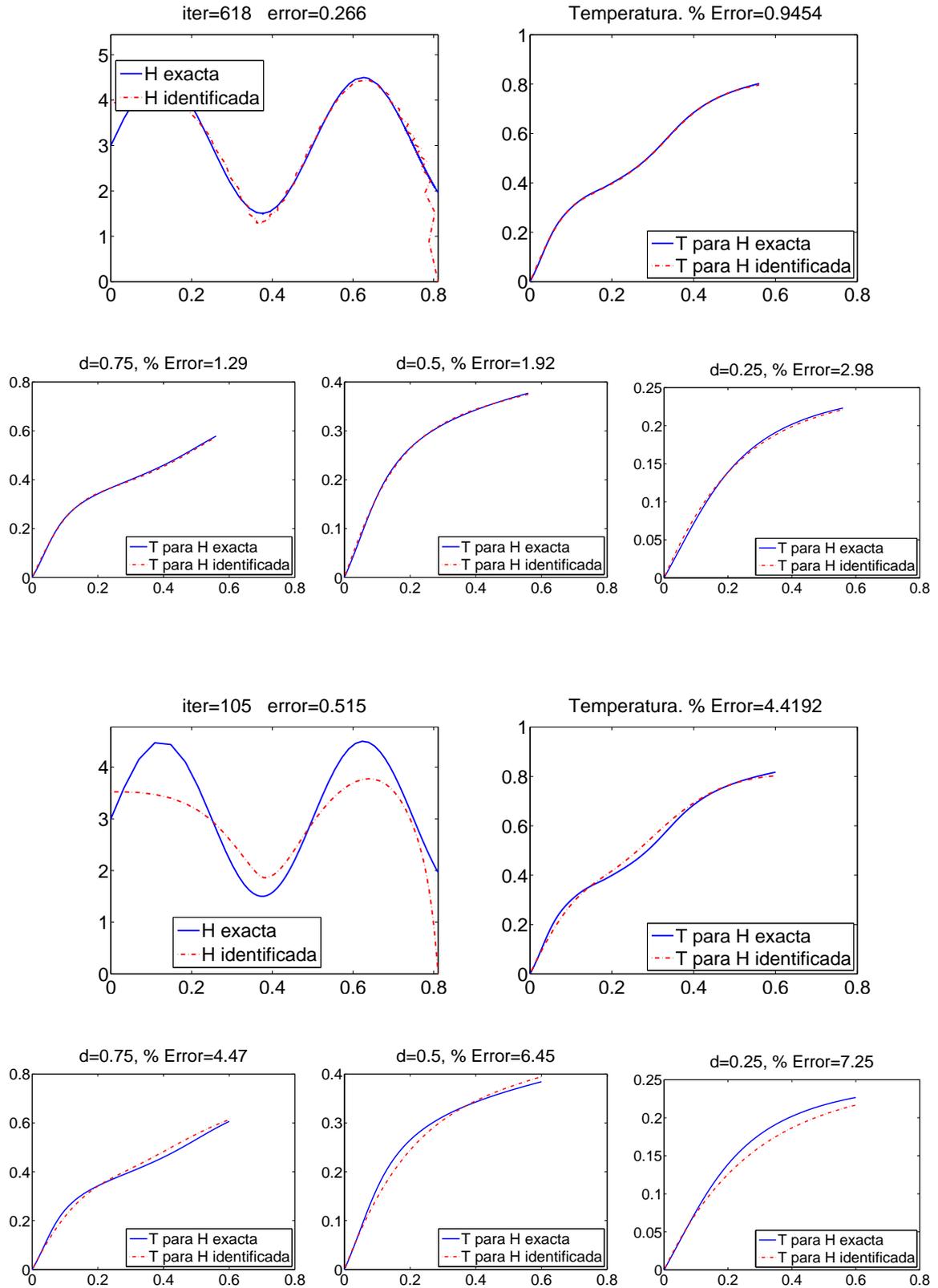


Figura 3.6: Método de Landweber y H oscilante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

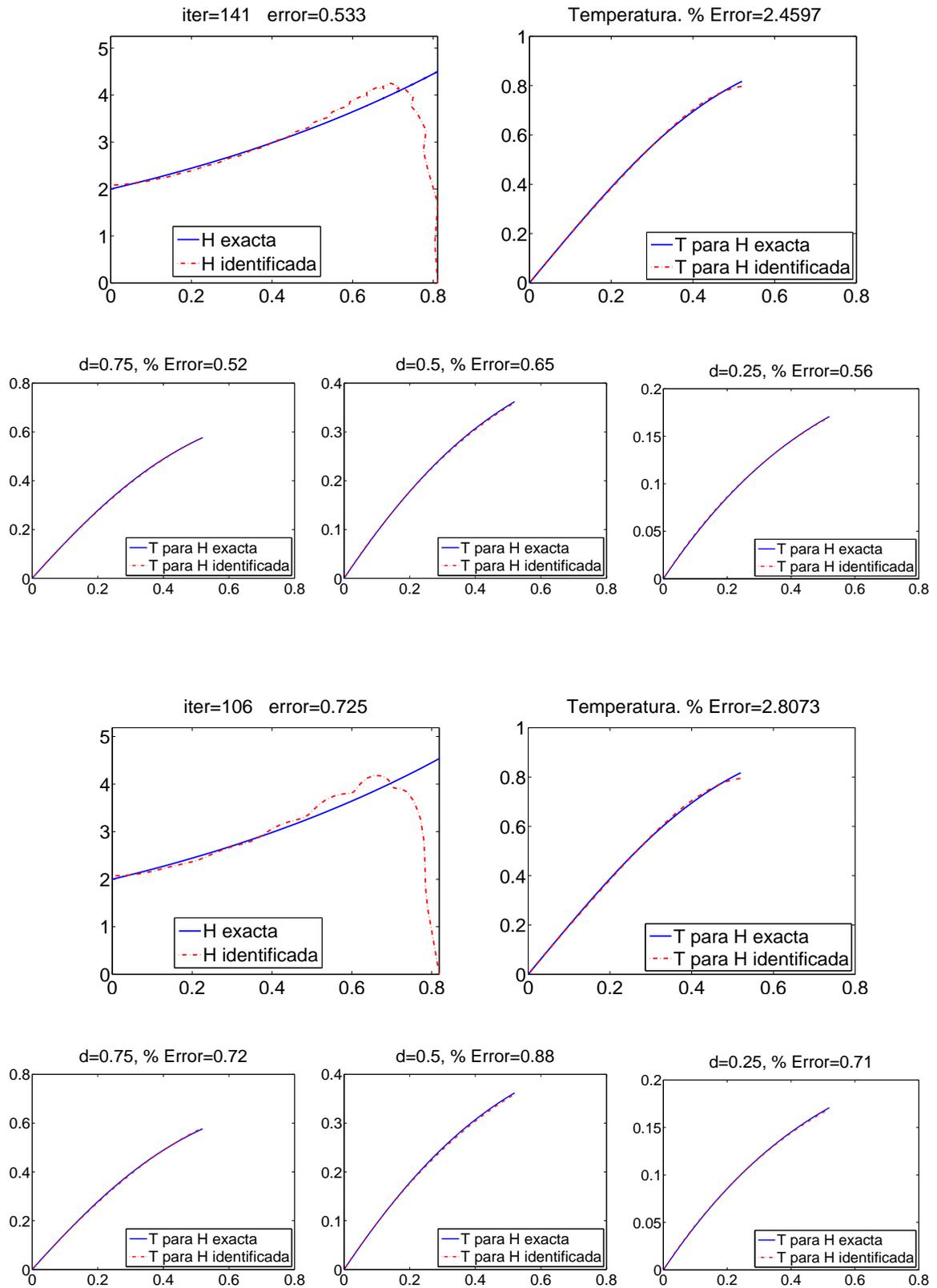


Figura 3.7: Método de Landweber y H creciente. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

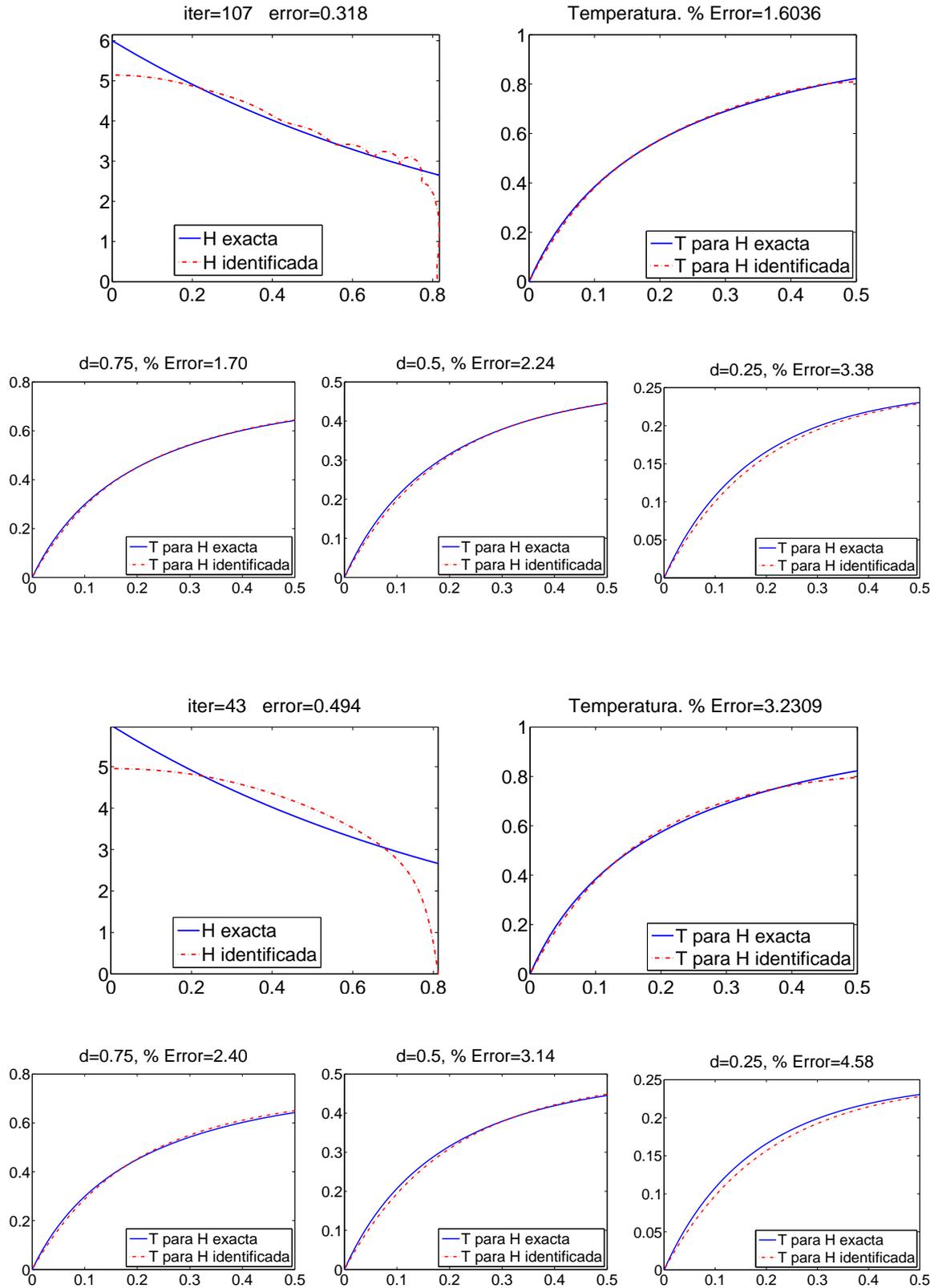


Figura 3.8: Método de Landweber y H decreciente. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

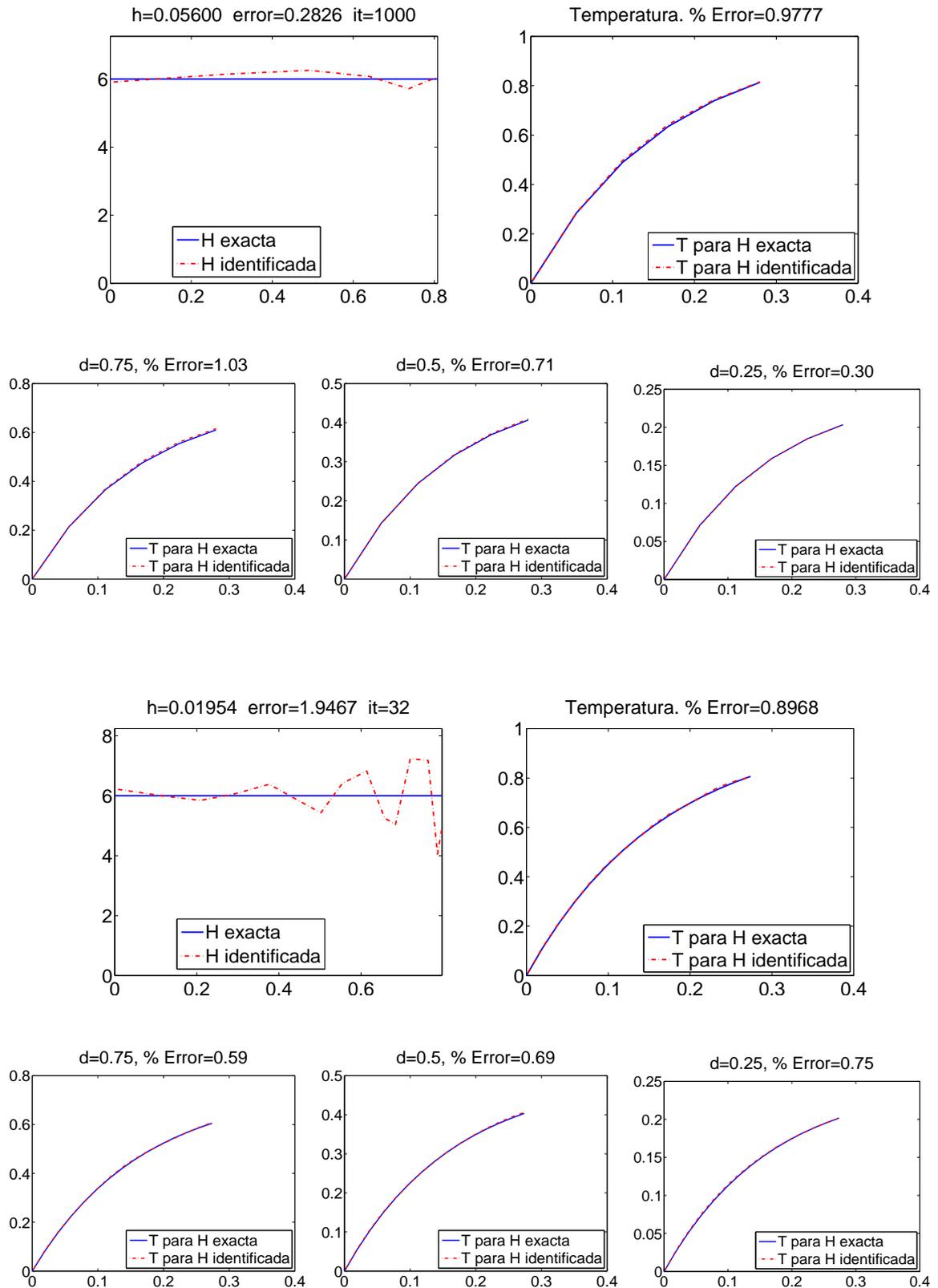


Figura 3.9: Algoritmo iterativo y H constante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

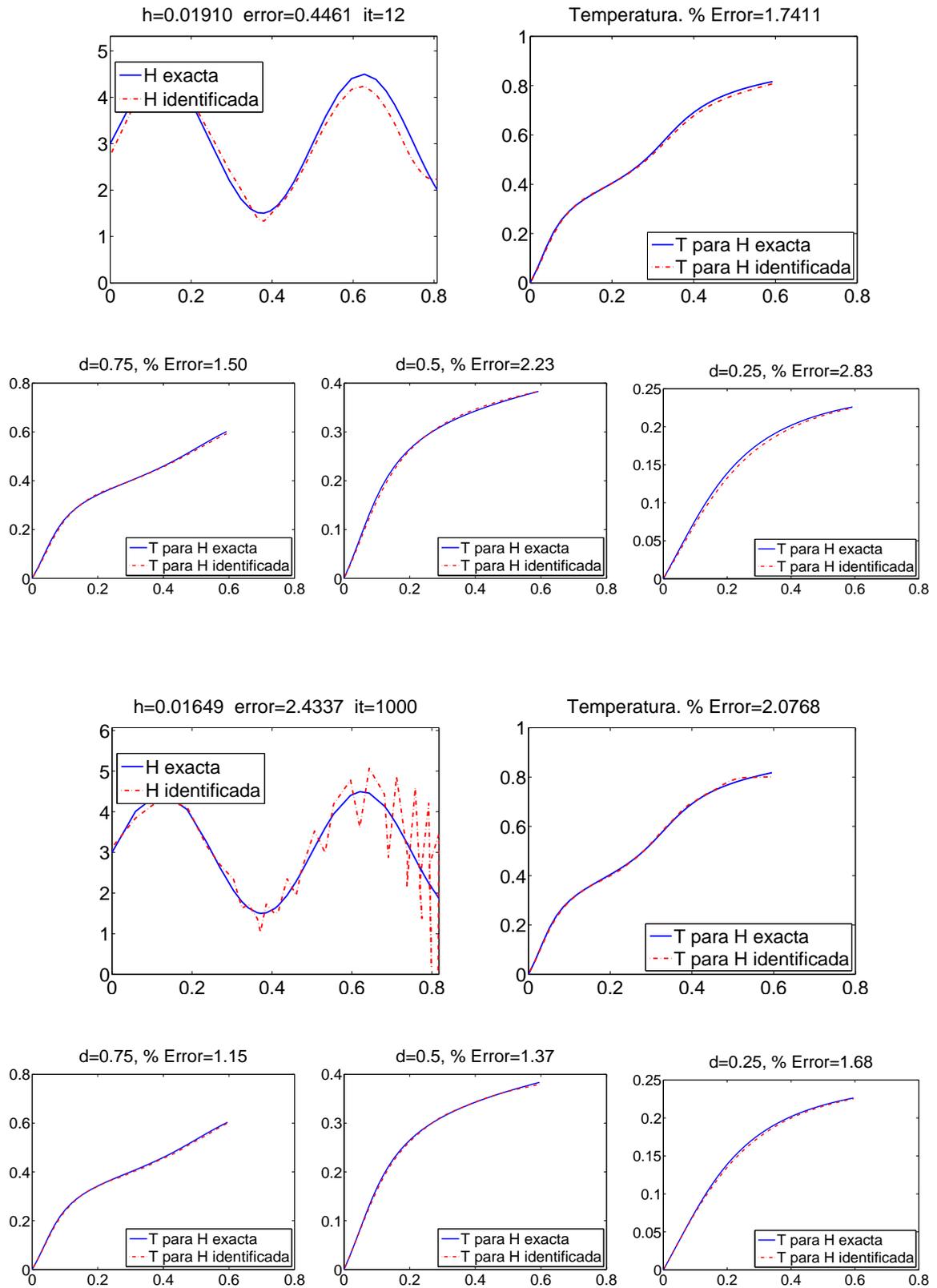


Figura 3.10: Algoritmo iterativo y H oscilante. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

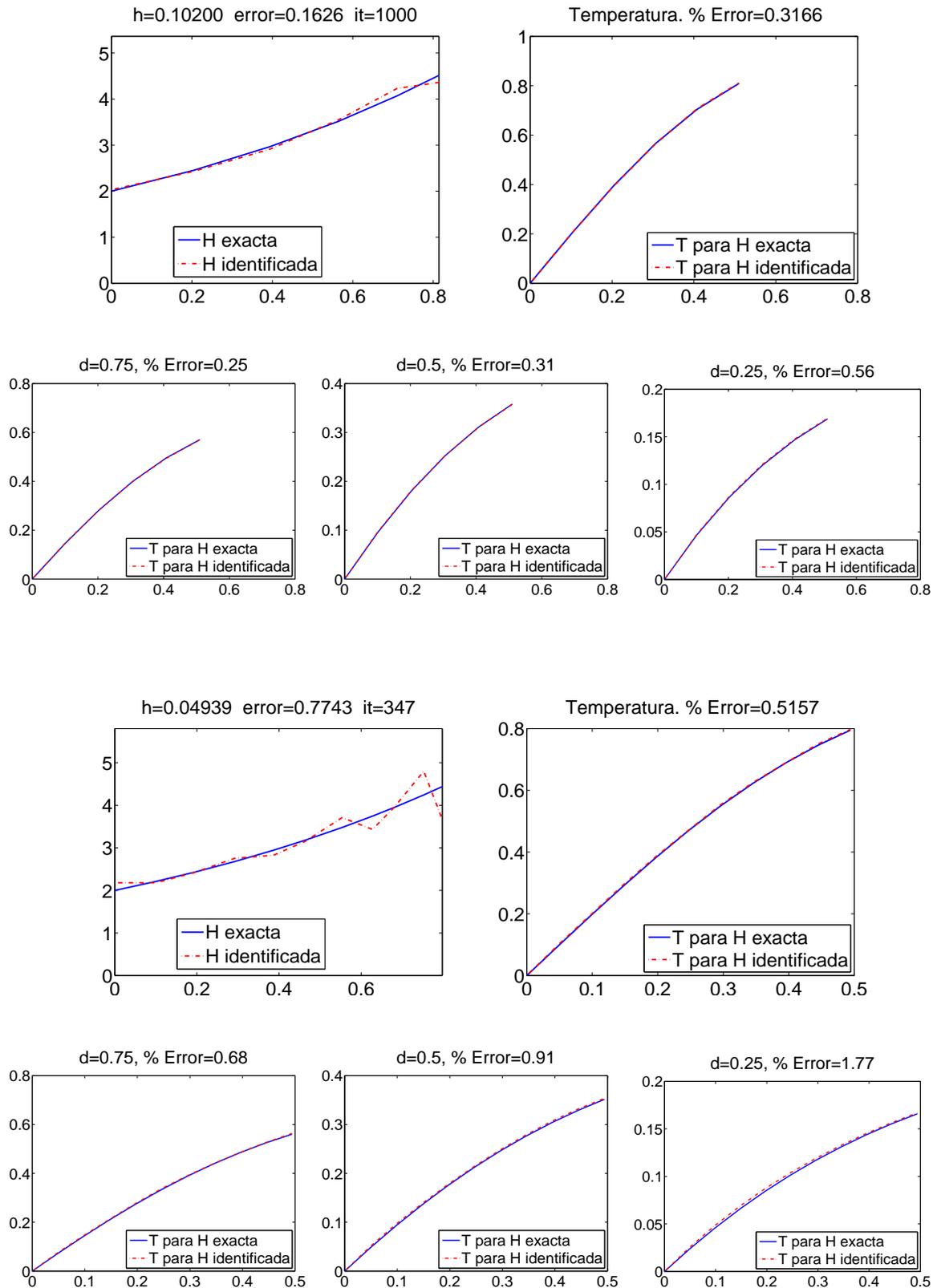


Figura 3.11: Algoritmo iterativo y H creciente. Menor error en H (**Arriba**) y mayor error en H (**Abajo**). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (**Izquierda**), $d = 0.5$ (**Centro**), $d = 0.25$ (**Derecha**).

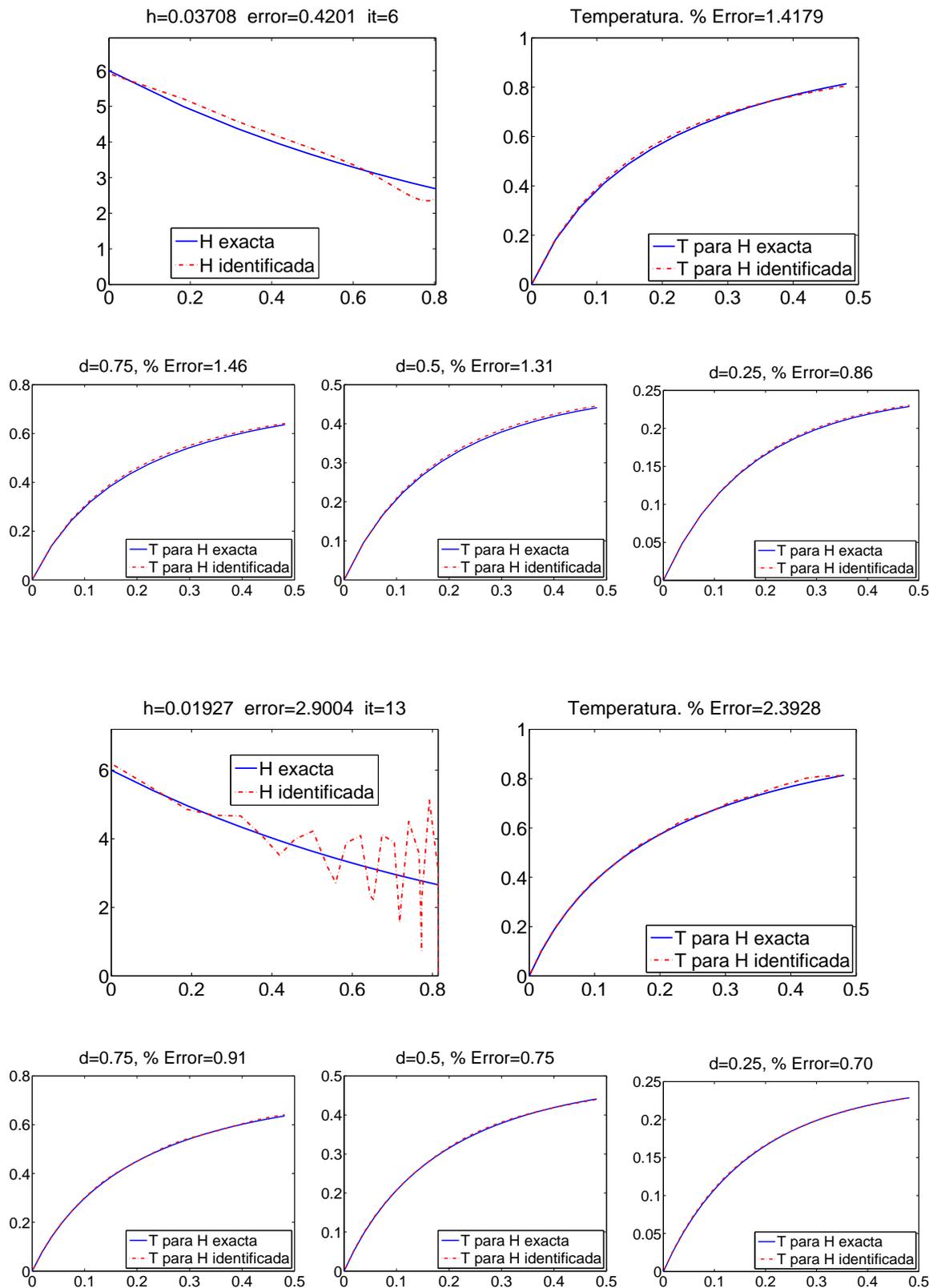


Figura 3.12: Algoritmo iterativo y H decreciente. Menor error en H (Arriba) y mayor error en H (Abajo). Valor de T^{ea} : $d = 0.75$ (Izquierda), $d = 0.5$ (Centro), $d = 0.25$ (Derecha).

Parte III

Identificación de un coeficiente de conductividad térmica

Capítulo 4

Identificación del coeficiente de conductividad térmica, cuando ésta depende de la distribución de presiones

Introducción

Como se ha visto en el Capítulo 1, los tratamientos que combinan altas presiones con temperaturas moderadas se modelizan mediante ecuaciones en las que aparecen distintos parámetros físicos cuyo valor, si bien se suele conocer a presión atmosférica, está por determinar para otros valores de la presión. En este capítulo fijamos nuestra atención en las ecuaciones de transferencia de calor que pueden aparecer en los modelos matemáticos de estos procesos (véanse, por ejemplo, [60] y el primer capítulo de esta memoria). Supondremos que la conductividad térmica depende sólo de la presión: $k = k(P)$; esta hipótesis es adecuada, por ejemplo, en los procesos en los que el rango de temperaturas es moderado y no hay cambio de fase. Nos planteamos el problema de identificar esta función $k(P)$ a partir de ciertas mediciones experimentales de la temperatura. Si para determinar las mediciones se realiza un experimento en el que la curva de presión P considerada sea inyectiva (por ejemplo, si se trata de una función estrictamente creciente) el problema de identificar $k(P)$ es equivalente a identificar $k(t) = k(P(t))$.

Trabajaremos con un modelo simplificado en el que se está suponiendo que la muestra es de alimento sólido y con una razón de relleno de la cámara muy alta, por lo que no se tienen en cuenta fenómenos de convección (esta situación es una de las analizadas en el Capítulo 1 y en [60]). Además, se supone que la muestra (de alimento, en el contexto de esta memoria, aunque serviría también para otras situaciones) intercambia calor con las paredes del equipo (de tipo cilíndrico, como en el primer capítulo) que, por simplicidad, se asume que están a temperatura conocida y dada por una función $T^e(t)$, siendo la única fuente de calor la correspondiente al aumento de presión. El coeficiente h de intercambio de calor se supone también conocido. Por último, suponemos que la conducción de calor en la dirección vertical es despreciable y que, por tanto, nuestro interés se centra en conocer lo que ocurre a una cierta altura de la muestra que es en la que estarán colocados los termopares para realizar las mediciones.

Teniendo en cuenta todas estas consideraciones, el modelo simplificado para el que abordamos

el problema de identificación del coeficiente de conductividad térmica es el siguiente:

$$\begin{cases} \varrho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k(t) \Delta T = \alpha P'(t) T & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T^e(t) - T) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\}, \end{cases} \quad (4.1)$$

donde $R > 0$ y $t_f > 0$. Aquí, $B_R \subset \mathbb{R}^2$ denota la bola de centro 0 y radio R ; $\alpha \geq 0$ es el coeficiente de dilatación de la muestra considerada; $\varrho, C_p \in \mathbb{R}$ son su densidad y calor específico, respectivamente; $P \in C^1([0, t_f])$ representa la presión que se ejerce con el equipo; $k \in C([0, t_f])$, con $k(t) \geq k_0 > 0$, es el coeficiente de conductividad; $T^e \in C([0, t_f])$ denota la temperatura exterior del equipo; \vec{n} es el vector unitario normal exterior a la frontera de la bola B_R ; $h > 0$ denota el coeficiente de intercambio de calor y T_0 es la temperatura inicial que supondremos constante. El objetivo es identificar la función k conociendo mediciones de la temperatura T en ciertos puntos de la bola B_R . Puesto que, como ya se ha dicho, los valores a presión atmosférica de los coeficientes que aparecen en estas ecuaciones suelen ser conocidos, nosotros supondremos que la presión en el instante inicial es la atmosférica y que, por tanto, $k(0)$ es un dato del problema.

Para más detalles sobre este tipo de modelos y las unidades de cada uno de sus parámetros y funciones, remitimos al citado primer capítulo.

4.1. Análisis cualitativo del problema directo

Notación 4.1.1 Denotaremos

$$X = \{ \varphi \in C^{2,1}(B_R \times (0, t_f)) \cap C^{1,0}(\overline{B_R} \times [0, t_f]) \},$$

es decir, el conjunto de las funciones que son de clase dos en espacio y de clase uno en tiempo en el cilindro $B_R \times (0, t_f)$, y que tienen un orden de regularidad una unidad inferior en la adherencia de dicho cilindro. \square

Teorema 4.1.2 Si la función k es lipschitziana en $[0, t_f]$, la derivada de la función P es, en dicho intervalo, hölderiana de orden $\beta \in (0, 1)$ y se verifica la condición de compatibilidad

$$T^e(0) = T_0,$$

entonces el problema (4.1) tiene una única solución (clásica) $T \in X$. Además, T es radial.

DEMOSTRACIÓN. La existencia, unicidad y regularidad de la solución se deducen, directamente, del Teorema 5.18 de [48, pág. 96]. Veamos que la solución es una función radial probando que cualquier giro en la variable espacial no cambia la solución. Para ello, a partir de $T(x, t)$ consideramos la función

$$\tilde{T}(x, t) = T(\bar{x}, t) \text{ siendo } \bar{x} = Ax \text{ y } A = \begin{pmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta \\ -\text{sen } \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

la matriz del giro de ángulo $\theta \in [0, 2\pi)$. Las relaciones

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_1}(x, t) = \frac{\partial T}{\partial \bar{x}_1}(\bar{x}, t) \cos \theta - \frac{\partial T}{\partial \bar{x}_2}(\bar{x}, t) \text{sen } \theta \\ \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_2}(x, t) = \frac{\partial T}{\partial \bar{x}_1}(\bar{x}, t) \text{sen } \theta + \frac{\partial T}{\partial \bar{x}_2}(\bar{x}, t) \cos \theta \end{cases}$$

determinan que $\nabla_x \tilde{T}(x, t) = A^T \nabla_{\bar{x}} T(\bar{x}, t)$. Al derivar de nuevo obtenemos

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x_1^2}(x, t) = \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_1^2}(\bar{x}, t) \cos^2 \theta - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_1 \bar{x}_2}(\bar{x}, t) \sin \theta \cos \theta + \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_2^2}(\bar{x}, t) \sin^2 \theta \\ \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x_2^2}(x, t) = \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_1^2}(\bar{x}, t) \sin^2 \theta + 2 \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_1 \bar{x}_2}(\bar{x}, t) \sin \theta \cos \theta + \frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}_2^2}(\bar{x}, t) \cos^2 \theta \end{cases}$$

y, con ello,

$$\Delta_x \tilde{T}(x, t) = \Delta_{\bar{x}} T(\bar{x}, t).$$

De esta forma, para todo $(x, t) \in B_R \times (0, t_f)$ se verifica que

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t}(x, t) - k(t) \Delta_x \tilde{T}(x, t) &= \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}(\bar{x}, t) - k(t) \Delta_{\bar{x}} T(\bar{x}, t) \\ &= \alpha P'(t) T(\bar{x}, t) = \alpha P'(t) \tilde{T}(x, t). \end{aligned}$$

Además, como para $(x, t) \in \partial B_R \times (0, t_f)$ se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \bar{n}}(x, t) &= \langle \nabla_x \tilde{T}(x, t), \bar{n}(x) \rangle = \langle A^T \nabla_{\bar{x}} T(\bar{x}, t), \bar{n}(x) \rangle \\ &= \langle \nabla_{\bar{x}} T(\bar{x}, t), A \bar{n}(x) \rangle = \langle \nabla_{\bar{x}} T(\bar{x}, t), \bar{n}(\bar{x}) \rangle \\ &= \frac{\partial T}{\partial \bar{n}}(\bar{x}, t) \end{aligned}$$

(aquí $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto escalar euclídeo en \mathbb{R}^2), entonces

$$k(t) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \bar{n}}(x, t) = k(t) \frac{\partial T}{\partial \bar{n}}(\bar{x}, t) = h(T^e(t) - T(\bar{x}, t)) = h(T^e(t) - \tilde{T}(x, t)).$$

Por último,

$$\tilde{T}(x, 0) = T(\bar{x}, 0) = T_0, \quad x \in B_R.$$

Así pues, la función $\tilde{T}(x, t)$ es también solución del problema (4.1); la unicidad de solución del mismo permite concluir que

$$T(x, t) = T(\bar{x}, t), \quad (x, t) \in \overline{B_R} \times [0, t_f]$$

cualquiera que sea el ángulo $\theta \in [0, 2\pi)$. \square

Notación 4.1.3 Dada una función radial $v \in X$ denotaremos por

$$\bar{v} : [0, R] \times [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}$$

la función que toma los valores de v en cada circunferencia, es decir,

$$\bar{v}(r, t) = v(x, t) \quad \text{para todo } x \in B_R \text{ con } |x| = r \text{ y } t \in [0, t_f]. \quad \square$$

Con el objetivo de facilitar el estudio cualitativo de nuestro problema, vamos a realizar dos cambios de variable que nos conducirán a un problema equivalente en el que tanto la ecuación diferencial como la condición inicial son homogéneas.

En primer lugar, con vistas a convertir en homogénea la ecuación diferencial, efectuamos el cambio de variable

$$u(x, t) = T(x, t)e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(0)-P(t))}. \quad (4.2)$$

De esta forma, tendremos que

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{\partial u}{\partial t} &= \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(0)-P(t))} - \alpha P'(t) T(x, t) e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(0)-P(t))} \\ &= k(t) e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(0)-P(t))} \Delta T = k(t) \Delta u, \end{aligned}$$

lo cual permite expresar el problema (4.1) en la forma

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial u}{\partial t} - k(t) \Delta u = 0 & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = h(f(t) - u) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ u = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\}, \end{cases} \quad (4.3)$$

siendo

$$f(t) = T^e(t) e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(0)-P(t))}.$$

Seguidamente, para homogeneizar la condición inicial, hacemos el cambio

$$v(x, t) = u(x, t) - T_0, \quad (4.4)$$

obteniendo el problema

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial v}{\partial t} - k(t) \Delta v = 0 & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = h(f(t) - T_0 - v) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ v = 0 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases} \quad (4.5)$$

Observación 4.1.4 Nótese que $v \in X$ y es radial. De hecho, el problema (4.5) puede expresarse, tras tomar coordenadas polares, como el problema espacialmente unidimensional

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial v}{\partial t} - k(t) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) = 0 & \text{en } (0, R) \times (0, t_f) \\ \frac{\partial v}{\partial r} = 0 & \text{en } \{0\} \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial v}{\partial r} = h(f(t) - T_0 - v) & \text{en } \{R\} \times (0, t_f) \\ v = 0 & \text{en } (0, R) \times \{0\}. \end{cases}$$

No obstante, en lugar de utilizar esta formulación, trabajaremos con coordenadas cartesianas. Esto se debe a que vamos a expresar la solución como la composición de ciertas funciones con traslaciones y éstas, al no ser radiales, no tienen una representación “cómoda” en coordenadas polares. \square

Si denotamos

$$\mathcal{L}(\phi) = \varrho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t} - k(t) \Delta \phi,$$

entonces su *adjunto formal* (véase, v. gr., [68, pág. 170]) viene dado por

$$\mathcal{L}^*(\phi) = -\varrho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t} - k(t) \Delta \phi.$$

Proposición 4.1.5 (Identidad de Lagrange) *Para cada par de funciones $\phi, \psi \in X$ se verifica que*

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} (\mathcal{L}(\phi)\psi - \phi \mathcal{L}^*(\psi)) dx dt &= \varrho C_p \int_{B_R} (\phi(x, t_f)\psi(x, t_f) - \phi(x, 0)\psi(x, 0)) dx \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \psi - \phi \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} \right) dx dt. \end{aligned}$$

DEMOSTRACIÓN. Por la definición del operador \mathcal{L} podemos escribir

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}(\phi)\psi dx dt &= \int_0^{t_f} \int_{B_R} \left(\varrho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t} - k(t) \Delta \phi \right) \psi dx dt \\ &= \varrho C_p \int_{B_R} \left(\int_0^{t_f} \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi dt \right) dx - \int_0^{t_f} k(t) \int_{B_R} \Delta \phi \psi dx dt. \end{aligned}$$

En primer lugar, integrando por partes en la variable t , el primer sumando se transforma como sigue:

$$\begin{aligned} \varrho C_p \int_{B_R} \left(\int_0^{t_f} \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi dt \right) dx &= \varrho C_p \int_{B_R} (\phi(x, t_f)\psi(x, t_f) - \phi(x, 0)\psi(x, 0)) dx \\ &\quad - \varrho C_p \int_{B_R} \left(\int_0^{t_f} \phi \frac{\partial \psi}{\partial t} dt \right) dx. \end{aligned}$$

Por otra parte, podemos reescribir el segundo sumando integrando por partes dos veces en la variable espacial:

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} k(t) \int_{B_R} \Delta \phi \psi dx dt &= \int_0^{t_f} k(t) \left(\int_{\partial B_R} \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \psi dx - \int_{B_R} \nabla \phi \cdot \nabla \psi dx \right) dt \\ &= \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \psi dx dt \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \left(\int_{\partial B_R} \phi \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} dx - \int_{B_R} \phi \Delta \psi dx \right) dt \\ &= \int_0^{t_f} \int_{B_R} \phi k(t) \Delta \psi dx dt + \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \psi - \phi \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} \right) dx dt. \end{aligned}$$

Así pues, sustituyendo ambas expresiones, obtenemos

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}(\phi)\psi dxdt &= \rho C_p \int_{B_R} (\phi(x, t_f)\psi(x, t_f) - \phi(x, 0)\psi(x, 0)) dx \\ &\quad - \rho C_p \int_{B_R} \left(\int_0^{t_f} \phi \frac{\partial \psi}{\partial t} dt \right) dx - \int_0^{t_f} \int_{B_R} \phi k(t) \Delta \psi dxdt \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \psi - \phi \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} \right) dxdt, \end{aligned}$$

lo cual demuestra el resultado. \square

Corolario 4.1.6 Si $v \in X$ es la solución del problema (4.5), entonces para toda $w \in X$ que verifique la condición final

$$w(x, t_f) = 0, \quad x \in B_R, \quad (4.6)$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w)v dxdt &= h \int_0^{t_f} (f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0) \int_{\partial B_R} w dxdt \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \bar{v}(R, t) \int_{\partial B_R} \frac{\partial w}{\partial \vec{n}} dxdt. \end{aligned}$$

DEMOSTRACIÓN. El resultado se obtiene aplicando la Proposición 4.1.5, tomando como ϕ la solución v del problema (4.5) y como ψ una función $w \in X$ que verifique (4.6), pues

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \underbrace{(\mathcal{L}(v)w - \mathcal{L}^*(w)v)}_{=0} dxdt &= \rho C \int_{B_R} \underbrace{(v(x, t_f)w(x, t_f) - v(x, 0)w(x, 0))}_{=0} dx \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \left(\frac{\partial v}{\partial \vec{n}} w - v \frac{\partial w}{\partial \vec{n}} \right) dxdt \\ &= - \int_0^{t_f} \int_{\partial B_R} h(f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0) w dxdt \\ &\quad + \int_0^{t_f} k(t) \int_{\partial B_R} \bar{v}(R, t) \frac{\partial w}{\partial \vec{n}} dxdt. \quad \square \end{aligned}$$

El siguiente resultado proporciona un principio de comparación para el problema (4.5).

Proposición 4.1.7 (Principio de comparación) Sean $v_1, v_2 \in X$ verificando

$$\begin{cases} \mathcal{L}(v_1) \leq \mathcal{L}(v_2) & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial v_1}{\partial \vec{n}} + hv_1 \leq k(t) \frac{\partial v_2}{\partial \vec{n}} + hv_2 & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ v_1 \leq v_2 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases}$$

Entonces

$$v_1(x, t) \leq v_2(x, t), \quad (x, t) \in \overline{B_R} \times [0, t_f].$$

DEMOSTRACIÓN. Es obvio que si definimos

$$v_0 = v_1 - v_2$$

entonces

$$\begin{cases} \mathcal{L}(v_0) \leq 0 & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k(t) \frac{\partial v_0}{\partial \vec{n}} + hv_0 \leq 0 & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ v_0 \leq 0 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases}$$

Aplicando el principio fuerte del máximo (cf., por ejemplo, [63, Teorema 7, pág. 174]), si la función v_0 alcanza un máximo positivo en un punto P entonces $P \in \partial B_R \times (0, t_f)$ y

$$\frac{\partial v_0}{\partial \vec{n}}(P) > 0,$$

con lo que se obtendría la contradicción

$$k(t) \frac{\partial v_0}{\partial \vec{n}}(P) + hv_0(P) > 0$$

Así pues, v_0 no puede tener un máximo positivo o, lo que es lo mismo, $v_0 \leq 0$. \square

4.2. Expresión de la solución en función de sus valores en el borde

Notación 4.2.1 Dado un conjunto abierto $A \subset \mathbb{R}^n$, denotaremos $\mathcal{D}(A) = \mathcal{C}_c^\infty(A)$ el conjunto de las funciones de clase infinito que tienen soporte compacto contenido en A . Asimismo, denotaremos por $\mathcal{D}'(A)$ el conjunto de las distribuciones en A (cf., por ejemplo, [41]). \square

En esta sección vamos a encontrar una representación integral de la solución del problema (4.5) en función de los valores que toma en la frontera de la bola. Deshaciendo los cambios de variable, obtendremos una representación de la temperatura solución de (4.1) en función de sus valores en el borde (que posteriormente supondremos obtenidos por medio de mediciones experimentales). Con este objetivo, en primer lugar, vamos a encontrar una solución fundamental del operador \mathcal{L}^* , es decir, una función que al aplicarle el operador \mathcal{L}^* dé como resultado una delta de Dirac. Para ello utilizaremos la expresión conocida de la solución fundamental del operador \mathcal{L} para el caso $k(t) \equiv 1$ (véase, v. gr., [74, pág. 178]), es decir,

$$\xi(x, t) = \frac{H(t)}{4\pi t} e^{-\frac{\rho C}{4} \frac{|x|^2}{t}}, \quad (4.7)$$

siendo H la función de Heaviside

$$H(t) = \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t \leq 0. \end{cases}$$

Fijados $y \in B_R$ y $\tau \in (0, t_f)$, definimos, la función $w : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$w(x, t; y, \tau) = \xi(x - y, K(t) - K(\tau)), \quad (4.8)$$

siendo

$$K(s) = \int_s^{t_f} k(z) dz,$$

donde la función k se ha extendido por continuidad, de forma constante, a todo \mathbb{R} .

Lema 4.2.2 Fijados $y \in B_R$ y $\tau \in (0, t_f)$, las funciones ξ y w definidas en (4.7) y (4.8), respectivamente, verifican las siguientes propiedades:

a) $\xi \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{(0, 0, 0)\})$. Consecuentemente, se tiene que $w \in C^\infty((\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}) \setminus \{(y, \tau)\})$.

b) $\varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x - y, s) dx = H(s)$ para todo $s \in \mathbb{R}$.

c) La función w es localmente integrable en $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$, i. e., $w \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R})$.

d) $\varrho C_p \xi(x - y, s) \rightarrow \delta(x - y)$ cuando $s \rightarrow 0^+$ en $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^2)$.

e) Para cada $x \in \mathbb{R}^2$ y cada $t \in \mathbb{R}$ con $t < \tau$ se tiene que

$$\mathcal{L}^*(w(x, t; y, \tau)) = -\varrho C_p \frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau) - k(t) \Delta_x w(x, t; y, \tau) = 0.$$

DEMOSTRACIÓN.

a) Claramente, la función ξ es de clase infinito en todo el espacio salvo en el plano $t = 0$. Puesto que para todo $x \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ se verifica que

$$\lim_{t \rightarrow 0^-} \xi(x, t) = 0$$

y que

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \xi(x, t) = \frac{1}{4\pi} \lim_{s \rightarrow +\infty} \frac{s}{e^{\frac{\varrho C_p |x|^2}{4} s}} = \frac{1}{4\pi} \lim_{s \rightarrow +\infty} \frac{1}{\frac{\varrho C_p |x|^2}{4} e^{\frac{\varrho C_p |x|^2}{4} s}} = 0,$$

la función ξ es continua en $(x, 0)$ siempre que $x \neq 0$. De forma análoga, tras cálculos similares, se demuestra que las derivadas de cualquier orden son también continuas en todo el plano $t = 0$ salvo el origen. De hecho, en este punto, la función ξ no es siquiera continua pues, si nos acercamos a cero según la curva $t = |x|^2$, se tiene que

$$\lim_{|x| \rightarrow 0} \xi(x, |x|^2) = \lim_{r \rightarrow 0^+} \frac{e^{-\frac{\varrho C_p}{4}}}{4\pi r^2} = \infty.$$

Por último, los puntos de singularidad de w se reducen a aquellos (x, t) tales que

$$(x - y, K(t) - K(\tau)) = (0, 0),$$

es decir, el punto (y, τ) , puesto que K es una función inyectiva por ser estrictamente creciente.

b) Mediante el cambio de variable

$$x = y + (r \cos \theta, r \sin \theta), \quad (4.9)$$

para cada $s \in \mathbb{R}$ podemos escribir

$$\begin{aligned}
 \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) dx &= \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \frac{H(s)}{4\pi s} e^{-\frac{\varrho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{s}} dx \\
 &= \varrho C_p \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{H(s)}{4\pi s} e^{-\frac{\varrho C_p}{4} \frac{r^2}{s}} r dr d\theta \\
 &= 2\pi \varrho C_p \int_0^\infty \frac{H(s)}{4\pi s} e^{-\frac{\varrho C_p}{4} \frac{r^2}{s}} r dr \\
 &= -H(s) \int_0^\infty \left(-\frac{2\varrho C_p r}{4s} \right) e^{-\frac{\varrho C_p}{4} \frac{r^2}{s}} dr \\
 &= -H(s) e^{-\frac{\varrho C_p}{4} \frac{r^2}{s}} \Big|_{r=0}^{r=\infty} = H(s).
 \end{aligned}$$

- c) Dado Ω un abierto acotado de $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$, consideremos un conjunto de la forma $\mathbb{R}^2 \times [a, b]$ que lo contenga. Entonces, por el apartado b), se tiene que

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} |w(x, t; y, \tau)| dx dt &= \int_{\Omega} w(x, t; y, \tau) dx dt \leq \int_a^b \int_{\mathbb{R}^2} w(x, t; y, \tau) dx dt \\
 &= \frac{1}{\varrho C_p} \int_a^b H(K(t) - K(\tau)) dt \leq \frac{b-a}{\varrho C_p}.
 \end{aligned}$$

- d) Para cada $s > 0$ y $\varphi \in \mathcal{D} = \mathcal{D}(\mathbb{R}^2)$, denotando $\mathcal{D}' = \mathcal{D}'(\mathbb{R}^2)$, gracias al apartado b) se verifica que

$$\begin{aligned}
 \langle \varrho C_p \xi(x-y, s), \varphi \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} &= \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) \varphi(x) dx \\
 &= \varrho C_p \varphi(y) \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) dx \\
 &\quad + \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) (\varphi(x) - \varphi(y)) dx \\
 &= \varphi(y) H(s) + \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) (\varphi(x) - \varphi(y)) dx \\
 &= \varphi(y) + \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) (\varphi(x) - \varphi(y)) dx.
 \end{aligned}$$

Ahora, denotando $L = \|\varphi'\|_{\mathcal{C}(\mathbb{R}^2)}$, basta hacer el cambio de variable (4.9) para obtener el

resultado, puesto que

$$\begin{aligned}
\rho C_p \left| \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x-y, s) (\varphi(x) - \varphi(y)) dx \right| &\leq \frac{\rho C_p L}{4\pi s} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{4s}} |x-y| dx \\
&= \frac{\rho C_p L}{4\pi s} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} r^2 dr d\theta \\
&= \frac{2\pi \rho C_p L}{4\pi s} \int_0^\infty e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} r^2 dr \\
&= -L \int_0^\infty \left(-\frac{2\rho C_p r}{4s} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} \right) r dr \\
&= -L \left(r e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} \Big|_{r=0}^{r=\infty} - \int_0^\infty e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} dr \right) \\
&= L \int_0^\infty e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{r^2}{4s}} dr \\
&= \frac{2L}{\sqrt{\rho C_p}} \sqrt{s} \int_0^\infty e^{-z^2} dz \\
&= \frac{L\sqrt{\pi}}{\sqrt{\rho C_p}} \sqrt{s} \xrightarrow{s \rightarrow 0^+} 0.
\end{aligned}$$

e) Para cada $x \in \mathbb{R}^2$ y $t < \tau$, se tiene que

$$w(x, t; y, \tau) = \frac{1}{4\pi(K(t) - K(\tau))} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{K(t)-K(\tau)}}.$$

Por una parte,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau) &= \frac{1}{4\pi} \frac{k(t)}{(K(t) - K(\tau))^2} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{K(t)-K(\tau)}} \\
&\quad - \frac{1}{4\pi} \frac{1}{K(t) - K(\tau)} \frac{\rho C_p |x-y|^2 k(t)}{4(K(t) - K(\tau))^2} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{K(t)-K(\tau)}} \\
&= \frac{k(t)w(x, t; y, \tau)}{K(t) - K(\tau)} \left(1 - \frac{\rho C_p |x-y|^2}{4(K(t) - K(\tau))} \right).
\end{aligned}$$

Por otra parte, para $i = 1, 2$,

$$\left\{ \begin{aligned}
\frac{\partial w}{\partial x_i}(x, t; y, \tau) &= \frac{1}{4\pi(K(t) - K(\tau))} \left(-\frac{2\rho C_p(x_i - y_i)}{4(K(t) - K(\tau))} \right) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \frac{|x-y|^2}{K(t)-K(\tau)}} \\
&= -\frac{\rho C_p(x_i - y_i)}{2(K(t) - K(\tau))} w(x, t; y, \tau) \\
\frac{\partial^2 w}{\partial x_i^2}(x, t; y, \tau) &= -\frac{\rho C_p}{2(K(t) - K(\tau))} w(x, t; y, \tau) \\
&\quad + \frac{\rho C_p(x_i - y_i)}{2(K(t) - K(\tau))} \frac{\rho C_p(x_i - y_i)}{2(K(t) - K(\tau))} w(x, t; y, \tau) \\
&= -\frac{\rho C_p w(x, t; y, \tau)}{2(K(t) - K(\tau))} \left(1 - (x_i - y_i)^2 \frac{\rho C_p}{2(K(t) - K(\tau))} \right).
\end{aligned} \right.$$

En consecuencia,

$$\begin{aligned}
k(t)\Delta_x w(x, t; y, \tau) &= -\frac{k(t)\varrho C_p w(x, t; y, \tau)}{2(K(t) - K(\tau))} \left(2 - \frac{\varrho C_p |x - y|^2}{2(K(t) - K(\tau))} \right) \\
&= -\varrho C_p \frac{k(t)w(x, t; y, \tau)}{K(t) - K(\tau)} \left(1 - \frac{\varrho C_p |x - y|^2}{4(K(t) - K(\tau))} \right) \\
&= -\varrho C_p \frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau). \quad \square
\end{aligned}$$

Proposición 4.2.3 (Solución fundamental del operador \mathcal{L}^*) Fijados $y \in B_R$ y $\tau \in (0, t_f)$, la función $w : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida en (4.8) verifica

$$\mathcal{L}^*(w(x, t; y, \tau)) = \delta(x - y, t - \tau) \text{ en } \mathcal{D}'(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}).$$

DEMOSTRACIÓN. Debemos demostrar que para cada $\varphi \in \mathcal{D} = \mathcal{D}(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R})$ se verifica que

$$\begin{aligned}
I &\doteq \left\langle -\varrho C_p \frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau) - k(t)\Delta_x w(x, t; y, \tau), \varphi(x, t) \right\rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\
&= \varphi(y, \tau) (= \langle \delta(x - y, t - \tau), \varphi(x, t) \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}}),
\end{aligned}$$

donde $\mathcal{D}' = \mathcal{D}'(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R})$.

En primer lugar, nótese que

$$\begin{aligned}
I &= \left\langle -\frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau), \varrho C_p \varphi(x, t) \right\rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} - \langle \Delta_x w(x, t; y, \tau), k(t)\varphi(x, t) \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\
&= \left\langle w(x, t; y, \tau), \varrho C_p \frac{\partial \varphi}{\partial t}(x, t) \right\rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} - \langle w(x, t; y, \tau), k(t)\Delta \varphi(x, t) \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^2} w(x, t; y, \tau) \left(\varrho C_p \frac{\partial \varphi}{\partial t}(x, t) - k(t)\Delta \varphi(x, t) \right) dx dt.
\end{aligned}$$

En la última igualdad hemos usado que w es localmente integrable en $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ (según el apartado c) del Lema 4.2.2) y la equivalencia entre las funciones localmente integrables y las distribuciones regulares (cf., por ejemplo, [73, pág. 23]).

Además, puesto que

$$w(x, t; y, \tau) = 0 \text{ si } t \geq \tau,$$

se tiene que

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\tau} \int_{\mathbb{R}^2} w(x, t; y, \tau) \left(\varrho C_p \frac{\partial \varphi}{\partial t}(x, t) - k(t)\Delta \varphi(x, t) \right) dx dt \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\tau - \varepsilon} \int_{\mathbb{R}^2} w(x, t; y, \tau) \left(\varrho C_p \frac{\partial \varphi}{\partial t}(x, t) - k(t)\Delta \varphi(x, t) \right) dx dt.
\end{aligned}$$

Integrando por partes, el apartado e) del Lema 4.2.2 permite escribir

$$\begin{aligned}
I &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} (\varrho C_p w(x, t; y, \tau) \varphi(x, t) \Big|_{t=-\infty}^{t=\tau-\varepsilon}) dx \\
&\quad + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\tau-\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^2} \underbrace{\left(-\varrho C_p \frac{\partial w}{\partial t}(x, t; y, \tau) - k(t) \Delta_x w(x, t; y, \tau) \right)}_{=0} \varphi(x, t) dx dt \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} \varrho C_p \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) \varphi(x, \tau - \varepsilon) dx \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} \varrho C_p \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) \varphi(x, \tau) dx \\
&\quad + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} \varrho C_p \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) (\varphi(x, \tau - \varepsilon) - \varphi(x, \tau)) dx.
\end{aligned}$$

El segundo límite de la esta igualdad es nulo pues, si denotamos por

$$L = \left\| \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\|_{\mathcal{C}(\mathbb{R}^3)},$$

el apartado b) del Lema 4.2.2 asegura la acotación

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{\mathbb{R}^2} \varrho C_p \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) (\varphi(x, \tau - \varepsilon) - \varphi(x, \tau)) dx \right| \\
&\leq L \varepsilon \varrho C_p \int_{\mathbb{R}^2} \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) dx = L \varepsilon H(K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) = L \varepsilon.
\end{aligned}$$

Finalmente, aplicando el apartado d) del Lema 4.2.2, se concluye que

$$\begin{aligned}
I &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} \varrho C_p \xi(x - y, K(\tau - \varepsilon) - K(\tau)) \varphi(x, \tau) dx \\
&= \langle \delta(x - y), \varphi(x, \tau) \rangle_{\mathcal{D}'(\mathbb{R}^2) \times \mathcal{D}(\mathbb{R}^2)} = \varphi(y, \tau). \quad \square
\end{aligned}$$

Observación 4.2.4 Aunque no será necesario para la obtención de nuestros resultados, resaltamos que la Proposición 4.2.3 permite, formalmente, representar cualquier función $u \in \mathcal{C}(B_R \times (0, t_f))$ como

$$u(y, \tau) = \int_0^{\tau} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w(x, t; y, \tau)) u(x, t) dx dt \quad (4.10)$$

(cf., por ejemplo, [40, pág. 69]). \square

La solución fundamental del operador \mathcal{L}^* que hemos construido verifica la condición (4.6). El siguiente paso es demostrar que para ella, a pesar de que no pertenece al espacio X , es válida la igualdad descrita en el Corolario 4.1.6. Previamente, necesitamos un resultado técnico:

Lema 4.2.5 Sean Ω un abierto acotado de \mathbb{R}^N y $f \in \mathcal{C}^p(\Omega) \cap L^2(\Omega)$, $p \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Entonces, para cada abierto ω fuertemente contenido en Ω (es decir, $\bar{\omega} \subset \Omega$) existe una sucesión $\{f_\delta\}_\delta \subset \mathcal{D}(\Omega)$ tal que:

- $\{f_\delta\}_\delta$ converge a f fuertemente en $L^2(\Omega)$.
- $\{D^\alpha f_\delta\}_\delta$ converge a $D^\alpha f$ uniformemente en $\mathcal{C}(\bar{\omega})$ para $|\alpha| \leq p$.

DEMOSTRACIÓN. En primer lugar, puesto que $f \in L^2(\Omega)$, existe una sucesión $\{\hat{f}_\delta\}_\delta \subset \mathcal{D}(\Omega)$ que converge fuertemente a f en $L^2(\Omega)$ (véase, v. gr., [4, pág. 71]). Además, el Teorema de Weierstrass asegura que existe una sucesión $\{\check{f}_\delta\}_\delta \subset \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega})$ con la propiedad de que todas sus derivadas de orden menor o igual que p convergen uniformemente a las respectivas derivadas de f en $\bar{\omega}$ (cf., por ejemplo, [74, pág. 18]).

A continuación, dado $d = \text{dist}(\bar{\omega}, \partial\Omega) > 0$, es claro que si se elige $\delta < \frac{d}{3}$, entonces el δ -entorno ω_δ de ω (los puntos de \mathbb{R}^N que distan de $\bar{\omega}$ menos que δ) verifica que $\bar{\omega}_\delta \subset \Omega$. Para cada $\delta < \frac{d}{3}$ consideramos una función f_δ que verifique

$$f_\delta = \begin{cases} \check{f}_\delta & \text{en } \bar{\omega} \\ \hat{f}_\delta & \text{en } \Omega \setminus \omega_\delta, \end{cases}$$

definida en $\omega_\delta \setminus \bar{\omega}$ de forma que esté uniformemente acotada en δ y que sea de clase infinito en Ω .

Obviamente, la sucesión así definida verifica que $\{f_\delta\}_\delta \subset \mathcal{D}(\Omega)$ y cumple el apartado b). Además,

$$\int_{\Omega} |f_\delta(x) - f(x)|^2 dx = \int_{\Omega \setminus \omega_\delta} |\hat{f}_\delta(x) - f(x)|^2 dx + \int_{\omega_\delta \setminus \bar{\omega}} |f_\delta(x) - f(x)|^2 dx + \int_{\bar{\omega}} |\check{f}_\delta(x) - f(x)|^2 dx.$$

Nótese que los tres sumandos del segundo miembro tienden a cero cuando $\delta \rightarrow 0$: el primero y el tercero, por las respectivas convergencias de las sucesiones $\{\hat{f}_\delta\}_\delta$ y $\{\check{f}_\delta\}_\delta$; el segundo, por la acotación uniforme en δ del integrando y el hecho de tender a cero la medida del dominio de integración. \square

Estamos ya en condiciones de demostrar una fórmula que proporciona una representación de la solución del problema (4.5) en términos de sus valores en la frontera:

Corolario 4.2.6 *La solución del problema (4.5) puede expresarse, para $(y, \tau) \in B_R \times (0, t_f)$, como*

$$\begin{aligned} v(y, \tau) &= \frac{h}{4\pi} \int_0^\tau \frac{f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0}{K(t) - K(\tau)} \int_{\partial B_R} e^{-\frac{eC_p|x-y|^2}{4(K(t)-K(\tau))}} dx dt \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} \int_0^\tau \frac{k(t)\bar{v}(R, t)}{K(t) - K(\tau)} \int_{\partial B_R} \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left(e^{-\frac{eC_p|x-y|^2}{4(K(t)-K(\tau))}} \right) dx dt. \end{aligned} \quad (4.11)$$

DEMOSTRACIÓN. Para aligerar la notación escribiremos $w(x, t)$ (o, incluso, w) y no explicitaremos los parámetros y y τ . En primer lugar, nótese que para todo $(y, \tau) \in B_R \times (0, t_f)$ la función w verifica la condición (4.6). Si w perteneciera al espacio X , la igualdad (4.11) se obtendría directamente de (4.10) (si ésta siguiera verificándose) sin más que aplicar el Corolario 4.1.6, puesto que la relación

$$H(K(t) - K(\tau)) = H\left(\int_t^\tau k(z) dz\right) = \begin{cases} 0 & \text{si } \tau \leq t \\ 1 & \text{si } \tau > t, \end{cases}$$

permitiría escribir

$$\int_0^{t_f} (f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0) \int_{\partial B_R} w dx dt = \frac{1}{4\pi} \int_0^\tau \frac{f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0}{K(t) - K(\tau)} \int_{\partial B_R} e^{-\frac{eC_p|x-y|^2}{4(K(t)-K(\tau))}} dx dt$$

y

$$\int_0^{t_f} k(t) \bar{v}(R, t) \int_{\partial B_R} \frac{\partial w}{\partial \vec{n}} dx dt = \frac{1}{4\pi} \int_0^\tau \frac{k(t) \bar{v}(R, t)}{K(t) - K(\tau)} \int_{\partial B_R} \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left(e^{-\frac{\rho C_p |x-y|^2}{4(K(t)-K(\tau))}} \right) dx dt.$$

Vamos a demostrar que, a pesar de que $w \notin X$, la igualdad (4.11) sigue siendo correcta. Para ello, definimos

$$\varepsilon^* = \frac{\min\{R - \|y\|, \tau, t_f - \tau\}}{2}$$

y denotamos por Q_ε el cilindro

$$Q_\varepsilon = B_\varepsilon(y) \times (\tau - \varepsilon, \tau + \varepsilon)$$

para cada $0 < \varepsilon < \varepsilon^*$. Esta elección de ε^* asegura que

$$\overline{Q_{\varepsilon_1}} \subset \overline{Q_{\varepsilon_2}} \subset B_R \times (0, t_f), \quad 0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \leq \varepsilon^*.$$

Para dichos valores de ε elegimos una función $\eta_\varepsilon \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R})$ verificando

$$\eta_\varepsilon(x, t) = \begin{cases} 0, & (x, t) \in \overline{Q_{\frac{\varepsilon}{2}}} \\ \in [0, 1], & (x, t) \in Q_\varepsilon \setminus \overline{Q_{\frac{\varepsilon}{2}}} \\ 1, & (x, t) \notin Q_\varepsilon \end{cases}$$

y, a partir de ella, construimos la función

$$w_\varepsilon(x, t) = \eta_\varepsilon(x, t)w(x, t).$$

Nótese que $w_\varepsilon \in X$ y verifica la condición (4.6). Por tanto, aplicando el Corolario 4.1.6, se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v dx dt &= h \int_0^{t_f} (f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0) \int_{\partial B_R} w_\varepsilon(x, t) dx dt \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \bar{v}(R, t) \int_{\partial B_R} \frac{\partial w_\varepsilon}{\partial \vec{n}}(x, t) dx dt \\ &= h \int_0^{t_f} (f(t) - \bar{v}(R, t) - T_0) \int_{\partial B_R} w(x, t) dx dt \\ &\quad - \int_0^{t_f} k(t) \bar{v}(R, t) \int_{\partial B_R} \frac{\partial w}{\partial \vec{n}}(x, t) dx dt, \end{aligned}$$

puesto que w_ε coincide con w en un entorno de ∂B_R (lo que hace que también coincidan sus derivadas normales en ∂B_R).

Sólo nos queda probar que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v dx dt = v(y, \tau).$$

En primer lugar, tomando en el Lema 4.2.5 $f = v$, $\Omega = B_R \times (0, t_f)$ y $\omega = Q_{\varepsilon^*}$, podemos asegurar la existencia de una sucesión $\{v_\delta\}_\delta \subset \mathcal{D}(B_R \times (0, t_f))$ que converge a v fuertemente

en $L^2(B_R \times (0, t_f))$ y uniformemente en $\overline{Q_{\varepsilon^*}}$; además, la sucesión $\{\mathcal{L}(v_\delta)\}_\delta \subset \mathcal{D}(B_R \times (0, t_f))$ converge uniformemente a $\mathcal{L}(v) = 0$ en $\overline{Q_{\varepsilon^*}}$. En particular, se verifica que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} v_\delta(y, \tau) = v(y, \tau) \quad (4.12)$$

y existe una constante $C > 0$ (independiente de δ) tal que

$$\|\mathcal{L}(v_\delta)\|_{C(\overline{Q_{\varepsilon^*}})} \leq C \quad (4.13)$$

para todo $\delta > 0$.

Teniendo en cuenta que $\mathcal{L}^*(w_\varepsilon) \in L^2(B_R \times (0, t_f))$, podemos escribir

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v dx dt = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt.$$

Veamos que, de hecho,

$$\lim_{(\varepsilon, \delta) \rightarrow (0, 0)} \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt = v(y, \tau),$$

con lo que se tendrá el resultado. Para ello, para cada $\sigma > 0$ debemos encontrar $\delta_0 = \delta_0(\sigma) > 0$ y $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\sigma) > 0$ tales que, si $0 < \delta < \delta_0$ y $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, entonces

$$\left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - v(y, \tau) \right| < \sigma.$$

Aplicando la desigualdad triangular, escribimos

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - v(y, \tau) \right| &\leq \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - v_\delta(y, \tau) \right| \\ &\quad + |v_\delta(y, \tau) - v(y, \tau)|. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Para acotar el primer sumando del segundo miembro de (4.14) utilizamos que, para cada función $\varphi \in \mathcal{D}(B_R \times (0, t_f))$ y $0 < \varepsilon < \varepsilon^*$, se verifica que

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} (w_\varepsilon - w) \varphi dx dt \right| &= \left| \int_{Q_\varepsilon} (\eta_\varepsilon - 1) w \varphi dx dt \right| \leq \int_{Q_\varepsilon} |w| |\varphi| dx dt \\ &\leq \|\varphi\|_{C(\overline{Q_{\varepsilon^*}})} \int_{Q_\varepsilon} |w| dx dt \leq \frac{2\varepsilon}{\varrho C_p} \|\varphi\|_{C(\overline{Q_{\varepsilon^*}})}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde en la última desigualdad se ha usado lo demostrado en el apartado c) del Lema 4.2.2.

Tomando, en particular, $\varphi = \mathcal{L}(v_\delta)$ en la desigualdad (4.15) y denotando $\mathcal{D} = \mathcal{D}(B_R \times (0, t_f))$ y $\mathcal{D}' = \mathcal{D}'(B_R \times (0, t_f))$, la Proposición 4.2.3 permite escribir

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - v_\delta(y, \tau) \right| &= \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - \langle \mathcal{L}^*(w), v_\delta \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \right| \\ &= \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} w_\varepsilon \mathcal{L}(v_\delta) dx dt - \langle w, \mathcal{L}(v_\delta) \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \right| \\ &= \left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} (w_\varepsilon - w) \mathcal{L}(v_\delta) dx dt \right| \\ &\leq \frac{2\varepsilon}{\varrho C_p} C, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado la ya citada equivalencia entre funciones localmente integrables y distribuciones regulares, y donde C viene dada en la acotación (4.13). Así pues, eligiendo

$$\varepsilon_0 = \min \left\{ \frac{\rho C_p \sigma}{4C}, \varepsilon^* \right\}$$

se verifica que

$$\left| \int_0^{t_f} \int_{B_R} \mathcal{L}^*(w_\varepsilon) v_\delta dx dt - v_\delta(y, \tau) \right| < \frac{\sigma}{2}$$

para todo $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$.

En cuanto al segundo sumando del segundo miembro de (4.14), basta aplicar la convergencia puntual (4.12) para garantizar la existencia de un $\delta_0 > 0$ de forma que

$$|v_\delta(y, \tau) - v(y, \tau)| < \frac{\sigma}{2}$$

para todo $\delta \in (0, \delta_0)$. \square

Observación 4.2.7 La función definida en B_R que a cada y le hace corresponder $e^{-c|x-y|^2}$, con $x \in \partial B_R$, no es radial. Tampoco es radial la función definida en ∂B_R que a cada x le hace corresponder $e^{-c|x-y|^2}$, con $y \in B_R$. Sin embargo, sí que lo es la función definida en B_R por

$$y \longmapsto \int_{\partial B_R} e^{-c|x-y|^2} dx$$

y, por tanto, también es radial la expresión dada en (4.11) (aunque, a primera vista, pudiera no parecerlo). \square

Veamos cómo se expresa la solución del problema (4.5) en coordenadas polares:

Corolario 4.2.8 Denotando por

$$\gamma(r, \theta) = R^2 - 2Rr \cos \theta + r^2 \text{ y } g(t, \tau) = \frac{1}{K(\tau) - K(t)},$$

la solución del problema (4.5) verifica:

$$\begin{aligned} \bar{v}(r, t) = & \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (f(\tau) - \bar{v}(R, \tau) - T_0) g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau \\ & + \frac{\rho C_p R}{8\pi} \int_0^t k(\tau) \bar{v}(R, \tau) g(t, \tau) \int_0^{2\pi} (R - r \cos \theta) g(t, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau \end{aligned} \quad (4.16)$$

para $r \in [0, R)$ y $t \in [0, t_f]$.

DEMOSTRACIÓN. Para $(x, t) \in B_R \times (0, t_f)$ el Corolario 4.2.6 permite escribir, tras intercambiar los papeles de las variables t y τ y de las variables x e y ,

$$\begin{aligned} v(x, t) = & \frac{h}{4\pi} \int_0^t (f(\tau) - \bar{v}(R, \tau) - T_0) g(t, \tau) \int_{\partial B_R} e^{-\frac{\rho C_p}{4} |x-y|^2 g(t, \tau)} dy d\tau \\ & - \frac{1}{4\pi} \int_0^t k(\tau) \bar{v}(R, \tau) g(t, \tau) \int_{\partial B_R} \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left(e^{-\frac{\rho C_p}{4} |x-y|^2 g(t, \tau)} \right) dy d\tau. \end{aligned}$$

Sea $(r, t) \in [0, R) \times (0, t_f]$; puesto que la función v es radial, $\bar{v}(r, t) = v(x, t)$ para todo x con $|x| = r$. Si elegimos $x = (r, 0) \in \mathbb{R}^2$, para cada $y = (R \cos \theta, R \sin \theta) \in \partial B_R$ se tiene que

$$|x - y|^2 = R^2 - 2Rr \cos \theta + r^2 = \gamma(r, \theta).$$

Por tanto, mediante el cambio de variable $y = (R \cos \theta, R \sin \theta)$ obtenemos

$$\int_{\partial B_R} e^{-\frac{\rho C_p}{4}|x-y|^2 g(t, \tau)} dy = R \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta.$$

Además, puesto que la derivada en la dirección normal exterior a la frontera de la bola B_R es la derivada respecto a la coordenada radial, podemos escribir

$$\begin{aligned} \int_{\partial B_R} \frac{\partial}{\partial \bar{n}} \left(e^{-\frac{\rho C_p}{4}|x-y|^2 g(t, \tau)} \right) dy &= R \int_0^{2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(e^{-\frac{\rho C_p}{4}(\rho^2 - 2\rho r \cos \theta + r^2)g(t, \tau)} \right) \Big|_{\rho=R} d\theta \\ &= -\frac{\rho C_p R}{2} \int_0^{2\pi} (R - r \cos \theta)g(t, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta, \end{aligned}$$

con lo que se llega a la expresión

$$\begin{aligned} \bar{v}(r, t) &= \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (f(\tau) - \bar{v}(R, \tau) - T_0)g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau \\ &\quad + \frac{R}{4\pi} \int_0^t k(\tau)\bar{v}(R, \tau)g(t, \tau) \frac{\rho C_p}{2} \int_0^{2\pi} (R - r \cos \theta)g(t, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau. \end{aligned}$$

Esta fórmula es también válida, de forma obvia, para $t = 0$ y se extiende por continuidad a $t = t_f$. \square

Describimos, a continuación, una forma alternativa de esta representación:

Corolario 4.2.9 *La solución del problema (4.5) puede también expresarse como*

$$\begin{aligned} \bar{v}(r, t) &= \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (f(\tau) - \bar{v}(R, \tau) - T_0)g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau \\ &\quad + \frac{R}{2\pi} \int_0^t \frac{\partial \bar{v}}{\partial \tau}(R, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau \end{aligned}$$

para $r \in [0, R)$ y $t \in [0, t_f]$.

DEMOSTRACIÓN. Integrando por partes (respecto a τ) en el segundo sumando del segundo miembro de la ecuación (4.16) y teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial g}{\partial \tau}(t, \tau) = -\frac{K'(\tau)}{(K(\tau) - K(t))^2} = k(\tau)g^2(t, \tau),$$

se obtiene

$$\begin{aligned}
& \int_0^t k(\tau) \bar{v}(R, \tau) g(t, \tau) \frac{\rho C_p}{4} \int_0^{2\pi} (R - r \cos \theta) g(t, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau \\
&= - \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} \int_0^t \bar{v}(R, \tau) \left(-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) k(\tau) g^2(t, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} \right) d\tau d\theta \\
&= - \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} \int_0^t \bar{v}(R, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \left(e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} \right) d\tau d\theta \\
&= - \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} \left(\underbrace{\bar{v}(R, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} \Big|_{\tau=0}^{\tau=t}}_{=0} - \int_0^t \frac{\partial \bar{v}}{\partial \tau}(R, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\tau \right) d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} \int_0^t \frac{\partial \bar{v}}{\partial \tau}(R, \tau) e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\tau d\theta,
\end{aligned}$$

lo cual lleva al resultado. \square

Deshaciendo los cambios de variable que nos permitieron pasar del problema original al problema con ecuación y condición inicial homogéneas, llegamos al resultado fundamental de esta sección, el cual proporciona una representación de la solución del problema de partida escrita en función de sus valores en la frontera.

Teorema 4.2.10 Denotando

$$m(t) = \bar{T}(R, t) \text{ y } Q(t, \tau) = e^{\frac{\alpha}{\rho C_p} (P(t) - P(\tau))},$$

la solución del problema (4.1) puede expresarse como

$$\begin{aligned}
\bar{T}(r, t) &= T_0 Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (T^e(\tau) - m(\tau)) Q(t, \tau) g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau \\
&\quad + \frac{R}{2\pi} \int_0^t \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau
\end{aligned}$$

para $r \in [0, R]$ y $t \in [0, t_f]$.

DEMOSTRACIÓN. A partir del Corolario 4.2.9, deshaciendo en primer lugar el cambio de variable (4.4), se tiene que

$$\begin{aligned}
\bar{u}(r, t) &= T_0 + \bar{v}(r, t) = T_0 + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (f(\tau) - \bar{u}(R, \tau)) g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau \\
&\quad + \frac{R}{2\pi} \int_0^t \frac{\partial \bar{u}}{\partial \tau}(R, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} e^{-\frac{\rho C_p}{4} \gamma(r, \theta) g(t, \tau)} d\theta d\tau.
\end{aligned}$$

Si a continuación deshacemos el cambio (4.2), teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{u}}{\partial \tau}(R, \tau) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left(m(\tau) e^{\frac{\alpha}{\rho C_p} (P(0) - P(\tau))} \right) \\
&= (m'(\tau) - P'(\tau) \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau)) e^{\frac{\alpha}{\rho C_p} (P(0) - P(\tau))} \\
&= (m'(\tau) - P'(\tau) \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau)) Q(0, \tau)
\end{aligned}$$

y que

$$Q(t, 0)Q(0, \tau) = Q(t, \tau),$$

llegamos a

$$\begin{aligned} \bar{T}(r, t) &= \bar{u}(r, t)Q(t, 0) \\ &= T_0Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (T^e(\tau) - m(\tau))Q(t, \tau)g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau \\ &\quad + \frac{R}{2\pi} \int_0^t (m'(\tau) - P'(\tau)\frac{\alpha}{\rho C_p}m(\tau))Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau. \quad \square \end{aligned}$$

Observación 4.2.11 Aunque la función g verifica

$$\lim_{\tau \rightarrow t} g(t, \tau) = \lim_{\tau \rightarrow t} \frac{1}{K(\tau) - K(t)} = \infty,$$

los integrandos que aparecen en la expresión del Teorema 4.2.10 están bien definidos; más precisamente, ambos se anulan en $\tau = t$. Este hecho se tendrá en cuenta a la hora de implementar numéricamente esta fórmula. \square

Como es lógico, se tiene la análoga versión alternativa para la temperatura T :

Corolario 4.2.12 La solución del problema (4.1) también puede expresarse como

$$\begin{aligned} \bar{T}(r, t) &= T_0Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t (T^e(\tau) - m(\tau))Q(t, \tau)g(t, \tau) \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)} d\theta d\tau \\ &\quad + \frac{\rho C_p R}{8\pi} \int_0^t k(\tau)(m(\tau) - T_0Q(\tau, 0))Q(t, \tau)g(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{(R - r \cos \theta)g(t, \tau)}{e^{\frac{\rho C_p}{4}\gamma(r, \theta)g(t, \tau)}} d\theta d\tau \end{aligned}$$

para $r \in [0, R]$ y $t \in [0, t_f]$.

DEMOSTRACIÓN. Este resultado se prueba de forma totalmente análoga a como se demuestra el Teorema 4.2.10. \square

4.3. Unicidad de solución del problema inverso

En esta sección abordamos la unicidad de solución del problema inverso, entendiéndolo por ello que la función k esté unívocamente determinada por los valores que tome la función \bar{T} en R y en otro punto $r_0 \in [0, R]$.

Es de reseñar que esto no siempre ocurre. Por ejemplo, si la temperatura exterior evoluciona en la forma

$$T^e(t) = T_0 e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(t) - P(0))}$$

la propia función $T(t) = T^e(t)$ es solución del problema directo (4.1), independientemente de cuál sea la función k .

Para asegurar la unicidad de solución del problema de identificar el coeficiente de conductividad, restringiremos el contexto en que se plantea el problema y trabajaremos bajo las siguientes hipótesis:

(H1) $T^e(t) \equiv T_0$ para todo $t \in [0, t_f]$.

(H2) La presión P es lineal y estrictamente creciente. Por tanto, $P'(t) \equiv \beta > 0$, $t \in [0, t_f]$.

Observación 4.3.1 Nótese que, dado que nuestro objetivo es identificar k , lo que suponemos es que podemos diseñar un experimento que satisface estas hipótesis. \square

Gracias al principio de comparación se llega a los siguientes resultados, que nos ayudarán a demostrar la unicidad del coeficiente k .

Lema 4.3.2 *Bajo las hipótesis (H1), (H2) y siendo k lipschitziana en $[0, t_f]$ con $k \geq k_0 > 0$, se verifica que*

$$T_0 \leq T(x, t) \leq T_0 e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(t)-P(0))} \quad (4.17)$$

para todo $(x, t) \in \overline{B_R} \times [0, t_f]$. Además, para cada $t^* \in (0, t_f)$ existe $\tau^* \in (0, t^*)$ tal que

$$T_0 < m(\tau^*).$$

DEMOSTRACIÓN. La desigualdad (4.17) se transforma, deshaciendo los cambios de variable utilizados previamente, en la desigualdad para v

$$f(t) - T_0 \leq v(x, t) \leq 0. \quad (4.18)$$

Es sencillo comprobar que, aplicando el principio de comparación descrito en la Proposición 4.1.7 a las funciones $v_1 = f(t) - T_0$ y $v_2 = v$ se obtiene la desigualdad de la izquierda. Análogamente, la elección de $v_1 = v$ y $v_2 = 0$ en dicho resultado proporciona la desigualdad de la derecha.

Demostremos el aserto final razonando por contradicción: Supongamos que existe un intervalo $(0, t^*)$, con $0 < t^* < t_f$, en el que $m(t) = T_0$ para todo $t \in (0, t^*)$. En tal caso, la función T sería solución del problema

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k(t)\Delta T = \alpha P'(t)T & \text{en } B_R \times (0, t^*) \\ k(t) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0 & \text{en } \partial B_R \times (0, t^*) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases}$$

Gracias a la unicidad de solución de este problema (véase, v. gr., [63, Teorema 8, pág. 176]), nuestra función T tendría que coincidir en $\partial B_R \times (0, t^*)$ con la (única) solución de este problema que es

$$T_0 e^{\frac{\alpha}{\rho C_p}(P(t)-P(0))},$$

la cual no verifica $m(t) = T_0$ para ningún $t > 0$. \square

Lema 4.3.3 *Bajo las hipótesis (H1), (H2), supongamos que $k \in \mathcal{C}^1([0, t_f])$, $k \geq k_0 > 0$ y que se verifica la condición*

$$k'(t) \leq k(t) \frac{f'(t)}{f(t) - T_0} = k(t) \frac{\alpha\beta}{\rho C_p} \frac{1}{e^{\frac{\alpha\beta}{\rho C_p}t} - 1}. \quad (4.19)$$

cuando $t \in [0, t_f]$. Entonces,

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) - \frac{\alpha}{\rho C_p} T(x, t)P'(t) \leq 0 \quad (4.20)$$

para todo $(x, t) \in \overline{B_R} \times [0, t_f]$. En particular,

$$m'(t) - \frac{\alpha}{\varrho C_p} m(t) P'(t) = m'(t) - \frac{\alpha\beta}{\varrho C_p} m(t) \leq 0$$

si $t \in (0, t_f)$.

DEMOSTRACIÓN. Nuevamente transformamos, mediante los cambios de variable, la desigualdad (4.20) en la correspondiente desigualdad para v , que no es otra que

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, t) \leq 0.$$

Si derivamos respecto a t en las ecuaciones del problema (4.5) obtenemos que $\frac{\partial v}{\partial t}$ verifica las igualdades

$$\varrho C_p \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) - k \Delta \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) = k' \Delta v = \frac{k'}{k} (k \Delta v) = \varrho C_p \frac{k'}{k} \frac{\partial v}{\partial t}$$

y

$$k \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) + h \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) = h f' - k' \frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = h f' - \frac{k'}{k} h (f - T_0 - v).$$

Además, puesto que v es constantemente cero en el instante inicial, la primera ecuación de (4.5) nos asegura que

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, 0) = 0$$

Así pues, hemos demostrado que $\mathcal{V} = \frac{\partial v}{\partial t}$ es solución del problema

$$\begin{cases} \varrho C_p \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial t} - k \Delta \mathcal{V} = \varrho C_p \frac{k'}{k} \mathcal{V} & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \vec{n}} + h \mathcal{V} = h \left(f' - \frac{k'}{k} (f - T_0 - v) \right) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ \mathcal{V} = 0 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases}$$

Si ahora consideramos la función $\zeta = \frac{1}{k} \mathcal{V} = \frac{1}{k} \frac{\partial v}{\partial t}$ (es decir, realizamos el cambio de variable análogo a (4.2)), tendremos que ζ verifica

$$\begin{cases} \varrho C_p \frac{\partial \zeta}{\partial t} - k \Delta \zeta = 0 & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k \frac{\partial \zeta}{\partial \vec{n}} + h \zeta = \frac{h}{k} \left(f' - \frac{k'}{k} (f - T_0 - v) \right) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ \zeta = 0 & \text{en } B_R \times \{0\}. \end{cases}$$

La condición (4.19) nos servirá para demostrar que

$$\frac{h}{k} \left(f' - \frac{k'}{k} (f - T_0 - v) \right) \leq 0, \quad (x, t) \in \partial B_R \times (0, t_f). \quad (4.21)$$

Con este objetivo, distinguiremos dos casos: los instantes t para los que se tenga que $k'(t) \leq 0$ y los instantes t en que $k'(t) > 0$. Así,

- 1) Si $k'(t) \leq 0$: Gracias a (4.18) sabemos que $f(t) - T_0 - v(x, t) \leq 0$. La desigualdad se obtiene, por tanto, sin más que tener en cuenta que

$$f'(t) = -\frac{\alpha\beta}{\varrho C_p} e^{-\frac{\alpha\beta}{\varrho C_p} t} \leq 0.$$

- 2) Si $k'(t) > 0$: Usando la desigualdad derecha de (4.18), podemos escribir

$$\begin{aligned} \frac{h}{k(t)} \left(f'(t) - \frac{k'(t)}{k(t)} (f(t) - T_0 - v(x, t)) \right) &= \frac{h}{k(t)} \left(f'(t) - \frac{k'(t)}{k(t)} (f(t) - T_0) \right) \\ &\quad + \frac{hk'(t)}{k^2(t)} v(x, t) \\ &\leq \frac{h}{k(t)} \left(f'(t) - \frac{k'(t)}{k(t)} (f(t) - T_0) \right) \\ &= \frac{h}{k^2(t)} (k(t)f'(t) - k'(t)(f(t) - T_0)). \end{aligned}$$

La condición (4.19), junto con el hecho de que $f(t) - T_0 \leq 0$, proporciona el signo requerido.

Una vez probada la desigualdad (4.21), el principio de comparación de la Proposición 4.1.7 es, de nuevo, el argumento que permite concluir el resultado. \square

Observación 4.3.4 En realidad no es necesario exigir tanta regularidad a la función k . Bastaría con que la función k estuviera en $W^{1,\infty}(0, t_f)$ (cf. [4, pág. 155]). \square

Observación 4.3.5 La condición (4.19) sobre el crecimiento de k sólo supone una restricción en los intervalos de tiempo en que la función k crezca (de hecho, la verifican de forma automática las funciones constantes y las decrecientes). Además, puesto que

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{e^{\frac{\alpha\beta}{\varrho C_p} t} - 1} = \infty,$$

dicha condición no supone ninguna restricción sobre k para tiempos cortos.

Las funciones elegidas en los ejemplos numéricos de la Sección 4.4 verifican esta acotación, la cual hay que interpretar como parte de la información a priori necesaria para poder identificar el coeficiente de conductividad. Esta información viene a decir que el coeficiente k no puede tener cambios bruscos, típicos de los procesos en que se produce cambio de fase, lo cual no ocurre en los casos que estamos analizando, como ya se comentó en la Introducción de este capítulo. \square

Con vistas a simplificar la exposición, trataremos en primer lugar el caso en que la conductividad térmica sea constante. Posteriormente, se extenderá la argumentación anterior al caso general.

4.3.1. Caso k constante

Si k es constante, la función g se expresa como

$$g(t, \tau) = \frac{1}{k(t - \tau)}$$

y, gracias al Teorema 4.2.10, la solución del problema (4.1) viene dada por

$$\begin{aligned} \bar{T}(r, t) &= T_0 Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t \frac{T^e(\tau) - m(\tau)}{t - \tau} Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k} \frac{\gamma(r, \theta)}{t - \tau}}}{k} d\theta d\tau \\ &+ \frac{R}{2\pi} \int_0^t \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \theta}{\gamma(r, \theta)} e^{-\frac{\rho C_p}{4k} \frac{\gamma(r, \theta)}{t - \tau}} d\theta d\tau. \end{aligned}$$

Supongamos que existen dos constantes positivas k_1 y k_2 que proporcionan la misma medición $m(t)$ en el extremo derecho R y, además, una misma medición en algún otro punto $r_0 \in [0, R)$. Supongamos, por ejemplo, que $k_1 \geq k_2$ y veamos que, de hecho, $k_1 = k_2$. Denotando por

$$\gamma_0(\theta) = \gamma(r_0, \theta) \text{ y } \psi_0(\theta) = \frac{R - r_0 \cos \theta}{\gamma_0(\theta)},$$

puesto que

$$\begin{aligned} &T_0 Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t \frac{T^e(\tau) - m(\tau)}{t - \tau} Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}}}{k_1} d\theta d\tau \\ &+ \frac{R}{2\pi} \int_0^t \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \psi_0(\theta) e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}} d\theta d\tau \\ &= T_0 Q(t, 0) + \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t \frac{T^e(\tau) - m(\tau)}{t - \tau} Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}}}{k_2} d\theta d\tau \\ &+ \frac{R}{2\pi} \int_0^t \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \psi_0(\theta) e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}} d\theta d\tau, \end{aligned}$$

se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{Rh}{4\pi} \int_0^t \frac{T^e(\tau) - m(\tau)}{t - \tau} Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \left(\frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}}}{k_1} - \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}}}{k_2} \right) d\theta d\tau \\ &+ \frac{R}{2\pi} \int_0^t \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\rho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t, \tau) \int_0^{2\pi} \psi_0(\theta) \left(e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}} - e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t - \tau}} \right) d\theta d\tau. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Para el caso k constante que nos ocupa, podemos concluir que:

a) Existe t^* tal que, para todo $\theta \in [0, 2\pi]$ y todo $\tau \in [0, t^*]$, se cumple

$$\frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t^* - \tau}}}{k_1} - \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t^* - \tau}}}{k_2} \geq 0,$$

con igualdad sólo en el caso en que $k_1 = k_2$. En efecto, en primer lugar, destacamos que, para todo $c > 0$, la función $x e^{-cx}$ es estrictamente decreciente si $x > \frac{1}{c}$ (puesto que su derivada

$e^{-cx}(1 - cx)$ sólo se anula en $\frac{1}{c}$ y es positiva a la izquierda y negativa a la derecha de ese punto). En particular, para

$$c = \frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4(t^* - \tau)} = \frac{\varrho C_p (R^2 - 2Rr_0 \cos \theta + r_0^2)}{4(t^* - \tau)}, \quad (4.23)$$

teniendo en cuenta que

$$c = \frac{\varrho C_p (R^2 - 2Rr_0 \cos \theta + r_0^2)}{4(t^* - \tau)} \geq \frac{\varrho C_p (R - r_0)^2}{4(t^* - \tau)}, \quad \theta \in [0, 2\pi],$$

el resultado se obtiene si se toma t^* verificando

$$\frac{1}{k_2} \geq \frac{1}{k_1} > \frac{4(t^* - \tau)}{\varrho C_p (R - r_0)^2} \geq \frac{1}{c}, \quad \tau \in [0, t^*],$$

es decir,

$$0 < k_2 \leq k_1 < \frac{\varrho C_p (R - r_0)^2}{4(t^* - \tau)}, \quad \tau \in [0, t^*].$$

Esta condición se verifica sin más que elegir t^* de forma que

$$t^* < \frac{\varrho C_p (R - r_0)^2}{4k_1},$$

puesto que, en tal caso, si $\tau \leq t^*$, se tiene que

$$k_1(t^* - \tau) \leq k_1 t^* \leq \frac{\varrho C_p (R - r_0)^2}{4}.$$

b) Dado t^* como en a), es claro que, para todo $\tau \in [0, t^*]$ y todo $\theta \in [0, 2\pi]$,

$$e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_1(t^* - \tau)}} - e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_2(t^* - \tau)}} \geq 0,$$

puesto que la función e^{-cx} es estrictamente decreciente para $c > 0$ (en particular, para el c dado en (4.23)).

Así pues, particularizando la expresión (4.22) en $t = t^*$ se obtiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{Rh}{4\pi} \int_0^{t^*} \frac{T^e(\tau) - m(\tau)}{t^* - \tau} Q(t^*, \tau) \int_0^{2\pi} \left(\frac{e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_1(t^* - \tau)}}}{k_1} - \frac{e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_2(t^* - \tau)}}}{k_2} \right) d\theta d\tau \\ &+ \frac{R}{2\pi} \int_0^{t^*} \left(m'(\tau) - \frac{\alpha}{\varrho C_p} m(\tau) P'(\tau) \right) Q(t^*, \tau) \int_0^{2\pi} \psi_0(\theta) \left(e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_1(t^* - \tau)}} - e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta)}{4k_2(t^* - \tau)}} \right) d\theta d\tau. \end{aligned}$$

El apartado a) anterior y la desigualdad (4.17) determinan que el integrando del primer sumando es no positivo; análogamente, el Lema 4.3.3 y el apartado b) anterior, junto con la propiedad

$$\psi_0(\theta) = \frac{R - r_0 \cos \theta}{\gamma_0(\theta)} \geq \frac{(R - r_0)}{(R + r_0)^2} > 0, \quad \theta \in [0, 2\pi],$$

hacen que el integrando del segundo sumando sea también no positivo. Por tanto, cada integrando en dicha expresión debe ser la función idénticamente nula. Evaluando el primer integrando en el correspondiente instante τ^* del Lema 4.3.2 se tiene que

$$\frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_1} \frac{\gamma_0(\theta)}{t^* - \tau^*}}}{k_1} - \frac{e^{-\frac{\rho C_p}{4k_2} \frac{\gamma_0(\theta)}{t^* - \tau^*}}}{k_2} = 0,$$

por lo que, gracias al apartado a), se concluye que $k_1 = k_2$.

Todo lo anterior queda recogido en el siguiente resultado:

Teorema 4.3.6 Sean T_1 y T_2 las respectivas soluciones de los problemas

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k_1 \Delta T = \alpha P'(t)T & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k_1 \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T^e(t) - T) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\} \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k_2 \Delta T = \alpha P'(t)T & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k_2 \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T^e(t) - T) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\}, \end{cases}$$

siendo k_1 y k_2 dos constantes positivas. Supongamos **(H1)**, **(H2)** y que para todo $t \in [0, t_f]$ se verifica

$$\bar{T}_1(R, t) = \bar{T}_2(R, t) \text{ y } \bar{T}_1(r_0, t) = \bar{T}_2(r_0, t) \text{ para algún } r_0 \in [0, R].$$

Entonces $k_1 = k_2$. \square

4.3.2. Caso k arbitraria

Supongamos que existen funciones k_1 y k_2 distintas que proporcionan la misma medición $m(t)$ en el extremo derecho R y, además, una misma medición en algún otro punto $r_0 \in [0, R)$.

Vamos a suponer que se verifica la siguiente propiedad: existen $t_0 \in [0, t_f]$ y $t^* \in (t_0, t_f]$ tales que

$$\begin{cases} k_1(t) = k_2(t), & t \in [0, t_0] \\ k_1(t) > k_2(t), & t \in (t_0, t^*]. \end{cases}$$

Para ello, las funciones anteriores no deben tener oscilaciones del tipo de las que tiene $x \operatorname{sen}(\frac{1}{x})$ en $x = 0$. Una condición suficiente para que se cumpla esta pequeña restricción es que las funciones k_1 y k_2 sean, además de continuas, localmente analíticas por la derecha en $[0, t_f]$; esta clase de funciones incluye a cualquier función definida a trozos que en cada trozo coincida con un polinomio, una función exponencial, una función trigonométrica, etc. o con funciones que sean composiciones entre ellas.

Denotando por

$$\begin{cases} K_i(t) = \int_t^{t_f} k_i(s) ds, \\ x_i(\tau) = \frac{1}{K_i(\tau) - K_i(t^*)} = \frac{1}{\int_\tau^{t^*} k_i(s) ds}, \end{cases}$$

para $i = 1, 2$, y argumentando de manera análoga a como se hizo en el apartado 4.3.1, se llega a que

$$0 = \frac{Rh}{4\pi} \int_0^{t^*} (T^e(\tau) - m(\tau)) Q(t^*, \tau) \int_0^{2\pi} \left(x_1(\tau) e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta) x_1(\tau)}{4}} - x_2(\tau) e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta) x_2(\tau)}{4}} \right) d\theta d\tau$$

$$+ \frac{R}{2\pi} \int_0^{t^*} \left(m'(\tau) - \frac{\alpha m(\tau) P'(\tau)}{\varrho C_p} \right) Q(t^*, \tau) \int_0^{2\pi} \psi_0(\theta) \left(e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta) x_1(\tau)}{4}} - e^{-\frac{\varrho C_p \gamma_0(\theta) x_2(\tau)}{4}} \right) d\theta d\tau.$$

Para poder llegar a hacer un razonamiento parecido al del caso k constante, veamos en primer lugar que $x_1(\tau) < x_2(\tau)$ si $0 < \tau < t^*$:

a) Si $\tau \in [0, t_0]$

$$x_1(\tau) = \frac{1}{\int_{\tau}^{t^*} k_1(s) ds} = \frac{1}{\int_{\tau}^{t_0} k_1(s) ds + \int_{t_0}^{t^*} k_1(s) ds} = \frac{1}{\int_{\tau}^{t_0} k_2(s) ds + \int_{t_0}^{t^*} k_1(s) ds}$$

$$< \frac{1}{\int_{\tau}^{t_0} k_2(s) ds + \int_{t_0}^{t^*} k_2(s) ds} = x_2(\tau).$$

b) Si $\tau \in [t_0, t^*]$

$$x_1(\tau) = \frac{1}{\int_{\tau}^{t^*} k_1(s) ds} < \frac{1}{\int_{\tau}^{t^*} k_2(s) ds} = x_2(\tau).$$

Por otra parte, utilizando que la función $x e^{-cx}$ es estrictamente decreciente si $x \geq \frac{1}{c}$, para la elección de

$$c = \frac{\varrho C_p}{4} \gamma_0(\theta) = \frac{\varrho C_p (R^2 - 2Rr_0 \cos \theta + r_0^2)}{4}, \quad (4.24)$$

se tiene que

$$x_1(\tau) e^{-cx_1(\tau)} - x_2(\tau) e^{-cx_2(\tau)} > 0$$

siempre que $x_1 \geq \frac{1}{c}$. Esta condición se cumple si, por ejemplo, se pide a la función k (y, por tanto, a las funciones k_1 y k_2 que queremos demostrar que son iguales) que verifique

$$\int_0^{t_f} k(s) ds \leq \frac{\varrho C_p (R - r_0)^2}{4} \leq c,$$

lo cual debe ser interpretado como parte de la información a priori que debe conocerse sobre k para poder determinarla de forma unívoca.

Puesto que la función $f(x) = e^{-cx}$ es decreciente para $c > 0$, la elección de c en (4.24) hace que se tenga

$$e^{-cx_1(\tau)} - e^{-cx_2(\tau)} > 0.$$

Suponiendo las hipótesis **(H1)** y **(H2)**, gracias a los Lemas 4.3.2 y 4.3.3 volvemos a encontrarlos con que la suma de dos integrales definidas de sendas funciones no positivas se anula. Puesto que el primer integrando tiene puntos en los que es estrictamente negativo (todo un entorno del instante τ^* del Lema 4.3.2), llegamos a una contradicción, la cual proviene de suponer que hay puntos en $[0, t_f]$ en los que $k_1 \neq k_2$. Así pues, se concluye que $k_1 = k_2$ en $[0, t_f]$.

Estamos en condiciones de enunciar el siguiente resultado:

Teorema 4.3.7 Sean T_1 y T_2 las respectivas soluciones de los problemas

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k_1(t) \Delta T = \alpha P'(t) T & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k_1(t) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h (T^e(t) - T) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\} \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k_2(t) \Delta T = \alpha P'(t) T & \text{en } B_R \times (0, t_f) \\ k_2(t) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h (T^e(t) - T) & \text{en } \partial B_R \times (0, t_f) \\ T = T_0 & \text{en } B_R \times \{0\}, \end{cases}$$

siendo $k_i \in C^1([0, t_f])$, con $k_i \geq k_0 > 0$, $i = 1, 2$. Supongamos **(H1)**, **(H2)** y que para todo $t \in [0, t_f]$ se verifica

$$\bar{T}_1(R, t) = \bar{T}_2(R, t) \text{ y } \bar{T}_1(r_0, t) = \bar{T}_2(r_0, t) \text{ para algún } r_0 \in [0, R].$$

Si las funciones k_i son localmente analíticas por la derecha en $[0, t_f]$ y verifican

$$\int_0^{t_f} k_i(s) ds \leq \frac{\rho C_p (R - r_0)^2}{4}, \quad i = 1, 2 \quad (4.25)$$

y

$$k'_i(t) \leq k_i(t) \frac{\alpha \beta}{\rho C_p} \frac{1}{e^{\frac{\alpha \beta}{\rho C_p} t} - 1}, \quad t \in [0, t_f], \quad i = 1, 2,$$

entonces $k_1 = k_2$. \square

Observación 4.3.8 El resultado anterior nos indica que si suponemos que las mediciones de que disponemos en r_0 y en R son las correspondientes a una temperatura que se modeliza mediante las ecuaciones (4.1), con k verificando las hipótesis requeridas en el Teorema 4.3.7, entonces la función k queda unívocamente determinada a partir de dichas mediciones. \square

Observación 4.3.9 Cuanto más separadas se hayan hecho las dos mediciones (i. e., cuanto más cercano a cero esté r_0) menos restrictiva será la condición (4.25) relativa a la información a priori sobre k y, por tanto, podremos garantizar la unicidad de solución del problema inverso para un conjunto más amplio de funciones. \square

4.4. Resultados numéricos

Comenzamos esta sección describiendo la metodología utilizada para resolver el problema inverso, la cual se basa en un método de colocación con funciones continuas lineales a trozos en una partición temporal. Buscaremos una aproximación de este tipo para la función k (es decir, las incógnitas serán los valores de k en cada uno de los puntos de dicha partición).

Suponemos que las mediciones experimentales se han hecho en el centro y la frontera de la bola, en cada uno de los instantes t_i , $i = 1, 2, \dots, n$, de dicha partición. A continuación, se escribe la igualdad del Teorema 4.2.10 con $r = 0$ y $t = t_i$, se sustituye el valor $\bar{T}(0, t_i)$ por la medición en el centro de la muestra en ese instante y se sustituye la función m por la interpolación lineal a

trozos de las mediciones en el borde. La derivada de m se aproxima mediante la fórmula progresiva de primer orden. La aproximación de las integrales en $(0, t_i)$ correspondientes se realiza mediante la regla de los trapecios, tomando como valor de los integrandos en t_i cero, según lo comentado en la Observación 4.2.11. Estas aproximaciones dan lugar a un sistema de n ecuaciones no lineales en el que aparecen n incógnitas, los n valores de k en los instantes $t_i, i = 1, 2, \dots, n$. Como ya se ha dicho, el valor de k en el instante inicial lo supondremos conocido, pues se corresponde con el valor a presión atmosférica.

La resolución del sistema no lineal así construido se lleva a cabo mediante la herramienta `fsolve` de Matlab con una precisión de la centésima para la raíz (es decir, del tamaño que se supondrá para el error de medición) y de 10^{-4} en la evaluación de la función. Esta herramienta utiliza una estrategia de región de confianza aplicada al método de Newton; los detalles pueden verse en la documentación de Matlab (*Optimization Toolbox, Nonlinear Systems of Equations, Trust-Region Dogleg Method*) y en [61] y [62]. El valor inicial elegido para comenzar la iteración es $k_i = k(0), i = 1, 2, \dots, n$.

Presentamos los resultados obtenidos en la identificación del coeficiente de conductividad para tres ejemplos de prueba en los que se ha utilizado el mismo incremento lineal de presión (véase (4.26)) y la misma perturbación de los datos (tal y como se explica más adelante). Se ha partido de tres tipos distintos de funciones k : una recta, una raíz y una potencia. Los datos del dominio, así como para los parámetros del problema físico, se han tomado como en el caso del alimento de tipo sólido del Capítulo 1 (es decir, los correspondientes a la tilosa). Se supone un tratamiento como el P2 de dicho capítulo, con la salvedad de que el aumento de presión se hace de una forma mucho más lenta (en 1800 segundos en lugar de 183) para que sea más notorio el efecto de la conductividad.

En concreto, la presión se ha tomado como

$$P(t) = 0.2t + 0.1 \quad (4.26)$$

y las funciones k objeto de identificación se han elegido (véase la Figura 4.1)

- 1) $k(t) = \frac{0.75t + 450}{1800}$
- 2) $k(t) = \sqrt{\frac{0.75t + 450}{1800}}$
- 3) $k(t) = \left(\frac{0.25t + 1350}{1800}\right)^3$.

Hemos trabajado con funciones k crecientes, pues físicamente es razonable esperar que la conductividad crezca cuando se aumenta la presión (véase, por ejemplo, los datos para distintos materiales en [47]). El tamaño de estas funciones está elegido para que tengan el mismo orden que la conductividad media de la tilosa en el Capítulo 1, cuyo valor es 0.559. Todas ellas satisfacen las desigualdades (4.19) y (4.25), relativas a la información a priori sobre k .

Calculamos la que tomaremos como solución “exacta” del problema directo mediante la herramienta `pdeTool` de Matlab, en una partición equiespaciada de 61 instantes del intervalo temporal $[0, 1800]$. Seguidamente, se extrae su valor en el centro de la bola y en un punto de la frontera, para dichos instantes. Las mediciones con error se generan perturbando los valores de la temperatura en estos dos puntos, de la misma forma en los tres casos, y mediante una perturbación de orden del 1 % del rango de las temperaturas.

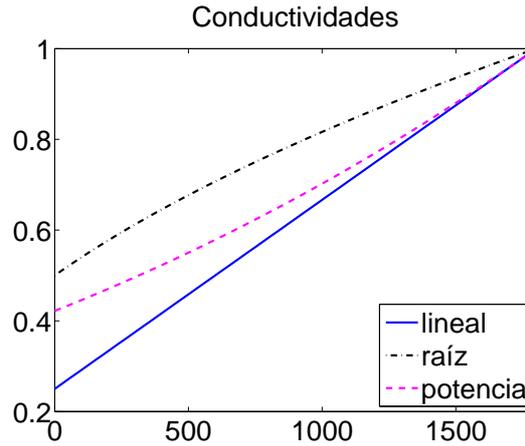


Figura 4.1: Conductividades consideradas en las pruebas numéricas realizadas.

Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 4.2. Como se observa, el error en la identificación de k es mayor al final del intervalo temporal. Esto lo explica el hecho de que los valores de k en los instantes finales intervienen tan sólo en las últimas ecuaciones y, al ser su valor menos determinante en el sistema no lineal, la solución numérica con el grado de precisión requerido admite mayores errores al final de dicho intervalo. Esto implica que sea más difícil que, en dichos instantes, los valores que se obtengan para k cambien respecto al valor inicial que se propone para la iteración.

Los mayores errores en la temperatura calculada tras la identificación se obtienen, coherentemente, cuando se produce el mayor error en k , manteniéndose ligados ambos errores a lo largo del tiempo. En cualquier caso, los errores cometidos en la aproximación de T están por debajo del orden del error en las mediciones, i. e., del orden de la perturbación, lo cual hace que los resultados sean muy satisfactorios.

También se indica en la Figura 4.2 (identificado como “% máx. de error”), para cada uno de los tres experimentos numéricos, el mayor valor del error relativo porcentual, es decir, si denotamos por \tilde{T} la solución del problema correspondiente a la identificación aproximada de k , la cantidad

$$\max_{k=1,2,\dots,n} \left(\frac{\left\| \tilde{T}(\cdot, t_k) - T(\cdot, t_k) \right\|_{\mathcal{C}(B_R)}}{\|T(\cdot, t_k)\|_{\mathcal{C}(B_R)}} \times 100 \right).$$

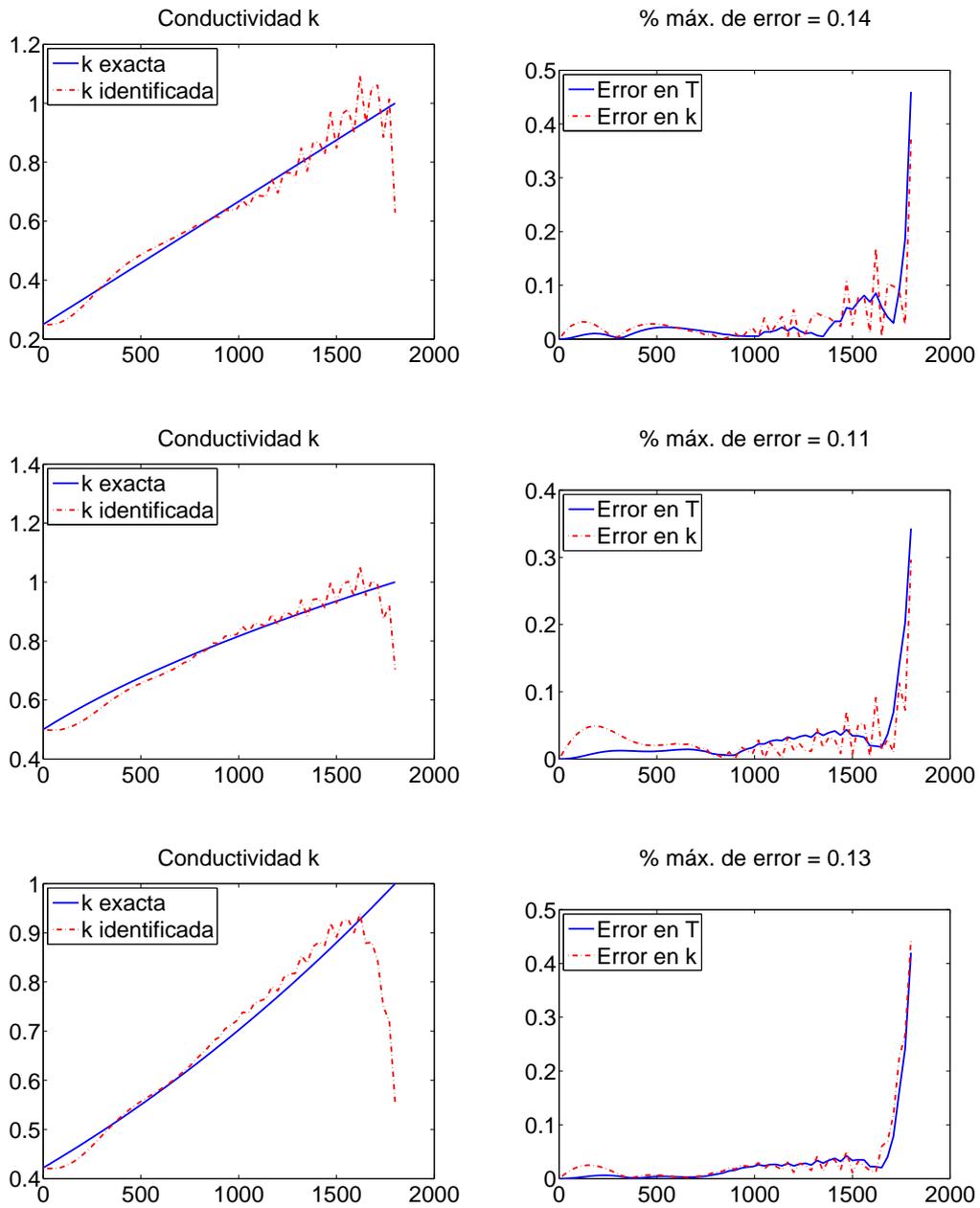


Figura 4.2: Conductividad térmica (**Izquierda**) y error en la temperatura (**Derecha**) correspondientes al caso en que k es una recta (**Arriba**), una raíz (**Centro**) y una potencia (**Abajo**).

Bibliografía

- [1] R. Aris. *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, Inc. 1989.
- [2] A. Baars, C. Rauh y A. Delgado. High pressure rheology and the impact on process homogeneity. *High Pressure Research* **27(1)** (2007) 77–83.
- [3] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Mechanics*. Cambridge University Press. 1967.
- [4] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle. Théorie et applications*. Masson. 1983.
- [5] F. Brezzi y K. J. Bathe. A discourse on the stability conditions for mixed finite element formulations. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.* **82(1-3)** (1990) 27–57.
- [6] T. A. Davis e I. S. Duff. An Unsymmetric-Pattern Multifrontal Method for Sparse LU Factorization. *SIAM. J. Matrix Anal. & Appl.* **18(1)** (1997) 140–158.
- [7] L. Debiante, B. Ivorra, B. Mohammadi, F. Nicoud, A. Ern, T. Poinsoy y H. Pitsch. A low-complexity global optimization algorithm for temperature and pollution control in flames with complex chemistry. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* **20(2)** (2006) 93–98, DOI: 10.1080/10618560600771758.
- [8] A. Delgado, C. Rauh, W. Kowalczyk y A. Baars. Review of modelling and simulation of high pressure treatment of materials of biological origin. *Trends in Food Science & Technology* **19(6)** (2008) 329–336. DOI: 10.1016/j.tifs.2008.01.009.
- [9] A. M. Denisov. *Elements of the Theory of Inverse Problems*. Inverse and Ill-Posed Problems Series. VSP. 1999.
- [10] S. Denys, A. van Loey y M. E. Hendrickx. A modelling approach for evaluating process uniformity during batch high hydrostatic pressure processing: combination of a numerical heat transfer model and enzyme inactivation kinetics. *Innovative Food Science and Emerging Technologies* **1** (2000) 5–19. DOI: 10.1016/S1466-8564(99)00003-X.
- [11] K. D. Dolan, L. Yang y C. P. Trampel. Nonlinear regression technique to estimate kinetic parameters and confidence intervals in unsteady-state conduction-heated foods. *J. Food Eng.* **80(2)** (2007) 581–593. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2006.06.023.
- [12] L. A. Fernández y C. Pola. Identification of a quasilinear parabolic equation from final data. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science* **4** (2001) 859–879.
- [13] C. Fernández y J. M. Vegas. *Ecuaciones diferenciales II: Ecuaciones no lineales*. Pirámide. 1996.

- [14] A. Fragueta, C. Gamio y D. Hinestroza. The inverse problem of Electrical capacitance Tomography and its application to Gas–Oil two phase flow imaging. *WSEAS Transactions on Systems* **1(2)** (2002) 130–137. ISSN: 1109-2777.
- [15] A. Fragueta, J. A. Infante, Á. M. Ramos y J. M. Rey. Identification of a heat transfer coefficient when it is a function depending on temperature. *WSEAS Trans. Math.* **7(4)** (2008) 160–172. ISSN: 1109-2769.
- [16] A. Fragueta, J. Oliveros, L. Cervantes, M. Morin y S. Gómez: Un algoritmo no iterativo para la tomografía de capacitancia eléctrica. *Revista Mexicana de Física* **51(3)** (2005) 236–242. ISSN: 0035-001X.
- [17] A. Fragueta, J. Oliveros, M. Morin y L. Cervantes. Inverse Electroencephalography for cortical sources. *Applied Numerical Mathematics* **55(2)** (2004) 191–203. DOI: 10.1016/j.apnum.2005.02.004.
- [18] B. A. Fricke y B. R. Becker. Calculation of heat transfer coefficients for foods. *Int. Comm. Heat Mass Transfer* **29(6)** (2002) 731–740. DOI: 10.1016/S0735-1933(02)00363-9
- [19] S. Gómez, M. Ono, C. Gamio y A. Fragueta. Reconstruction of Capacitance Tomography Images of Simulated Two–Phase Flow Regimes. *Applied Numerical Mathematics* **46(2)** (2003) 197–208. DOI: 10.1016/S0168-9274(02)00253-2
- [20] B. Guignon, Á. M. Ramos, J. A. Infante, J. M. Díaz y P. D. Sanz. Determining thermal parameters in the cooling of a small–scale high pressure freezing vessel. *International Journal of Refrigeration* **29(7)** (2006) 1152–1159. DOI:10.1016/j.ijrefrig.2006.01.007
- [21] M. de Guzmán: *Ecuaciones diferenciales ordinarias. Teoría de estabilidad y control*. Alhambra. 1980.
- [22] M. Hanke y C. Hansen. Regularization method for large scale problems. *Surv. Math. Ind.* **3(4)** (1993) 253–315.
- [23] C. Hansen. Analysis of discrete ill posed problems by means of the L -curve. *SIAM Rev.* **34** (1992) 561–580.
- [24] Chr. Hartman y A. Delgado. Numerical simulation of thermal and fluidodynamical transport effects on a high pressure induced inactivation. *Simulation Modelling Practice and Theory* **13** (2005) 109–118.
- [25] Chr. Hartman, A. Delgado y J. Szymczyk. Convective and diffusive transport effect in a high pressure induced inactivation process of packed food. *Journal of Food Engineering* **59** (2003) 33–44.
- [26] G. Hauke y T. J. R. Hughes. A unified approach to compressible and incompressible flows. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.* **113(3-4)** (1994) 389–395.
- [27] S. A. Hawley. Reversible Pressure–Temperature Denaturation of Chymotrypsinogen. *Biochemistry* **10** (1971) 2436–2442.
- [28] R. Hayashi. Application of High Pressure to Food Processing and Preservation: Philosophy and Development. En *Engineering and Food* **2**, W.E.L. Spiess y H. Schubert eds. Elsevier Applied Science. 1989. 815–826.

- [29] A. C. Hindmarsh, P. N. Brown, K. E. Grant, S. L. Lee, R. Serban, D. E. Shumaker y C. S. Woodward. SUNDIALS: Suite of Nonlinear and Differential/Algebraic Equation Solvers. *ACM T. Math. Software* **31(3)** (2005) 363–396.
- [30] T. J. R. Hughes, L. P. Franca y G. M. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin least squares method for advective-difusive equations. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.* **73(2)** (1989) 173–189.
- [31] I. Indrawati, A. M. van Loey, L. R. Ludikhuyze y M. E. Hendrickx. Soybean Lipoxygenase Inactivation by Pressure at Subzero and Elevated Temperatures. *J. Agric. Food Chem.* **47(6)** (1999) 2468–2474.
- [32] I. Indrawati, A. M. van Loey, C. Smout y M. E. Hendrickx. High hydrostatic pressure technology in food preservation. En *Food preservation techniques*, P. Zeuthen y L. Bogh-Sorensen eds. Woodhead Publ. Ltd. Cambridge, 2003. 428–448.
- [33] I. Indrawati, L. R. Ludikhuyze, A. M. van Loey y M. E. Hendrickx. Lipoxygenase Inactivation in Green Beans (*Phaseolus vulgaris* L.) Due to High Pressure Treatment at Subzero and Elevated Temperatures. *J. Agric. Food Chem.* **48(5)** (2000) 1850–1859.
- [34] J. A. Infante, B. Ivorra, Á. M. Ramos y J. M. Rey. On the Modelling and Simulation of High Pressure Processes and Inactivation of Enzymes in Food Engineering. Aceptado para su publicación en *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. ISSN: 0218-2025.
- [35] V. Isakov. *Inverse Problems for partial differential equations*. Springer. 1998.
- [36] D. Isebe, P. Azerad, F. Bouchette, B. Ivorra y B. Mohammadi. Shape Optimization of Geotextile Tubes for Sandy Beach Protection. *International Journal of Numerical Method in Engineering* **74(8)** (2008) 1262–1277. DOI: 10.1002/nme.2209.
- [37] B. Ivorra, B. Mohammadi y Á. M. Ramos. Optimization strategies in credit portfolio management. *Journal Of Global Optimization* **43(2-3)** (2009) 415–427. DOI: 10.1007/s10898-007-9221-6.
- [38] B. Ivorra, B. Mohammadi, Á. M. Ramos e I. Redont. Optimizing Initial Guesses to Improve Global Minimization. Enviado para su publicación.
- [39] B. Ivorra, Á. M. Ramos y B. Mohammadi. Semideterministic global optimization method: Application to a control problem of the burgers equation. *Journal of Optimization Theory and Applications.* **135(3)** (2007) 549–561. DOI: 10.1007/s10957-007-9251-8.
- [40] F. John. *Partial Differential Equations* (3ª Edición) Applied Mathematical Sciences **1**. Springer. 1980.
- [41] R. P. Kanwal. *Generalized Functions: Theory and Technique*. Mathematics in Science and Engineering **171**. Academic Press. 1983.
- [42] A. Kirsch. *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Applied Mathematical Sciences **120**. Springer. 1996.
- [43] W. Kowalczyk y A. Delgado. On convection phenomena during high pressure treatment of liquid media, *High Pressure Research* **27(1)** (2007) 85–92.
- [44] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Mecánica de fluidos*. Curso de Física Teórica **6**. Reverté. 1986.

- [45] L. Landweber. An iteration formula for Fredholm integral equations of the first kind. *Amer. J. Math.* **73** (1951) 615–624.
- [46] J. D. Lee, I. Tanabe y K. Takada. Identification of Heat Transfer Coefficient on Machine Tool Surface by Inverse Analysis. *JSME international journal. Series C, Mechanical systems, machine elements and manufacturing*, **42(4)** (1999) 1056–1060.
- [47] E. W. Lemmon, M. O. McLinden y D. G. Friend. Thermophysical properties of fluid systems. En *NIST Chemistry Web Book*. NIST Standard Reference Database **69**, P.J. Linstrom y W.G. Mallard eds. National Institute of Standards and Technology. Recurso electrónico <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.
- [48] G. M. Lieberman. *Second Order Parabolic Differential Equations*. World Scientific. 1996.
- [49] L. R. Ludikhuyze, I. van den Broeck, C. A. Weemaes y M. E. Hendrickx. Kinetic Parameters for Pressure–Temperature Inactivation of *Bacillus subtilis* α -Amylase under Dynamic Conditions. *Biotechnol. Prog.* **13(5)** (1997) 617–623. DOI: 10.1021/bp970053t.
- [50] L. R. Ludikhuyze, I. van den Broeck, C. A. Weemaes, C. H. Herremans, J. F. Van Impe, M. E. Hendrickx y P. P. Tobback. Kinetics for Isobaric-Isothermal Inactivation of *Bacillus subtilis* α -Amylase. *Biotechnol. Prog.* **13(5)** (1997) 532–538.
- [51] L. R. Ludikhuyze, A. M. van Loey, I. Indrawati, C. Smout y M. Hendrickx. Effects of Combined Pressure and Temperature on Enzymes Related to Quality of Fruits and Vegetables: From Kinetic Information to Process Engineering Aspects. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* **43(5)** (2003) 527–586.
- [52] B. Ly–Nguyen, A. M. van Loey, C. Smout, S. E. Özcan, D. Fachin, I. Verlent, S. Vu Truong, T. Duvetter y M. E. Hendrickx. Mild–Heat and High–Pressure Inactivation of Carrot Pectin Methylsterase: A Kinetic Study. *Journal of Food Science* **68(4)** (2003) 1377–1383. DOI: 10.1111/j.1365-2621.2003.tb09653.x
- [53] R. C. Martins y C. L. M. Silva. Inverse problem methodology for thermal-physical properties estimation of frozen green beans. *Journal of Food Engineering* **63(4)** (2004) 383–392.
- [54] K. Miyagawa y K. Suzuki. Studies on Taka–amylase A under high pressure: Some kinetic aspects of pressure inactivation of Taka–amylase. *A. Arch. Biochem. Biophys.* **105** (1964) 297–302.
- [55] L. Morozov: *Regularization methods for Ill Posed Problems*. CRC Press. 1993.
- [56] T. Norton y D. W. Sun. Recent Advances in the Use of High Pressure as an Effective Processing Technique in the Food Industry. *Food Bioprocess Technol* **1** (2008) 2–34. DOI: 10.1007/s11947-007-0007-0
- [57] J. M. Ortega y W. C. Rheinboldt. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Classics in Applied Mathematics **30**. SIAM. 2000.
- [58] L. Otero, A. D. Molina–García y P. D. Sanz. Some interrelated thermophysical properties of liquid water and ice I. A user–friendly modeling review for food high–pressure processing. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* **42(4)** (2002) 339–352.

- [59] L. Otero, A. Ousegui, B. Guignon, A. Le Bail y P. D. Sanz. Evaluation of the thermophysical properties of tylose gel under pressure in the phase change domain. *Food Hydrocolloids* **20** (2006) 449–460. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2005.04.001.
- [60] L. Otero, Á. M. Ramos, C. de Elvira y P. D. Sanz. A Model to Design High-Pressure Processes Towards an Uniform Temperature Distribution. *Journal of Food Engineering* **78** (2007) 1463–1370. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2006.01.020
- [61] M. J. D. Powell. A Hybrid Method for Nonlinear Equations. En *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations* (pág. 87–114), P. Rabinowitz ed. Gordon and Breach. 1970.
- [62] M. J. D. Powell. A Fortran Subroutine for Solving Systems of Nonlinear Algebraic Equations. En *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations* (pág. 115–161), P. Rabinowitz ed. Gordon and Breach. 1970.
- [63] M. H. Protter y H. F. Weinberger. *Maximal Principles in Differential Equations*. Springer. 1984.
- [64] C. Rauh, A. Baars y A. Delgado. Uniformity of enzyme inactivation in a short-time high-pressure process. *Journal of Food Engineering* **91** (2009) 154–163.
- [65] R. Serban, C. Woodward, A. Hindmarsh, P. Brown, S. Cohen, A. Collier, K. Grant, S. Lee, D. Reynolds, D. Shumaker y A. Taylor. Recurso electrónico <http://computation.llnl.gov/casc/sundials>.
- [66] S. Simal, Á. Berna, A. Mulet y C. Rossell. A method for the calculation of the heat transfer coefficient in potato drying. *Journal of the Science of Food and Agriculture* **63(3)** (1993) 365–367.
- [67] R. Simpson y C. Cortés. An inverse method to estimate thermophysical properties of foods at freezing temperatures: apparent volumetric specific heat. *Journal of Food Engineering* **64(1)** (2004) 89–96.
- [68] I. Stakgold. *Green's Functions and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons. 1979.
- [69] K. Suzuki y K. Kitamura. Inactivation of enzyme under high pressure: Studies on the kinetics of inactivation of α -amylase of *Bacillus subtilis* under high pressure. *J. Biochem.* **54(3)** (1963) 214–219.
- [70] A. Tansakul y P. Chaisawang. Thermophysical properties of coconut milk. *Journal of Food Engineering* **73(3)** (2006) 273–280. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2005.01.035.
- [71] A. N. Tikhonov y V. Y. Arsenin. *Solutions of ill posed problems*. V.H. Winston & Sons. 1977.
- [72] A. N. Tikhonov, A. V. Goncharsky, V. V. Stepanov y A. G. Yagola. *Numerical methods for the solution of Ill Posed Problems*. Kluwer. 1995.
- [73] V. S. Vladimirov. *Distributions en physique mathématique*. Mir. 1979.
- [74] V. S. Vladimirov. *Equations of Mathematical Physics*. Mir. 1984.
- [75] J. Zueco, F. Alhama y C. F. González Fernández. Inverse determination of the specific heat of foods. *Journal of Food Engineering* **64(3)** (2004) 347–353.