

Burgos Geovanny Gordillo Guambaña

SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE Y CONTROL DE SOLUTOS ACTIVOS EN FLUJOS DE SUPERFICIE LIBRE

Departamento
Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

Director/es
García Navarro, Pilar
Morales Hernández, Mario

<http://zaguan.unizar.es/collection/Tesis>

Tesis Doctoral

**SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE Y CONTROL DE
SOLUTOS ACTIVOS EN FLUJOS DE SUPERFICIE
LIBRE**

Autor

Burgos Geovanny Gordillo Guambaña

Director/es

García Navarro, Pilar
Morales Hernández, Mario

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

2020

Simulación del Transporte y Control de Solutos Activos en Flujos de Superficie Libre

Burgos Geovanny Gordillo Guambaña

Programa de Doctorado en Ingeniería Mecánica

Abril 2020

Directores:

Dra. Pilar García Navarro

Dr. Mario Morales Hernández



Resumen

En este trabajo se presenta una herramienta predictiva de simulación numérica de flujo unidimensional de agua en lámina libre y transporte de solutos, combinada con técnicas de optimización y control usando variables adjuntas. Para la resolución de las ecuaciones gobernantes, el énfasis se pone en la correcta discretización de las ecuaciones de transporte con las ecuaciones del flujo de aguas poco profundas, con el fin de garantizar soluciones conservativas y no oscilatorias. El modelo de calidad implementado se basa en las ecuaciones en Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) que requiere diez variables de estado, incluida la temperatura del agua. Este sistema se resuelve simultáneamente al flujo hidrodinámico para caracterizar adecuadamente la calidad de una masa de agua. El sistema de ecuaciones diferenciales no lineales en derivadas parciales hiperbólicas (de aguas poco profundas y ecuaciones de transporte) se resuelve mediante un esquema de Godunov que se basa en la resolución de los problemas de Riemann en cada pared. La eficiencia y precisión de la herramienta se verifica en varias aplicaciones tanto sintéticas como reales. Con el propósito de mejorar la predicción de la calidad del agua en un evento real, se incluye un algoritmo de control basado en el método del gradiente descendente que permite, entre otras cosas, recuperar la información de la condición inicial, las condiciones de contorno, una fuente o de los diversos parámetros que intervienen en el modelo de calidad de agua. La información del gradiente se obtiene mediante el método de los estados adjuntos, que permite calcular la sensibilidad de la variable deseada con respecto al error cometido. La formulación desarrollada se aplica a diversos casos analíticos y reales para reconstruir, entre otras, la variación de la temperatura del aire en el río Ebro en un evento transitorio de 10 días de duración. Además se utiliza una librería de optimización de uso libre para comparar los resultados obtenidos con el método adjunto implementado.

Dedicado a: Jenny† y Juan†

Agradecimientos

Quiero extender mi agradecimiento a la Dra. Pilar García Navarro, directora de este trabajo quién me brindó la oportunidad de realizar esta investigación fuera de mi país de origen (Ecuador). Su seguimiento incesante en este desarrollo junto con las continuas contribuciones y críticas lograron afianzar en mi los conocimientos impartidos en cada sesión de trabajo. Agradezco también a Mario Morales Hernández por su colaboración durante este tiempo, sus acertadas sugerencias permitieron llegar a cumplir el objetivo establecido. A Ricardo Aliod por ponerme en contacto con el grupo de hidráulica computacional.

A Diego por compartir con generosidad parte de su tiempo y conocimientos. Otras sugerencias útiles también provinieron por parte de Adrain, Javier, Isabel y Sergio quienes además crearon una atmósfera positiva y de apoyo para la realización de mis actividades en este período.

A mis padres Juan y Blanca quienes con su paciencia, apoyo, consejos y ejemplo han logrado formarme para enfrentarme a retos constantes en cada etapa de mi formación. A Eduardo quién con su presencia y colaboración logró siempre motivarme para cumplir un objetivo. Por último, por ello no menos importante agradecer a mi Esposa Mercy fuente de inspiración constante. El amor, la comprensión y el cuidado de cada día permitieron que este camino sea mas llevadero día tras día. A mis hijos Emilio y Santiago quienes con su inocencia y sus sonrisas me levantaban el ánimo en los momentos más difíciles de esta formación.

Índice general

	Página
Resumen	iii
Índice general	vii
Lista de figuras	xiii
Lista de tablas	xv
Capítulo 1: Introducción	1
1.1 Motivación	1
1.2 Objetivos de la investigación y estructura	13
Capítulo 2: Modelo hidrodinámico de transporte 1D	15
2.1 Ecuaciones gobernantes	15
2.1.1 Balance de masa de una especie	15
2.1.2 Conservación de cantidad de movimiento	17
2.1.3 Conservación de energía	17
2.1.4 Definición de modelos a partir de las leyes de conservación	19
2.1.5 Ecuaciones de aguas poco profundas 1D	21
2.1.6 Ecuación de transporte de solutos pasivos y reactivos	24
2.1.7 Ecuación de transporte de la temperatura en formulación 1D	27
2.1.8 Condiciones iniciales y de contorno	28
2.2 Discretización de las ecuaciones	30
2.2.1 Discretización de la ecuación de transporte difusivo 1D de una sustancia	31
2.2.2 Discretización de la ecuación de transporte convectivo 1D de una sustancia	35
2.2.3 Discretización de las ecuaciones aguas poco profundas en 1D	46

2.2.4	Discretización de la ecuación de transporte 1D (Temperatura)	48
Capítulo 3: Modelos de calidad de agua		57
3.1	Modelos de calidad de agua en ríos	57
3.2	Modelo meteorológico para la ecuación de transporte de la temperatura del agua	59
3.2.1	Radiación absorbida neta	61
3.2.2	Parámetros dependientes de la temperatura	62
3.2.3	Ecuación del balance de calor simplificada	64
3.3	Modelo de transporte de OD-DBO-C	67
3.3.1	Modelo de Streeter-Phelps DBO-OD modificado	69
3.4	Modelo de Nitrificación	73
3.5	Modelo matemático simplificado que describe la interacción predador-presa	79
3.6	Modelo de la eutrofización	81
3.6.1	Modelo matemático de las algas: fitoplancton	82
3.7	Aplicación del modelo predictivo de calidad de agua a casos fluviales	90
Capítulo 4: Optimización y cálculo inverso de procesos de transporte		101
4.1	Introducción	101
4.1.1	Modelos de optimización	102
4.2	Técnicas de programación matemática	103
4.2.1	Optimización unidimensional no restringida	106
4.2.2	Optimización multidimensional no restringida	110
4.3	Métodos adjuntos	115
4.3.1	Ecuación adjunta del transporte con velocidad constante	115
4.3.2	Ecuación adjunta del transporte con velocidad variable y difusión	121
4.3.3	Discretización de la ecuación adjunta de convección-difusión y reacción con velocidad variable	123
4.3.4	Optimización no lineal NLopt	125
4.4	Casos propuestos	129
4.4.1	Comparación del método adjunto con un algoritmo libre de NLopt	129
4.5	Modelo adjunto de la ecuación del transporte de la temperatura	143

4.6	Modelo adjunto de Streeter-Phelps modificado	147
4.7	Modelo adjunto del proceso de nitrificación	153
4.8	Aplicación del método adjunto a la reconstrucción de variables en un caso fluvial en régimen transitorio	160
4.9	Método adjunto para reconstruir la señal de la temperatura del aire . . .	165
4.9.1	Modelo adjunto para reconstruir la temperatura del aire	165
4.9.2	Casos test	167
4.9.3	Caso fluvial	170
4.10	Tiempos de cálculo	173
Capítulo 5: Conclusiones		177
5.1	Módulo hidrodinámico	178
5.2	Módulo de calidad de agua	178
5.3	Módulo de control	181
Bibliografía		183

Índice de figuras

2.1	Clasificación de modelos de calidad según su uso	20
2.2	Esquema de la sección transversal y variables geométricas usadas en el modelo 1D	23
2.3	Procesos de convección-difusión en el interior de un cuerpo de agua . .	25
2.4	Discretización del tiempo y espacio de la ecuación física	31
2.5	Espacio unidimensional dividido en celdas	36
2.6	Perfil longitudinal de concentración en un canal prismático en $t=1000s$. Caso 0	39
2.7	Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema explícito. Caso 1	40
2.8	Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema C. Caso 3	41
2.9	Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema explícito para la convección e implícito para la difusión y centrada para la reacción. Caso 3	43
2.10	Simulación de los procesos de convección, difusión y reacción con solución analítica. Caso 4	45
2.11	Distribución espacial del soluto ϕ_1 (izquierda) y ϕ_2 (derecha). Caso 5 .	46
2.12	Régimen subcrítico y pulso de soluto. Caso 6	52
2.13	Esquema sección trapezoidal	53
2.14	Régimen subcrítico y pulso de soluto Caso 7	54
2.15	Vista lateral (izquierda) y vista en planta (derecha) de la sección rectangular. Caso 8	55
2.16	Condición inicial del nivel. Caso 8	55
2.17	Evolución del perfil longitudinal del nivel. Caso 8	56

2.18	Perfiles longitudinales de concentración. Caso 8	56
3.1	Procesos de intercambio de calor en la interfaz aire-agua en la superficie de una corriente	63
3.2	Esquema del canal trapezoidal para el balance de la temperatura. Caso 9	66
3.3	Comparaciones de los perfiles longitudinales de la temperatura del agua en un canal prismático entre el modelo propuesto (línea roja) y QUAL2E (puntos negros). Caso 9	67
3.4	Esquema de la sección del canal trapezoidal con vertidos de DBO-C y OD. Caso 10	72
3.5	Comparación de los perfiles longitudinales (DBO-C y OD) de QUAL2E con el modelo propuesto. Caso 10	73
3.6	Comparación de los perfiles longitudinales (OD y O_{sat}) de QUAL2E con el modelo propuestos. Caso 11	74
3.7	Ciclo del nitrógeno en aguas naturales	74
3.8	Tramo del canal que recibe una descarga de una planta de tratamiento de aguas residuales. Caso 12	77
3.9	Ciclo del nitrógeno: Comparación de los perfiles longitudinales observa- dos con la salida del modelo propuesto. Caso 12	78
3.10	Modelo presa-predador con un nutriente en un ejemplo agrupado. Caso 13	81
3.11	Ciclo del N, P e interacciones de las algas con el OD en aguas naturales	82
3.12	Ciclo del N, P e interacciones de las algas con el OD: Comparación de los perfiles longitudinales de OD y O_{sat} con la salida del modelo QUAL2E. Caso 14	90
3.13	Tramo de estudio considerado entre Alagón y Zaragoza	91
3.14	Sección real del cauce del río Ebro	92
3.15	Evolución temporal numérica y medida del caudal del río Ebro (Estación verano) en Zaragoza. Caso 15	93
3.16	Distribución temporal numérica y medida de la temperatura del agua en el río Ebro antes de la calibración (estación verano) en Zaragoza. Caso 15	94
3.17	Distribución temporal numérica y medida de la temperatura del agua en el río Ebro (estación verano) en Zaragoza. Caso 15	95

3.18	Comparación del modelo con datos de campo para el caudal del río Ebro (estación invierno) en Zaragoza. Caso 16	96
3.19	Comparación del modelo con datos de campo del nivel del río Ebro (estación invierno) en Zaragoza. Caso 16	97
3.20	Distribución temporal de la temperatura del agua en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16	98
3.21	Concentración de OD en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16	99
3.22	Concentración de $\text{NH}_4 - \text{N}$ en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16	99
4.1	Esquema para la aplicación de un modelo de programación no lineal . .	104
4.2	Ejemplo de mínimo local ($\bar{\phi}$) y global (ϕ^*)	105
4.3	Búsqueda de la sección dorada	107
4.4	Método de búsqueda lineal sin derivadas	108
4.5	Métodos de búsqueda lineal mediante interpolación cuadrática	109
4.6	Método del proceso de iteración de optimización	113
4.7	Discretización del tiempo y espacio de la ecuación adjunta	124
4.8	Esquema general de optimización basado en el método adjunto para reconstruir la condición de contorno	127
4.9	Esquema general de optimización basado en la librería NLopt para reconstruir la condición de contorno de una variable de estado	128
4.10	Representación unidimensional para reconstruir la condición de contorno	130
4.11	Comparación del método libre de derivadas NLopt (izquierda) con el método adjunto (derecha) en estado estacionario. Reconstrucción de la condición de contorno (arriba), objetivo (medio) y funcional (abajo) . .	131
4.12	Comparación del método libre de derivadas NLopt (izquierda) con el método adjunto (derecha) con una función gaussiana. Reconstrucción de la condición de contorno (arriba), objetivo (medio) y funcional (abajo)	134
4.13	Reconstrucción de la c. contorno (a), objetivo (b), perfil longitudinal (c) y funcional (d) con los procesos de convección-difusión y reacción usando $\epsilon = 0.5$	136

4.14	Reconstrucciones tanto de la c. contorno (a), y objetivo (b). Longitud de paso (c) y funcional (d) calculadas en cada interacción con el método de búsqueda de la sección dorada	137
4.15	Representación unidimensional para reconstruir un vertido puntual . . .	138
4.16	Reconstrucción de una fuente (a), objetivo (b), variable adjunta (c) y funcional (d) por el método de máximo descenso	139
4.17	Vista en planta de la sección rectangular. Caso 21	140
4.18	Reconstrucción de una fuente (a), del objetivo (b), sensibilidad (c) y evolución de la variable adjunta en la primera iteración (d) por el método de máximo descenso con $u \neq$ constante.	141
4.19	Reconstrucción de la condición inicial (a) y objetivo (b).	142
4.20	Evolución del funcional en cada iteración. Caso 22	143
4.21	Representación unidimensional para reconstruir la temperatura del agua	145
4.22	Método de optimización para la reconstrucción de la condición de contorno para la temperatura, con múltiples fuentes	146
4.23	Reconstrucción de las variables de estado presentes en el modelo de Streeter-Phepls	151
4.24	Evolución del funcional en cada iteración en el modelo de Streeter-Phepls	152
4.25	Reconstrucción de la condición de contorno de las variables de estado presentes en el modelo de Streeter-Phepls y funcional normalizado . . .	153
4.26	Reconstrucciones de las condiciones de contorno para el modelo de nitrificación adjunto	156
4.27	Reconstrucciones de los objetivos para el modelo de nitrificación adjunto	157
4.28	Reconstrucciones de los perfiles longitudinales para el modelo de nitrificación adjunto	158
4.29	Reconstrucciones de las condiciones de contorno para el modelo de nitrificación adjunto evaluado con el funcional normalizado	159
4.30	Distribución temporal de la variable Q. Caso 26	161
4.31	Reconstrucciones de la condición de contorno de las variables químicas en la estación ubicado en Alagón. Caso 26	162
4.32	Reconstrucciones de los objetivos de las variables químicas en la estación de medida ubicada en Zaragoza. Caso 26	163

4.33	Reconstrucciones de la condición de contorno de las variables químicas en la estación ubicado en Alagón y evolución del funcional normalizado y sin normalizar. Caso 26	164
4.34	Evoluciones temporales de la temperatura del aire y temperatura del agua. Caso 27	168
4.35	Evoluciones temporales de la temperatura del aire y temperatura del agua. Caso 28	169
4.36	Reconstrucción de las señales T_a , T y perfil long. de T en estado transitorio. Caso 29	170
4.37	Variables meteorológicas del viento (a) y radiación solar (b) en la estación ubicada en Zaragoza (Estación Montañana)	171
4.38	Hidrograma de caudal impuesto a la entrada del dominio (Alagón) . . .	172
4.39	Variables hidrodinámicas de caudal (a) y nivel superficial (b) en la estación ubicada en Zaragoza. Caso 30	172
4.40	Variables químicas reconstruidas en la estación de Zaragoza. Caso 30 .	173

Índice de tablas

1.1	Periodicidad de los distintos indicadores de calidad (DMA)	3
1.2	Procesos incluidos en modelos de calidad de agua	5
1.3	Comparación de modelos de calidad de acuerdo a su funcionalidad	5
1.4	Comparación de fortalezas y debilidades entre modelos de calidad	6
3.1	Variables de estado del modelo de calidad	60
3.2	Variables meteorológicas para el balance de calor (Caso 9)	66
3.3	Rangos de concentración de OD	68
3.4	Clasificación del estado ecológico para aguas superficiales según DMA .	69
3.5	Clasificación del estado químico para aguas superficiales según DMA .	69
3.6	Coeficientes y exponentes en las leyes de aireación	70
3.7	Matriz de procesos de Petersen con las variables de estado OD y DBO-C	71
3.8	Matriz de procesos de Petersen del ciclo del nitrógeno	76
3.9	Datos para representar la interacción predador-presa con un nutriente limitante. Caso 13	80
3.10	Matriz de procesos de Petersen para la eutrofización	88
3.11	Datos para configurar la interacción plantas/nutrientes. Caso 14	89
3.12	Parámetros calibrados para el caso río Ebro. Caso 16	98
3.13	Variables estadísticas de calidad para la estación invernal. Caso 16	99
4.1	Tiempos de cálculo en ms (normalizado con el número de celdas e ite- ración) del método implementado en diferentes casos test	175

Introducción

1.1 Motivación

La calidad del agua en los ríos se ha visto mermada en las últimas décadas debido a las grandes extracciones de agua y al incremento de las descargas con altos niveles de contaminación. Además, su consumo está en proporción directa con el crecimiento poblacional y el cambio económico hacia patrones más intensivos. En 1999 la población mundial era de 6000 millones, en octubre de 2011, de 7000 millones de personas y a finales del 2019, somos 7594 millones. Con este crecimiento tan drástico está previsto que la población mundial aumente en más de 1.000 millones de personas en los próximos 15 años, por lo que se alcanzarían los 8500 millones en 2030, 9700 en 2050 y 11200 millones en 2100 [89]. Este aumento poblacional significa que el uso global de agua dulce, es decir, las extracciones para usos agrícolas, industriales y municipales, se han multiplicado casi por seis desde 1900. Como ejemplo, en 1999 este consumo alcanzó valores de los 3.65 trillones de m^3 y en el 2014 los 3.99 trillones de m^3 . Para mantener la sostenibilidad de los recursos hídricos, las tasas de extracción de agua deben estar por debajo de la reposición de agua dulce. Esta renovación a nivel mundial también está decreciendo constantemente; en 1992 este flujo era de 8010 m^3 y para el 2014 su valor fue 5920 m^3 .

Para mejorar la calidad del agua frente a un incremento de vertidos producto del aumento poblacional, se requiere que la población completa tenga acceso a instalaciones de saneamiento mejoradas. En el año 2000, uno de los objetivos del desarrollo del

milenio era que el 77 % de personas tuvieran este servicio de saneamiento básico para el 2015. Sin embargo esta meta no se alcanzó porque solo se avanzó hasta el 68 % (del 54 % de partida en 1990). Es decir, otro 29 % de la población mundial tuvo acceso a este servicio. Para este intervalo de tiempo (25 años) el número total de personas sin saneamiento se ha mantenido casi constante. En 1990, la cifra de personas carentes de esta prestación fue de 2490 millones, mientras que para el 2015 esta cifra disminuyó a 2390 millones [107].

Ante esta problemática se deben tomar decisiones de prevención y control de la salud de los cuerpos de agua con el fin de garantizar este recurso en cantidad y calidad a las generaciones futuras. Una de las acciones puesta en marcha por algunos países es la creación de normativas como la directiva marco del agua (DMA) [19]. Esta norma está regida por el parlamento Europeo y establece un marco de actuación comunitario en el ámbito de la política de aguas, promoviendo un uso sostenible que garantice la disponibilidad del recurso natural a largo plazo. La DMA establece un marco para la protección de las aguas continentales, de transición, costeras y subterráneas con los siguientes objetivos [19]:

- La prevención del deterioro adicional y la protección y mejora tanto de los ecosistemas acuáticos como de los ecosistemas terrestres dependientes.
- La promoción de los usos sostenibles del agua.
- La protección y mejora del medio acuático.
- La reducción de la contaminación de las aguas subterráneas.
- La paliación de los efectos de inundaciones y sequías.
- El suministro suficiente de agua superficial o subterránea en buen estado.

En este sentido, la propia directiva estableció un propósito claro para el 2015: el buen estado de los ecosistemas acuáticos de todos los países de la Unión Europea. Para este fin, debieron desarrollarse y aplicarse planes de gestión. En su artículo 8, relacionado con el seguimiento del estado de las aguas superficiales, se decretó en uno de sus literales que los estados miembros deberían velar por el establecimiento de programas de vigilancia con el objeto de obtener una visión general coherente y completa del estado de las aguas en cada demarcación hidrográfica. Estos programas, en el caso de las aguas superficiales, incluían el seguimiento del volumen y el nivel del flujo en la medida que fuese pertinente para el estado ecológico y químico de los cuerpos de agua. Otro aspecto considerado por esta normativa fue el planteamiento combinado respecto de las fuentes puntuales y difusas, con el fin de establecer controles sobre su emisión.

Para el seguimiento del estado ecológico y químico de las aguas superficiales, los estados miembros debían elaborar mapas en los que se mostrase la red en donde se midiesen los parámetros representativos del estado de cada indicador de calidad pertinente. Estos puntos de control debían localizarse de tal forma que pudieran constituir una evaluación general de la condición actual de esas fuentes de agua.

La periodicidad de los controles de vigilancia, según la DMA, se estableció conforme a un nivel aceptable de fiabilidad y precisión de indicadores de calidad biológicos, hidromorfológicos y fisicoquímicos. La Tabla 1.1 muestra la periodicidad sugerida en los ríos.

Indicador de calidad	Ríos
Biológicos	
Fitoplancton	6 meses
Otra fauna acuática	3 años
Macroinvertebrados	3 años
Peces	3 años
Hidromorfológicos	
Continuidad	6 años
Hidrología	continuo
Morfología	6 años
Fisicoquímicos	
Condiciones térmicas	3 meses
Oxigenación	3 meses
Salinidad	3 meses
Estado de los nutrientes	3 meses
Estado de acidificación	3 meses
Otros contaminantes	3 meses
Sustancias prioritarias	3 meses

Tabla 1.1: Periodicidad de los distintos indicadores de calidad (DMA)

La DMA indica que las medidas preventivas pueden basarse en un estudio derivado de la utilización de modelos de predicción o métodos de análisis a posteriori, que pueden servir de apoyo a la gestión de las distintas cuencas. En este sentido, se han desarrollado diferentes modelos de calidad que permiten describir la compleja interacción de los sistemas físicos y químicos. El trabajo pionero en este campo fue realizado por Streeter and Phelps [115], quienes desarrollaron curvas de decaimiento del oxígeno disuelto (OD). Sobre esta base, autores como Theriault [120], Fair [37], Howland and Thomas Jr [46], Li [67], Camp [18], Dobbins [33], Ambrose et al. [1] y Thomann and Mueller [121], entre otros, han contribuido con más avances sobre este tema. Estos avances en modelación así como muchos modelos de calidad desarrollados como AQUATOX, BLTM, EDP RIV1, QUAL2E, QUASAR, RWQM1, SIMCAT, TOMCAT, WASP, WQRRS han proporcionado los principios sobre la modelización

de la calidad para diversos parámetros y bajo diferentes condiciones. En las Tablas 1.2, 1.3, 1.4 se presenta una comparación detallada de conceptos, hipótesis, fortalezas, limitaciones, variables de estado y procesos que se simulan, características hidráulicas, etc. de los modelos de calidad previamente citados.

Var./Proc.	AQUATOX	BLTM	EPD RIV1	QUAL2E/ QUAL2Kw	QUASAR	RWQM1	SIMCAT	TOMCAT	WASP	WQRRS
Alcalinidad				*						
Algas		*	*	*		*			*	
Algas de fondo				*						*
NH ₄ ,NO ₃			*	*	*	*	*	*	*	*
Anoxia				*						
Bacterias (col.)		*	*	*	*				*	*
Balance de calor				*					*	
Carbono total										*
C. I. T.				*		*				
Ca						*				
Conductividad				*				*		
DBO		*	*	*					*	
DBO-C (lenta, rápida)			*	*	*		*	*	*	
DBO-N			*							
DQO		*	*	*						
D _{os}				*	*				*	
Diagénesis sed.	*			*					*	
Detritos	*			*					*	*
Ecotoxicidad	*									
Efectos del sed.	*			*						
Efectos del OD sobre la biota	*									
P		*	*	*		*			*	*
Fitoplancton	*			*					*	*
Hidráulica			*	*					*	*
Fe			*							
Mg			*							
Metabolismo hiporreico				*						
Macrófitas	*		*							
M. O. P.						*				
M. O. P. I.						*				

(Continúa en la página siguiente)

(Viene de la página anterior)

Var./Proc.	AQUATOX	BLTM	EPD RIV1	QUAL2E/ QUAL2Kw	QUASAR	RWQM1	SIMCAT	TOMCAT	WASP	WQRRS
Nitrógeno		*	*	*		*			*	*
Nutrientes	*			*					*	*
NO ₂				*		*				*
OD	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
Ortofosfato				*		*			*	
Org. hete.						*				
Perifiton	*								*	
Patógenos				*						
pH	*			*	*	*			*	*
Salinidad	*								*	
Sed.									*	
S. S. I.				*		*				
S. D. T.						*			*	
S. O. D..						*				
S. O. D. I.						*				
Temperatura		*	*	*	*				*	
Zooplancton	*								*	

(col. coliformes, C. I. T.: Carbono Inorgánico Total, sed.: sedimentos, M. O. P.: Materia Orgánica Particulada
M. O. P. I.: M. O. P. Inerte, Org. het.: Organismos heterotróficos, S. S. I.: Sólidos Suspendedos Inorgánicos
S. D. T.: S. Disueltos Totales, S. O. D.: Sustancias Orgánicas Disueltas)

Tabla 1.2: Procesos incluidos en modelos de calidad de agua

Modelo	Tipo	Descrip. proceso		Aprox. mode.	Datos	
		Empi.	Mecanis.		Deter.	Estocas.
AQUATOX	2D; E		*	B.E.D	*	*
BLTM	1D; D	*		E.C.D	*	
EDP RIV1	1D; D		*	E.C.D	*	
QUAL2E- QUAL2Kw	1D; E, D		*	Balan. Masa	*	
QUASAR	1D; D, Estos.		*	RSCA	*	
RWQM1	1D; D		*	E.C.D	*	
SIMCAT	1D; E, Estos.		*	RSCA	*	
TOMCAT	1D; E		*	RSCA	*	
WASP	1D, 2D, 3D; E,D		*	Balan. masa	*	
WQRRS	1D; E, D		*	E.C.D	*	

(E: Estacionario, D: Dinámico, Estos: Estocástico)

RSCA: Reactores en Serie Continuamente Agitados, 1D, 2D, 3D: 1, 2 y 3 dimensiones

B.E.D: Balance Ecuación Diferencial, E.C.D: Ecuación Convección Difusión)

Tabla 1.3: Comparación de modelos de calidad de acuerdo a su funcionalidad

Modelo	Fortalezas	Debilidades	Referencia
AQUATOX	Incorpora efectos ecológicos y análisis de incertidumbre, simula hasta 20 especies químicas simultáneamente, es libre, permite enlazarse con HSPF y SWAT.	No permite estratificación dinámica, algas y macrófitas se simulan en estado estacionario, no simula metales.	[90]
BLTM	Minimiza la dispersión numérica, los coeficientes de dispersión varían con el sub-tramo.	No incluye DBO-C de la muerte de las algas, número limitado de confluencias y elementos computacionales.	[55]
EDP RIV1	La especificación de datos temporales de entrada y la geometría son flexibles, permite simular secciones arbitrarias y estructuras de control hidráulicas.	Modelización 1D y no incluye proceso de transporte de sedimentos.	[34]
QUAL2E-QUAL2Kw	Permite simular tanto fuentes puntuales y no puntuales, incluye DBO-C de la muerte de las algas, análisis de incertidumbre automático.	No simula confluencias, asume estado estacionario.	[16, 20, 87, 102, 115]
QUASAR	Incluye DBO-C de la muerte de las algas, adecuado para modelar grandes sistemas fluviales.	Requiere gran cantidad de datos, no es un modelo hidrodinámico completo.	[125, 126, 127]
RWQM1	Compatible con modelos de plantas de tratamiento de aguas residuales con lodos activados, el enfoque de los procesos son similares a los modelos de fangos activados.	La hidrodinámica se resuelve por el modelo de onda cinemática, asume disponibilidad de oxígeno y nitrato.	[104]
SIMCAT	Auto-calibración, simulación rápida con pocos datos requeridos, evalúa rápidamente el impacto de las fuentes puntuales.	Aproximación muy simple de los procesos físico-químicos de los solutos.	[124]
TOMCAT	Mejor precisión que SIMCAT, simulación rápida con pocos datos requeridos.	Aproximación muy simple de los procesos físico-químicos de los solutos.	[12]
WASP	Tiene una estructura de modelado muy flexible, puede combinarse con EUTRO (módulo de eutrofización) y TOXI (compuestos tóxicos).	Requiere un modelo externo hidrodinámico, el cálculo de flujo de sedimento es muy simplificado, no simula perfiton o macroalgas, requiere extensa información de entrada, no simula escenarios tales como roturas de presas.	[2, 3, 30, 128, 129]
WQRRS	Evalúa los procesos de eutrofización en forma simplificada, evalúa la estratificación vertical de parámetros físicos, químicos y biológicos.	No incluye variaciones longitudinales del cauce, no considera la competencia entre especies individuales.	[24]

Tabla 1.4: Comparación de fortalezas y debilidades entre modelos de calidad

A pesar de la amplia literatura disponible, solamente hay algunos casos de aplicación [68, 54, 130, 47]. Una de las razones plausibles de tal paradoja está en la disparidad entre los datos que están siendo monitoreados en las estaciones de control y los datos requeridos como entradas para los modelos. Otra causa en la limitación de su aplicación se debe al detalle y la frecuencia con el que son medidos los indicadores (Tabla 1.1). Además, merece la pena destacar también que la mayoría de los parámetros de entrada como la demanda de oxígeno desde el sedimento, extinción de luz, sólidos orgá-

nicos/inorgánicos y disueltos/suspendidos, varias formas de patógenos, varias formas de demanda bioquímica de oxígeno (DBO) como la DBO-N, DBO-C (lenta y rápida) no tienen protocolos de monitoreo definidos [111].

El resultado de esta discordancia entre las necesidades de datos de los modelos y las limitaciones en las mediciones de campo disponibles impacta negativamente en las simulaciones de un escenario real. Los modelos son incapaces de capturar los marcados cambios que se producen a lo largo del tiempo de un soluto, en un tramo de río, en ausencia de suficientes datos de entrada. Esto representa un problema en la fase de calibración, donde se define la incertidumbre del modelo elegido, llegando a la conclusión que el grado de incertidumbre de un modelo depende de la calidad de los datos, del ajuste de los parámetros y de la estructura.

Para minimizar de alguna manera los errores en cuanto a calidad de datos se refiere, se creó el sistema de monitoreo del medio ambiente global con el fin de estandarizar una red global para el monitoreo de la calidad del agua. Los parámetros más importantes que se incluyeron en esta regularización fueron OD, DBO, coliformes fecales, nitratos y constituyentes químicos tales como contaminantes mayores, metales pesados y compuestos tóxicos. Sin embargo, estas acciones resultan insuficientes para formular los planes de restauración de un río [111].

Una posible solución que permite reducir la discrepancia entre los datos medidos y calculados a partir de un modelo predictivo de calidad de agua es el proceso de prueba y error. Consiste en calcular repetidas veces un mismo escenario cambiando sistemáticamente uno de los parámetros del sistema hasta lograr que la solución esté dentro de un error apropiado. Si este ejercicio se extiende a todas las variables que se pretenden calibrar, el proceso puede transformarse en una tarea ardua y tediosa resultando ineficiente.

Todos estos inconvenientes, además del desconocimiento por parte de los gestores de las cuencas hidrográficas de las limitaciones y fortalezas de cada modelo, han propiciado la escasa utilización de estos modelos en la asistencia para establecer nuevos programas de calidad [22].

Ante esta realidad, se han realizado algunos avances para calibrar herramientas informáticas y por ende minimizar las diferencias entre los datos simulados y observados. Una de las técnicas más ampliamente usadas es el método inverso indirecto. Se construye formulando problemas de optimización no lineales. En términos generales existen dos categorías disponibles para resolver este tipo de problemas inversos: los métodos basados en el gradiente de una función objetivo y los algoritmos genéticos.

A modo de ejemplo de adaptación de estas técnicas a modelos de calidad de agua, la familia de modelos QUAL cuenta con un sistema de auto-calibración de parámetros mediante algoritmos genéticos [20]. Este proceso consiste en evolucionar una población de individuos sometiéndolos a acciones aleatorias, con el fin de encontrar la solución a un problema específico. La idoneidad se determina como el recíproco del promedio ponderado de la raíz normalizada, lo que equivale al valor de la diferencia entre las predicciones del modelo y los datos observados.

Otro modelo que contempla un mecanismo de auto calibración es SIMCAT, que utiliza la técnica de análisis de Monte Carlo [124]. Este método no determinista se usa para aproximar los valores de los parámetros presentes en el modelo de calidad, los cuales permitirán reducir las diferencias entre los valores observados y simulados. Estos procesos podrían suponer nuevamente un consumo de tiempo elevado para conseguir el objetivo buscado, elemento crucial ante un evento totalmente transitorio o la actuación inmediata sobre algún vertido puntual.

En este contexto, se requiere que los nuevos modelos utilicen la alta capacidad existente de los equipos informáticos y las herramientas avanzadas para optimizar o recuperar datos espaciales y temporales necesarios en las entradas de los distintos modelos de calidad, en el menor tiempo posible y sobre cualquier evento producido. Una alternativa es utilizar los métodos indirectos (basados en el gradiente) los cuales hacen usos de las derivadas para la determinación de las direcciones de búsqueda. La técnica de cuasi-Newton, o el gradiente conjugado no lineal, son algunos métodos que utilizan el gradiente de la función objetivo o simplemente llamado funcional, el cual depende directamente de un conjunto de soluciones de variables de estado de las ecuaciones directas [71].

El funcional se puede conseguir por las derivadas de Fréchet, que son las derivadas de las variables de estado con respecto a los parámetros del modelo. El cálculo de esta sensibilidad por lo general puede suponer un alto coste computacional. La otra alternativa de encontrar este gradiente es mediante el proceso basado en adjuntos. Esta técnica, incluida en la teoría de los problemas inversos, calcula eficientemente el gradiente de un funcional (medidas de valores simulados y observados) sin la necesidad de las derivadas de Fréchet [84].

El método de estado adjunto es un procedimiento general para calcular el gradiente de un funcional que depende de un conjunto de variables de estado, que a su vez son soluciones de las ecuaciones de transporte. Al resolver un sistema adjunto se obtienen las variables adjuntas que son las encargadas de reunir una medida global de la sensibilidad del error que se desea minimizar con respecto a las variables de estado.

Desde el punto de vista numérico, esta aproximación capta la atención porque requiere resolver solamente un sistema lineal o no-lineal. A menudo resolver el gradiente con respecto a los parámetros del modelo comienza en una o dos evaluaciones de la simulación directa y este costo es casi independiente del número de parámetros, lo que no siempre ocurre cuando se obtiene a través de Fréchet [98]. Resultando ser el sistema lineal independiente de los factores del modelo, el adjunto solo se evalúan una vez en cada iteración, convirtiéndose en una técnica muy eficiente.

La aplicación del método adjunto se ha extendido a varios campos de investigación. En Meteorología, particularmente en técnicas de asimilación de datos basadas en el método de control óptimo, Marchuk desarrolló el fundamento teórico y demostró muchas aplicaciones de modelos de circulación atmosférico [72]. Trabajos como [83, 117] demostraron la eficiencia en el cálculo de la sensibilidad del funcional a los parámetros del sistema y la localización idónea de un depósito de residuos nucleares. En aerodinámica de formas (continua y discreta) Jameson [48, 49] y Jameson and Reuther [51] usaron la formulación adjunta continua, para el diseño óptimo de las formas aerodinámicas en flujos no viscosos transónicos. Jameson et al. [52] estudiaron el diseño inverso en perfiles y alerones sobre flujos viscosos mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Esta técnica también ha sido implementada por Jameson and Alonso [50] y [105] en flujos subsónicos, transónicos y supersónicos con mallas estructuradas de múltiples bloques. En este mismo campo Kim et al. [58, 59] han estudiado la minimización de la resistencia y/o maximización de la sustentación en flujos viscosos y no viscosos. La aproximación adjunta continua además fue analizada por Anderson and Venkatakrishnan [5, 4] para el desarrollo de flujos viscosos y no viscosos en mallas no estructuradas. Giles and Pierce [42] abordaron el tema de la aproximación adjunta discreta y continua enfatizando la simplicidad de las ideas en el contexto del álgebra lineal, además de un análisis de las propiedades de las soluciones a las ecuaciones adjuntas [40, 41] y de una solución analítica de la ecuación adjunta utilizando la función de Green [43].

En el campo de la hidrología subterránea el método de la sensibilidad adjunta también se ha utilizado ampliamente. Los sistemas hidrológicos e hidráulicos de agua superficial también se han beneficiado de la ingeniería de control. Lardner et al. [65] estimaron los parámetros del coeficiente de arrastre de fondo y una corrección de la batimetría. La función se calculó mediante el método adjunto que reflejó las discrepancias que se producen entre los valores medidos y observados. Por otra parte, Panchang and Richardson [88] demostraron que el modelo inverso recupera estimaciones extremadamente satisfactorias de las viscosidades turbulentas incluso cuando la información es escasa en un modelo de circulación costera tridimensional. Lardner [64] y [131], entre otros, demostraron que las condiciones de contorno abiertas en los modelos numéricos

de 2D se pueden tratar de manera efectiva usando la metodología adjunta. El esquema del modelo de marea propuesto por Lardner [64], se apoyó en un método iterativo conocido como el algoritmo cuasi-Newton de Broyden, Fletcher, Golfarb y Shanno (BFGS). Sanders and Katopodes [109] presentaron un método de control de flujo transitorio en canales abiertos. El algoritmo BFGS nuevamente se utilizó en el tratamiento iterativo, que utilizó un método de sensibilidad adjunta para calcular de manera eficiente la información del gradiente. Las ecuaciones adjuntas se derivaron de la forma diferencial de las ecuaciones de agua poco profundas en 1D. Los mismos autores [110] también derivaron las ecuaciones de la sensibilidad a través de las ecuaciones de aguas poco profundas adjuntas en 2D. El método se aplicó para un problema de mitigación de inundaciones, calculando la sensibilidad de la función objetivo que representaba una medida del nivel de exceso de agua en una cierta ubicación.

En este mismo contexto, [31, 62] implementaron el análisis de sensibilidad basado en adjuntos para el control de compuertas de irrigación en flujos de canal abierto con diversas formas de sección transversal. Lacasta and García-Navarro [61] utilizaron la aproximación adjunta continua para reconstruir la información en un modelo 2D. Usando la unidad de procesamiento gráfico (GPU) resolvieron tanto el sistema físico como adjunto, logrando notables incrementos en la velocidad de resolución. Además, estos autores lograron reconstruir la información de la condición de contorno en escenarios transitorios a través de la técnica adjunta en aguas poco profundas [63].

La identificación del coeficiente de rugosidad de Manning en aguas poco profundas también fue analizado con la técnica adjunta. La minimización numérica se completó por procedimientos con y sin restricción sobre el método cuasi Newton de memoria limitada, verificándose una mayor convergencia, estabilidad numérica y eficiencia computacional [32].

En el ámbito de la calidad del agua, el método adjunto también ha sido usado para obtener información acerca del origen de los vertidos peligrosos de una industria química ante una descarga accidental o deliberada sobre el medio ambiente, la implementación de estrategias para controlar la carga de un contaminante sobre un cuerpo receptor y la estimación de parámetros en un modelo de calidad.

El método también es atractivo por:

- El número de ecuaciones gobernantes no lineales presentes en un modelo de calidad.
- El número de parámetros con diferentes escalas y unidades y muchos de ellos dependientes del espacio.
- Las observaciones disponibles que se encuentran dispersas en los dominio temporal

y espacial. El intervalo de estas mediciones pueden estar entorno a las semanas o meses.

Piasecki and Katopodes [95] presentaron un algoritmo para mitigar el impacto de materiales peligrosos sobre el medio ambiente. La ecuación adjunta proporcionó de forma eficiente y rápida la sensibilidad de la función objetivo a los cambios individuales del vertido, permitiendo actuar sobre la concentración real de la descarga en tiempo real. La característica más notable de este modelo es la capacidad para gestionar eventos transitorios sobre una cuenca real, con la restricción que el contaminante no se somete a ningún proceso de degradación.

Katopodes and Piasecki [56], [96] también desarrollaron un método para minimizar el impacto de una o múltiples fuentes sobre un cuerpo de agua. La ecuación de transporte adjunta se resolvió mediante la formulación Galerkin del método de los elementos finitos. Con el esquema implementado se disminuyó el esfuerzo computacional comparado con el método de ecuación de sensibilidad. Asimismo, se consiguió evaluar la técnica en eventos transitorios y con transporte de solutos conservativos. Con el método inverso se estimó los parámetros presentes en un modelo de calidad con ocho variables de estado [112]. En este trabajo se usó la técnica variacional en conjunción con un modelo de eutrofización de 2D. La estimación de los parámetros iniciales se realizó considerando los valores de referencia dados en la literatura. Finalmente, la comprobación de los valores óptimos se logró mediante los valores “reales” fruto de una calibración previa del modelo.

La formulación adjunta también ha ayudado en la identificación del coeficiente de difusión de un soluto en un modelo bidimensional para flujos superficiales y estuarios [97]. La calidad de los parámetros estimados se realizó con la incorporación de un funcional. La ecuación diferencial adjunta se resolvió usando elementos finitos mientras que los valores del gradiente se utilizan en el algoritmo iterativo no-lineal, para obtener cada vez un valor actualizado del coeficiente de dispersión asociado con cada elemento. Por último, en la metodología, presentada se concluyó que no se puede estimar ningún parámetro cerca de la ubicación de la fuente debido a la hipótesis de mezcla vertical completa.

El procedimiento adjunto también se ha aplicado a los modelos de calidad del agua. Por ejemplo, Piasecki [92, 94] optimizó la concentración del oxígeno disuelto controlando las descargas de la demanda de oxígeno bioquímico carbónico (DOB-C). Usando el proceso adjunto, se calculó la sensibilidad del OD con respecto a la carga de DOB-C. Esta sensibilidad se utilizó en un algoritmo de optimización que logró buscar la carga óptima de DOB-C, de forma que la concentración de OD se mantuviese por encima de un nivel mínimo requerido. En este trabajo se caracterizó el agotamiento del OD

dentro de una corriente, formulando los procesos que influyen en los dos constituyentes estudiados (la degradación y la sedimentación de la DOB-C), así como también la re-aireación y la demanda de oxígeno de sedimentos (D_{OS}). Sin embargo, estos procesos se desarrollaron sin contemplar la dependencia de la temperatura. La información hidrodinámica necesaria para resolver las variables adjuntas se formuló por medio de las ecuaciones de aguas poco profundas. Las características más notables del estudio realizado son: 1) La temperatura se modela con todos sus aportes externos desactivados. 2) En todos los casos propuestos se requiere poco esfuerzo computacional. 3) Los valores estándar de OD en uno de los casos propuestos llega a cumplirse controlando la carga de amoníaco. 4) En el caso real el control se realiza por medio del control del caudal descargado. 5) En todos los casos presentados se observan variaciones temporales que son producto de la periodicidad de marea impuesta aguas abajo y las no-linealidades presentes en los términos de reacción.

Otro avance en los modelos de calidad fue la asignación óptima de las descargas para conseguir los objetivos de calidad en relación con la concentración de OD. En este caso el problema inverso se abordó de forma integral, es decir, analizando cómo cambian las variables dependientes con respecto a los cambios en los parámetros y coeficientes de reacción presentes en el programa de simulación de la calidad de agua (WASP por sus siglas en inglés), con el proceso de temperatura constante. Para encontrar un procedimiento eficiente que contemple todas estas variables se utilizó la metodología adjunta como una alternativa a la resolución del problema directo para determinar la información del gradiente. Del estudio se obtuvieron dos conclusiones: 1) El vector de cargas para todas las especies tiene efectos de diferente magnitud sobre la concentración de OD en el nodo objetivo. Se observó que las concentraciones de OD son más sensibles a las perturbaciones de carga de amoníaco, seguido muy de cerca por las cargas de OD en el efluente y las de la DOB-C. 2) De los 26 coeficientes de reacción incluidos, la D_{OS} presentó la mayor sensibilidad a la concentración del OD, seguido por la velocidad de re-aireación, la degradación de la DOB-C lenta, velocidad de mineralización del nitrógeno orgánico (NO) y la velocidad de nitrificación [93].

Finalmente, Neupauer [84] utilizó la aproximación adjunta para determinar la sensibilidad de un contaminante en un sistema de distribución de agua con respecto a un cambio en algún parámetro presente en el sistema. Para resolver los estados de sensibilidad en estado estacionario, tanto la simulación hacia adelante (modelo físico) como la simulación hacia atrás se resolvieron usando el programa de dominio público EPANET. Sin embargo, para los escenarios transitorios se propone una extensión de EPANET-BTX para la ecuación adjunta. Cuando se analizó la sensibilidad con respecto a la fuente se observó que disminuye a medida que aumenta la distancia desde

el nodo fuente hasta el nodo objetivo.

Por lo tanto, el método adjunto ha sido utilizado en varias aplicaciones relacionadas con el diseño, el flujo del agua y la calidad del agua en ambientes naturales y artificiales. Este análisis sirvió para conseguir un valor óptimo de un soluto para cumplir ciertos estándares de calidad, de unos parámetros (coeficientes de reacción, difusión, etc) para la calibración de una fuente con el fin de evitar consecuencias nefastas. Sin embargo las principales debilidades de estos estudios son la búsqueda de un valor óptimo constante en el tiempo y la no inclusión del proceso de la temperatura con todos sus aportes externos. Por tanto, se requiere una investigación adicional de la metodología adjunta que se enfoque en la recuperación de datos variables en el tiempo, considerando la influencia de la temperatura en los modelos de calidad, así como los parámetros que participan en su evolución espacial y temporal.

1.2 Objetivos de la investigación y estructura

El trabajo realizado en esta tesis se enmarca dentro de una de las líneas de investigación que se vienen desarrollando en el Grupo de Hidráulica Computacional (GHC), para el desarrollo de nuevos esquemas numéricos para sistemas hiperbólicos.

Dentro de esta línea, se ha estudiado la formulación de un esquema numérico combinando el transporte de solutos en flujo unidimensional de aguas poco profundas con un sistema de control que permita recuperar la información de las variables de estado presentes en un modelo de calidad en regímenes transitorios, con el objeto de que sirva como ayuda en la toma de decisiones en la gestión de una cuenca de un río. El trabajo se ha llevado a cabo dentro del proyecto “Herramientas eficientes de alta precisión para la simulación y control de flujos medio ambientales” financiado por el Ministerio de Ciencia y Competitividad de España.

Para alcanzar el objetivo principal simulación del transporte y control de solutos activos en flujos de superficie libre, es primordial la comprensión de los mecanismos que intervienen en el transporte, difusión y reacción de las sustancias involucradas dentro de un modelo de calidad de aguas. Para ello se abordan los siguientes objetivos parciales:

- Implementación de la ecuación de transporte con los procesos de convección-difusión y reacción para uno o varios solutos dentro un esquema unidimensional gobernado por un sistema de ecuaciones de aguas poco profundas.
- Formulación de un modelo de calidad de aguas adecuado para el flujo de agua en

ríos considerando las fortalezas y limitaciones.

- Programación de un modelo numérico de simulación predictiva, calibración y validación.
- Desarrollo de la formulación adjunta del proceso de la nitrificación para reconstruir la condición de contorno de las variables de estado en estudio a partir de medidas en un punto del cauce aguas abajo.

El documento está estructurado en cinco capítulos. Los fundamentos físicos del transporte con los términos de convección, difusión y reacción, así como las hipótesis del flujo unidimensional, son analizados en el capítulo 2. La comparación de modelos de calidad en ríos y la formulación elegida se presenta en el capítulo 3. La metodología de optimización se presenta en el capítulo 4, donde además se desarrolla la técnica adjunta para recuperar la información de diferentes parámetros. Finalmente, en el capítulo 5 se detallan las conclusiones del trabajo realizado.

Modelo hidrodinámico de transporte 1D

2.1 Ecuaciones gobernantes

Los procesos físicos que se describen en esta sección son la hidrodinámica y el transporte de sustancias en un medio fluido, que pueden ser descritos aplicando leyes de balance de masa, energía y cantidad de movimiento.

2.1.1 Balance de masa de una especie

Para expresar esta ley se empieza definiendo la masa m contenida en un volumen fluido, como la integral de todos los diferenciales de masa [122].

$$m = \int_{\mathcal{V}_m} dm = \int_{\mathcal{V}_m} \rho dV \quad (2.1)$$

donde ρ es la densidad del agua y \mathcal{V}_m el volumen fluido que tiene las siguientes propiedades:

- Su forma puede o no cambiar continuamente con el tiempo.
- No hay intercambio de masa con el entorno.

La forma apropiada de representar la relación de cambio en el tiempo es mediante

la primera derivada con respecto al tiempo

$$\frac{dm}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \int \rho dV = 0 \quad (2.2)$$

Sin embargo, como el volumen material es función del tiempo, es necesario intercambiar los operadores de diferenciación por medio del teorema general de transporte. De esta forma, y haciendo uso del teorema de Gauss, la ecuación (2.2) expresada en función de su densidad es:

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0 \quad (2.3)$$

es decir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.4)$$

donde \mathbf{u} es la velocidad. Ahora, suponiendo que el cuerpo está compuesto por un número determinado de especies químicas no reactivas, cada una de ellas con una ρ_i , y una \mathbf{u}_i la expresión (2.3) resulta en:

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}_i) \right] dV = 0 \quad (2.5)$$

La velocidad \mathbf{u}_i puede descomponerse en velocidad convectiva \mathbf{u}_C , y velocidad difusiva \mathbf{u}_D ,

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_{Ci} + \mathbf{u}_{Di} \quad (2.6)$$

De esta manera, el transporte convectivo será debido al movimiento global de un fluido, mientras que el difusivo se da por intercambio debido a la difusión molecular y difusión turbulenta (no considerada en este trabajo) [11]. En muchos sistemas donde se involucra el transporte y difusión de una especie, la masa se cuantifica en términos de concentraciones molares, es decir,

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_{Ci} \phi_i) + \nabla \cdot \mathbf{J}_i \right] dV = 0 \quad (2.7)$$

donde $\phi_i = \rho_i/M_i$, M_i el peso molecular de cada especie, $\mathbf{J}_i = \rho_i \mathbf{u}_{Di}/M_i$. La ecuación (2.7), se conoce como la ecuación de continuidad de una mezcla que se aplica a masas de materiales (especies bioquímicas) disueltas o suspendidas en el agua, así como a masas de agua en modelos hidrodinámicos [73]. Por simplicidad en adelante se prescindirá del sub-índice C de la velocidad convectiva.

2.1.2 Conservación de cantidad de movimiento

Para encontrar las ecuaciones correspondientes a este tipo de transporte, es necesario utilizar la segunda ley de Newton. Esta ley puede enunciarse como: "la razón de cambio en el tiempo de la cantidad de movimiento de un cuerpo es igual a las fuerzas que actúan sobre el cuerpo". En términos matemáticos puede expresarse como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{u} dV = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{b} dV + \oint_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \mathbf{T} dA \quad (2.8)$$

donde \mathbf{b} es la fuerza que actúa por unidad de masa, \mathbf{n} el vector unitario normal a la superficie del cuerpo, \mathbf{T} es el tensor de esfuerzos y \mathcal{A}_m el área envolvente de \mathcal{V}_m . Agrupando todos los términos de la ecuación (2.8) en una sola integral de volumen y usando de nuevo el teorema general de transporte

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \rho \mathbf{b} - \nabla \cdot \mathbf{T} \right] dV = 0 \quad (2.9)$$

Por otro lado, el tensor de esfuerzos puede expresarse como la presión termodinámica, p y el tensor de esfuerzos viscosos $\boldsymbol{\tau}$. De tal forma que la ecuación (2.9), suponiendo $\mathbf{b} = \mathbf{g}$, puede escribirse como:

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \nabla p - \rho \mathbf{g} \right] dV = 0 \quad (2.10)$$

o bien:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \nabla p - \rho \mathbf{g} = 0 \quad (2.11)$$

La expresión (2.11), se conoce como ecuación diferencial de cantidad de movimiento.

2.1.3 Conservación de energía

Esta ley establece que la variación de energía asociada con la materia en un sistema, más la energía que entra y la neta añadida mediante transferencia de calor y trabajo es igual a la energía que sale del sistema.

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left\{ \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] - q_R + \nabla \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{u}) - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \right\} dV = 0 \quad (2.12)$$

donde e es la energía interna por unidad de masa, $v^2/2$ la energía cinética por unidad de masa, \mathbf{q} y q_R el vector del flujo de calor por conducción y la radiación hacia el cuerpo respectivamente.

Para poder escribir la ecuación de la energía interna es necesario relacionar la ecuación (2.12) con la ecuación de energía mecánica de tal manera que:

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left\{ \rho \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla e \right] + \nabla \cdot \mathbf{q} - q_R - \phi_v \right\} dV = 0 \quad (2.13)$$

siendo ϕ_v la disipación viscosa.

Por último considerando flujo incomprensible la ecuación (2.13) puede escribirse como:

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) + \nabla \cdot \mathbf{q} - q_R - \phi_v \right] dV = 0 \quad (2.14)$$

donde C_p es la capacidad calorífica a presión constante [10].

En forma diferencial conservativa, la ecuación (2.14) se expresa como:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) + \nabla \cdot \mathbf{q} - q_R - \phi_v = 0 \quad (2.15)$$

El planteamiento de las ecuaciones desarrolladas (2.7,2.10,2.14) no está completo hasta que se relacionen las variables independientes de las leyes de Newton ($\boldsymbol{\tau}$), Fourier (\mathbf{q}), y Fick (\mathbf{J}_i), con las variables dependientes \mathbf{u} , ϕ_i y T respectivamente, es decir:

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu(\mathbf{u} \otimes \nabla + \nabla \otimes \mathbf{u}) \quad (2.16^a)$$

$$\mathbf{q} = -\mathcal{C} \nabla T \quad (2.16^b)$$

$$\mathbf{J}_i = E_i \nabla \phi_i \quad (2.16^c)$$

donde μ es el coeficiente de viscosidad, \mathcal{C} el coeficiente de conductividad térmica y E_i el coeficiente de difusión molecular. El proceso de difusión caracterizado por la ley de Fick establece que en un fluido en reposo el flujo de masa de soluto, es decir, la masa que cruza una unidad de área por unidad de tiempo en una dirección dada, es proporcional a la tasa de cambio de la concentración de soluto en esa dirección. Este

fenómeno se presenta cuando las moléculas están disueltas en el agua y su movimiento va desde los puntos de mayor concentración hacia los de menor.

De esta manera, para hacer la notación más breve de las ecuaciones de conservación desarrolladas anteriormente, sustituimos las ecuaciones (2.16), en los términos correspondientes, asumiendo que sus límites son iguales. Con esto las expresiones diferenciales pueden ser escritas como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.17^a)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_i \mathbf{u}) = E_i \nabla^2 \phi_i \quad (2.17^b)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.17^c)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \mathcal{C} \nabla^2 T - \nabla \cdot \mathbf{q} + \phi_v + q_R \quad (2.17^d)$$

Con las ecuaciones (2.17) es posible resolver sistemas físicos de diferente nivel de complejidad. El considerar cada uno de los términos presentes en las ecuaciones está directamente relacionado con la complejidad del modelo final. El planteamiento, así como otras cuestiones relevantes de los modelos empíricos basados en leyes físicas serán analizados en las siguientes secciones.

2.1.4 Definición de modelos a partir de las leyes de conservación

Los diversos modelos se basan en una clasificación de acuerdo a 1) el cuerpo de agua sujeto a estudio; 2) el propósito del modelo; 3) el número de dimensiones que será considerado; 4) cómo están descritos los procesos; 5) tipo de datos utilizados y 6) variabilidad temporal. El esquema de esta clasificación se observa en la Figura 2.1.

En este trabajo nuestro estudio se enfoca en el movimiento del agua superficial o de aguas poco profundas (ríos). Para representar la química en este tipo de cuerpos de agua es necesario un modelo hidroquímico. Estas formulaciones permiten modelar un desarrollo particular como la eutrofización o simplemente el transporte de un soluto.

Los flujos en ríos y canales frecuentemente exhiben variabilidad a lo largo del eje longitudinal, es decir, en un modelo unidimensional de flujo, el proceso de advección de los solutos solo involucra una dirección. Otra característica más en este tipo de

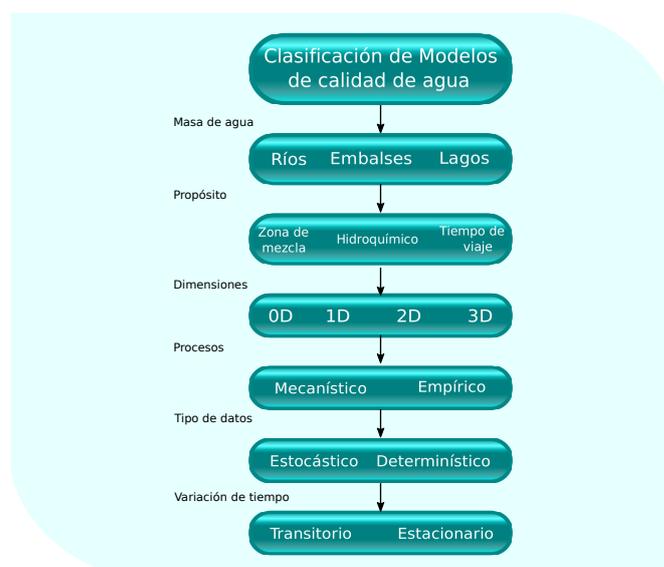


Figura 2.1: Clasificación de modelos de calidad según su uso

modelos es que suponen que la corriente está completamente (e instantáneamente) mezclada en todo su ancho y profundidad.

Por otro lado, de acuerdo a la influencia sobre las variables de estado, el modelo contempla un proceso mecanístico. Con estos modelos es posible simular los cambios en el caudal y calidad del agua a lo largo del río, permitiendo representar los procesos físicos que ocurren en la realidad. La intención de este proceso es estimar que todas las tasas de cambio puedan ser derivadas de los datos medidos. Otra finalidad de estos modelos complejos es con relación a su aplicación. Para lograr esta finalidad el modelo debe ser calibrado previamente. Una vez realizado este proceso la herramienta de simulación puede ser utilizada con fines predictivos sobre un rango de situaciones y condiciones determinadas.

Siguiendo la secuencia de la Figura 2.1, la clasificación de un modelo de calidad también se realiza conforme al tipo de datos. Este trabajo se desarrolló con un modelo determinístico en el que se sobreentiende que toda la información requerida está disponible; esto permitirá que el modelo produzca los mismos resultados con las mismas condiciones de entrada, es decir, sin contemplar la existencia de “azar” o incertidumbre en el proceso de la modelización [27].

Finalmente la última parte de la Figura 2.1, corresponde a la variación del tiempo. Las escalas de tiempo hidrodinámicas varían desde los mili-segundos para fenómenos de turbulencia hasta minutos u horas en eventos de inundación. Este criterio también está relacionado con los procesos de calidad que van desde los mili-segundos para procesos de reacciones químicas hasta décadas por procesos de degradación [73]. Por

esta razón, cuando la tasa de cambio de cualquiera de estos procesos se produce en un corto período de tiempo, es necesario recurrir a modelos dinámicos para alcanzar una aproximación adecuada entre los valores medidos y valores de salida del modelo. Cabe mencionar que tal aproximación nunca llega a ser capturada en su totalidad debido a que, por definición, los modelos son solo aproximaciones de los sistemas naturales; y porque la mayoría de los modelos están limitados en la resolución temporal en el momento de resolver las ecuaciones gobernantes. Variaciones en el flujo, calados y otras características hidráulicas ocurren en el espacio y el tiempo con consecuencias sobre la calidad de agua. La principal razón de incluir en este trabajo las condiciones de flujo dinámicas es precisamente poder predecir una amplia variedad de casos reales. Eventos donde el flujo varía rápidamente se denominan flujos altamente transitorios. Este tipo de escenarios se presentan en procesos naturales como inundaciones fluviales, o en operaciones de las centrales hidroeléctrica en horas pico, sobre todo en temporada de estiaje. Otro ejemplo en donde es necesario utilizar modelos no estacionarios es en el contexto de la calidad de agua. Determinar el impacto provocado accidentalmente o intencionalmente de un vertido dentro de una corriente de agua podría ayudar con acciones de mitigación durante el tiempo que dure el acontecimiento.

2.1.5 Ecuaciones de aguas poco profundas 1D

Los modelos de aguas poco profundas integran las ecuaciones para simplificar la formulación bajo ciertas hipótesis..

Clásicamente, las hipótesis clave para la obtención de los modelos de aguas poco profundas consisten en:

- El movimiento principal ocurre en un dominio de dimensiones verticales menores que las horizontales.
- La aceleración vertical es despreciable frente a la aceleración de la gravedad.
- La presión es la hidrostática.

Con estas suposiciones, el problema hidrodinámico 1D promediado en la sección transversal puede describir mediante las ecuaciones de aguas poco profundas o ecuaciones de Saint Venant, en las que dos variables dependientes son suficientes para describir el flujo unidimensional. Las leyes de conservación de masa-momento (2.17^c) serán suficientes para determinar el flujo [118].

Las ecuaciones de St Venant en forma diferencial para un volumen de control se pueden expresar como:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} + gI_1 \right) = g[I_2 + A(S_o - S_f)]$$

donde A es el área, Q el caudal, x la distancia longitudinal, q es la entrada lateral por unidad de ancho, S_o es la pendiente de fondo definida como $S_o = -dz/dx$ donde z es el nivel inferior más bajo en la sección transversal y S_f es el coeficiente de fricción expresado en términos de la ley semi-empírica de Manning [25]:

$$S_f = \frac{n^2|Q|Q}{A^2R_h^{4/3}} \quad (2.19)$$

donde n es el coeficiente Gauckler-Manning, $R_h = A/P$ es el radio hidráulico, P el perímetro mojado, I_1 es el término de fuerza de la presión hidrostática en una sección transversal definido como:

$$I_1 = \int_0^{h(x,t)} \sigma(x, \eta) d\eta \quad (2.20)$$

con h el nivel máximo de profundidad de agua, η la coordenada en la profundidad, σ ancho del canal. I_2 es la fuerza de presión debida a las variaciones de ancho longitudinal. Este término puede formularse:

$$I_2 = \int_0^{h(x,t)} (h - \eta) \frac{\partial \sigma(x, \eta)}{\partial x} d\eta \quad (2.21)$$

Cabe mencionar que (2.21) es únicamente válida cuando la variación de ancho de la sección es gradual, es decir, si el ancho ocurre rápidamente deberá contemplarse las demás fuerzas complementarias que actúan sobre el volumen de control. Un esquema para visualizar las variables geométricas de la sección transversal real se representa en la Figura 2.2.

El sistema de ecuaciones no lineales hiperbólicas (ecuación 2.18), escrito en forma conservativa puede ser definido como:

$$\frac{\partial \mathbf{U}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U}, x, t)}{\partial x} = \mathbf{H}(x, \mathbf{U}) \quad (2.22)$$

con

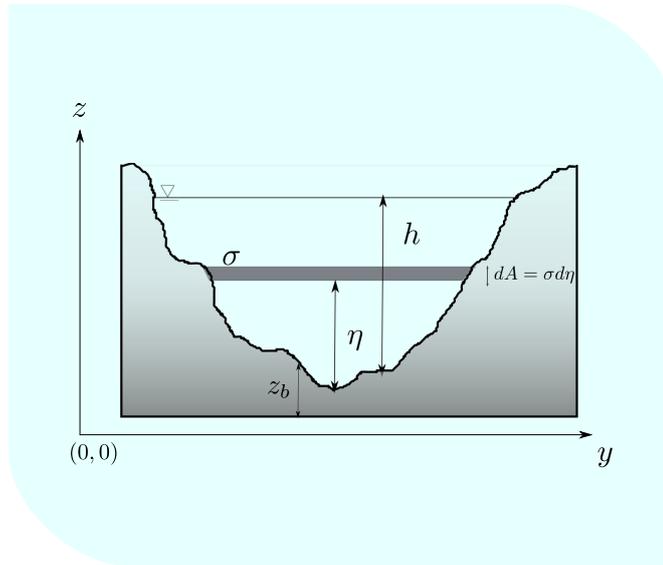


Figura 2.2: Esquema de la sección transversal y variables geométricas usadas en el modelo 1D

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} A \\ Q \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} Q \\ \frac{Q^2}{A} + gI_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} q \\ g[I_2 + A(S_0 - S_f)] \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

donde \mathbf{U} es el vector de variables conservadas, \mathbf{F} es el vector de flujos y \mathbf{H} el de los términos fuente.

El sistema (2.22) puede también escribirse en forma cuasi-conservativa

$$\frac{\partial \mathbf{U}(x, t)}{\partial t} + \mathbf{J} \frac{\partial \mathbf{U}(x, t)}{\partial x} = \mathbf{H}(x, \mathbf{U}) \quad (2.24)$$

donde \mathbf{J} es la matriz Jacobiana:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ g\frac{A}{b} - u^2 & 2u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c^2 - u^2 & 2u \end{pmatrix}$$

con la definición de la celeridad de las ondas superficiales $c = \sqrt{\frac{gA}{b}}$ siendo B la anchura máxima en la superficie. Esta celeridad permite definir el número adimensional relevante en estos flujos, número de Froude, $Fr = u/c$. Con esto se distinguen los flujos lentos o subcríticos ($Fr < 1$) de los flujo rápidos o supercríticos ($Fr > 1$).

El Jacobiano, \mathbf{J} puede diagonalizarse mediante una transformación del tipo $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{J}\mathbf{P}$. Aquí, la matriz \mathbf{P} se construye a partir de los vectores propios de \mathbf{J} , mientras que los elementos de la diagonal de $\mathbf{\Lambda}$ se obtienen a partir de $|\mathbf{J} - \lambda\mathbf{I}| = 0$.

Los valores propios los cuales representan las velocidades de propagación de la información son:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= u + c \\ \lambda_2 &= u - c\end{aligned}\tag{2.25}$$

Para encontrar los autovectores del Jacobiano se impone $\mathbf{J}\mathbf{r}^i = \lambda_i\mathbf{r}^i$ donde i es el número de ecuaciones del sistema. Los autovectores para la matriz Jacobiana son:

$$\mathbf{e}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ u + c \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ u - c \end{pmatrix}\tag{2.26}$$

El sistema de ecuaciones poco profundas se dice que es hiperbólico porque el conjunto de autovalores son reales y los autovectores son linealmente independientes.

2.1.6 Ecuación de transporte de solutos pasivos y reactivos

Una importante tarea en modelación de la calidad del agua es caracterizar adecuadamente el transporte de contaminantes en el interior de un fluido. Por tanto, en esta sección estudiaremos a fondo el transporte de solutos dentro de un fluido.

2.1.6.1 Ecuación de transporte de solutos pasivos

Los ríos transportan energía y diferentes tipos de solutos: microbiológicos, minerales y orgánicos. Este proceso físico se produce principalmente por dos mecanismos: convección y difusión. Cuando únicamente se habla de estos dos fenómenos se dice que los solutos son conservativos o no reactivos.

La convección es el movimiento del soluto debido al flujo, por tanto cuando el fluido permanezca en reposo no habrá convección debido a que en este proceso las partículas fluidas actúan como “portadores” de soluto. Si sólo existiera este proceso, el contaminante viajaría a la misma velocidad que el agua y la extensión ocupada por el contaminante sería constante. La principal causa del proceso de difusión molecular o simplemente difusión es por la agitación continua de todas las moléculas del líquido. Si, en una masa de agua, el flujo es dominado por el proceso de convección (que es lo que generalmente ocurre) el efecto de la difusión es despreciable frente al arrastre por convección. De esta forma el proceso por difusión solo tiene mayor importancia cuando el flujo está en reposo, por ejemplo, en sistemas lacustres (ver Figura 2.3a).

La representación matemática de la convección y difusión en régimen transitorio en un flujo de lámina libre 1D promediado en la sección transversal se obtiene a partir de (2.17^a) y está regida por la siguiente expresión:

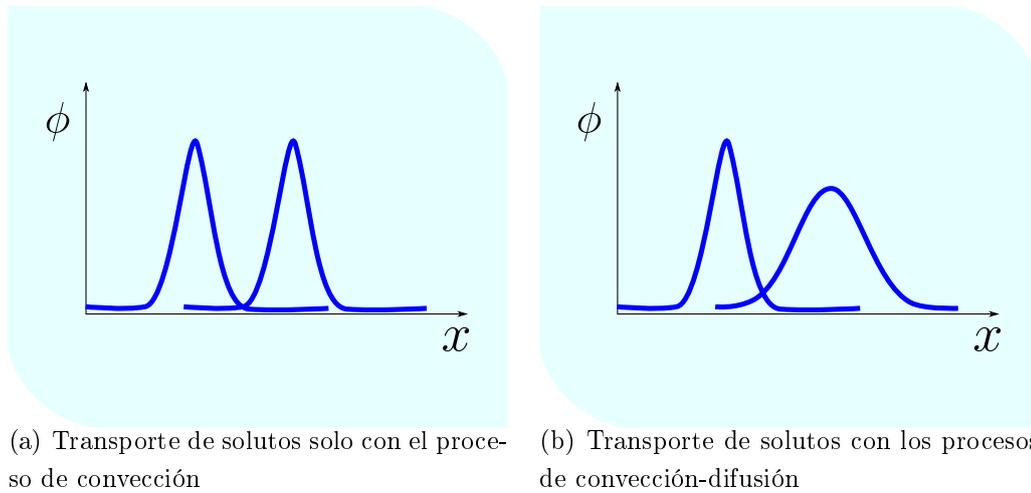


Figura 2.3: Procesos de convección-difusión en el interior de un cuerpo de agua

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial(Q\phi)}{\partial x}}_{\text{convección}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]}_{\text{difusión}} + S \quad (2.27)$$

donde S es una fuente puntual o no puntual.

2.1.6.2 Ecuación de transporte de solutos reactivos

Si al modelo (2.27) se le agrega un término conocido como velocidad de reacción o proceso (r), emerge la llamada ecuación de convección-difusión-reacción definida como:

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \underbrace{Ar\phi}_{\text{reacción}} + S \quad (2.28)$$

donde r representará la tasa de desaparición o formación de un soluto o especie química en el interior de un fluido y $Q\phi$ es el flujo convectivo. Los procesos (r) pueden ser divididos en físicos:

- Sedimentación de partículas en suspensión.
- Movimiento del agua que no afecta a los solutos, como la evaporación.
- Volatilización de la propia sustancia en la superficie del agua.

o procesos de otro tipo:

- Conversiones bioquímicas como amonio y oxígeno para formar nitrito.

- Crecimiento de algas.
- Predación por otros animales.
- Reacciones químicas.

Alguno de estos procesos son descritos en más detalle en el próximo capítulo.

La forma matemática que permite relacionar la velocidad de reacción, la concentración del reactivo y el orden de reacción suele expresarse como:

$$r = k\phi^{n_{OR}} \quad (2.29)$$

donde r = velocidad de reacción

k = Constante de reacción

ϕ = Concentración del soluto

n_{OR} = Orden de reacción

Dependiendo de los valores de n_{OR} , se puede distinguir los siguientes tipos de reacción:

- $n_{OR}=0$, reacción de orden cero.
- $n_{OR}=1$, de primer orden de reacción.
- $n_{OR}=2$, de segundo orden de reacción.

Cuando hay más de un soluto presente, la velocidad de reacción deberá tomar en cuenta ambas concentraciones:

$$r = k\phi_1^{n_{OR}}\phi_2^{m_{OR}} \quad (2.30)$$

Por ejemplo, si la velocidad de reacción es de la forma $r = k\phi_1^2\phi_2$, querrá decir que la reacción es de segundo orden con respecto al soluto ϕ_1 , y de primer orden con respecto al soluto ϕ_2 . Por tanto, la velocidad global de la reacción sería de tercer orden [119].

Otra velocidad de reacción frecuentemente usada en calidad de agua es la velocidad de saturación. Esta expresión se basa en las reacciones enzimáticas, cuyas cinéticas fueron propuestas por Michaelis y Menten [103]. Esta velocidad de reacción tiene una forma hiperbólica, en la cual la velocidad tiende al valor de saturación:

$$r = r_{max} \frac{\phi}{K_s + \phi} \quad (2.31)$$

donde r_{max} es la velocidad de reacción máxima y K_s es la constante media de saturación.

La gran importancia de la velocidad de reacción saturada reside en su forma ya que puede representar aproximadamente orden cero cuando $k_s \ll \phi$ y orden uno cuando $k_s \gg \phi$, así como, la transición entre ellas. Otra gran ventaja de su estructura es la representación en una forma continua del rango de variación entre los extremos de la falta y la abundancia de nutrientes en el medio respectivamente [123].

2.1.7 Ecuación de transporte de la temperatura en formulación 1D

La temperatura del agua juega un rol importante sobre los procesos biológicos, reacciones químicas, vida acuática y la idoneidad para los diferentes usos del agua. El incremento de la temperatura del agua, por ejemplo, puede causar cambios en las especies de peces, en la actividad industrial y afectar los procesos de enfriamientos del agua. Además, la solubilidad del oxígeno es muy sensible a la temperatura.

El aumento en la velocidad de reacción bioquímica que acompañan a un aumento de la temperatura, combinado con la disminución en la cantidad de oxígeno presente en las aguas superficiales, puede frecuentemente causar problemas en el agotamiento de las concentraciones de oxígeno disuelto (OD). Anormalmente altas temperaturas pueden fomentar el crecimiento indeseable de plantas y otras especies como hongos. Hay otras circunstancias cuando el agua caliente puede utilizarse en beneficio, siempre y cuando esté dentro de ciertos límites. Por ejemplo, la adición térmica puede promover el crecimiento de los peces y la pesca puede mejorarse en las proximidades de una planta de energía.

Consecuentemente, entender la evolución de la temperatura es un aspecto importante en materia de modelización de la calidad del agua. La modelización matemática del transporte y evolución de T en cursos de aguas superficiales ha sido reportada por muchos autores [23, 36, 121]. Estos trabajos se han orientado a evaluar las descargas naturales y provocadas por el hombre.

La modelización matemática basada en las leyes de conservación puede proveer el conocimiento necesario para interpretar y predecir el grado de contaminación termal en cursos de aguas superficiales. Un promedio formal de la ecuación (2.17)c, sobre una sección transversal del canal para la temperatura del agua, despreciando la difusión viscosa, la evaporación y la conducción de calor en las paredes puede expresarse como:

$$\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{AH_n}{\rho C_p h} + S_T \quad (2.32)$$

donde T es la temperatura promedio en la sección del agua, QT es el flujo convectivo

de la temperatura del agua, H_n es la transferencia por unidad de área de calor en el sistema en el tiempo, ρ la densidad del agua y C_p calor específico. Nótese que, si $H_n > 0$ se incrementa la temperatura del agua, mientras que, si $H_n < 0$ se enfría el agua. Por otra parte, la ecuación (2.32) asume que [15]:

- La densidad y el calor específico del agua son constantes.
- El intercambio de calor con el lecho del cauce y las orillas es despreciable.

Al mismo tiempo, la ecuación (2.32) es una función tanto del flujo de calor superficial como del transporte del agua dentro y fuera del sistema. Los intercambios de flujos de calor entre la atmósfera y la columna de agua serán detallados en el próximo capítulo.

2.1.8 Condiciones iniciales y de contorno

Las ecuaciones diferenciales desarrolladas para el modelo 1D se resumen a continuación. El sistema está formado por la conservación de la masa y la cantidad de movimiento del flujo:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} + gI_1 \right) = g[I_2 + A(S_o - S_f)]$$

la ecuación de transporte de un soluto en el agua:

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + Ar\phi + S$$

y la ecuación de transporte de la temperatura del agua:

$$\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{AH_n}{\rho C_p h} + S_T$$

Este sistema está sujeto a condiciones iniciales y de contorno. Imponer estas condiciones en un sistema dado permite formular adecuadamente cualquier problema siempre y cuando sean conocidos todos los parámetros [60].

Las condiciones iniciales de las variables dependientes área, caudal, concentración y temperatura del agua deben ser conocidas en cada punto de la malla dentro del dominio. La importancia de las condiciones iniciales depende de la relación entre la duración de la simulación y el tiempo de retención y las condiciones de contorno. Por

ejemplo, en el contexto de la calidad del agua, los efectos de las concentración iniciales y temperatura son importantes durante el período inicial de aproximadamente una a cinco veces el tiempo de residencia [9].

Por otra parte, en los límites del dominio del modelo deben ser especificadas las condiciones de contorno tales como el caudal de masas constituyentes, flujos de calores que entran y salen. Estas condiciones son las fuerzas motrices que causan los cambios en el flujo y la calidad del agua dentro del dominio y determinan los estados estacionarios del sistema.

Para problemas hiperbólicos, como el caso de las ecuaciones poco profundas, las condiciones de contorno deben ser impuestas de acuerdo con la dirección de propagación de las ondas. Para la resolución de las ecuaciones de masa y cantidad de movimiento del flujo, en un régimen en el que las fuerzas gravitacionales dominan a las fuerzas inerciales (flujo subcrítico), se necesita una condición de contorno aguas arriba y otra aguas abajo. Por el contrario, cuando el régimen es dominado por las fuerzas inerciales (flujo supercrítico) deben imponerse dos condiciones de contorno aguas arriba y ninguna aguas abajo [70]. En una aplicación típica, los flujos y elevaciones de la superficie del agua son impuestos aguas arriba del contorno y una curva de gasto determinada (o similar) es habitual en el extremo aguas abajo.

Las ecuaciones diferenciales para el transporte de un soluto o para el transporte de la temperatura del agua, por su naturaleza escalar, solamente requieren una condición de contorno aguas arriba si el transporte es puramente convectivo. Cuando se incluye tanto la convección como la difusión se necesitan dos condiciones de contorno.

La información requerida estará en función del número de solutos y de los procesos que se desean representar. Por ejemplo, cuando se quiera observar la evolución de la temperatura del agua (ecuación 2.32) se debe especificar todos los parámetros que definen la transferencia de calor, así como también el valor inicial de la temperatura del agua.

En cualquier caso, esta información requerida por los modelos hidrodinámicos y de calidad de agua debe provenir de un punto de control. Estos puntos de control (ubicaciones en diferentes posiciones de la cuenca) son operados por instituciones que tienen como misión la gestión de las diferentes masas de agua, y garantizar la calidad y cantidad de los distintos tipos de usos.

2.2 Discretización de las ecuaciones

Una vez definidos los modelos matemáticos para la hidrodinámica y el transporte de solutos, las ecuaciones deben discretizarse y ser resueltas mediante métodos numéricos puesto que no poseen solución analítica.

El proceso involucra dos componentes: la discretización del espacio y la resolución numérica de la ecuación. La discretización del espacio consiste en la creación de una malla en donde el espacio continuo es reemplazado por un número finito de puntos, en los que deberán determinarse los valores numéricos de las variables en estudio. Por tanto, la exactitud de la aproximación numérica será directamente dependiente de la malla, es decir, el error de la simulación numérica tenderá a cero cuando el tamaño de las celdas de la malla tienda a cero.

La malla es elemento esencial para todo el proceso de discretización porque, además de reducir el error, es un elemento crítico a la hora de evaluar el coste computacional requerido por una simulación. Por esta razón, sigue en estudio continuo el desarrollo eficiente y automático de generación de mallas adaptadas a geometrías arbitrarias [44] en problemas complejos.

Por otra parte, las ecuaciones diferenciales o integrales tienen que transformarse en operaciones algebraicas discretas, que relacionan los valores de las incógnitas con los puntos de la malla. Consideraremos nuestro dominio dividido en un número finito de celdas de cálculo de tamaño Δx uniforme de forma que $x_i = i\Delta x$. En el contexto de este trabajo es importante no solamente la discretización espacial sino también la temporal puesto que estamos interesados en fenómenos tanto estacionarios como transitorios. Avanzaremos la solución mediante pasos de tiempo Δt desde cada nivel temporal t^n hasta $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. La aproximación discreta de una función en la posición x_i y el tiempo t^n vendrá especificada por f_i^n (ver Figura 2.4).

Dentro de los métodos usados para problemas dependientes del tiempo se distinguen dos familias: explícitos e implícitos.

Métodos explícitos. Calculan el estado del sistema en un tiempo posterior, a partir del estado del sistema en un tiempo conocido, o lo que es lo mismo, los valores desconocidos dependen solo de las variables conocidas.

Métodos implícitos. Calculan el estado del sistema en un tiempo posterior relacionando entre sí los valores de las variables desconocidas.

Se ilustra a continuación lo esencial de estas dos aproximaciones mediante su aplicación a la discretización de la ecuación de difusión pura.

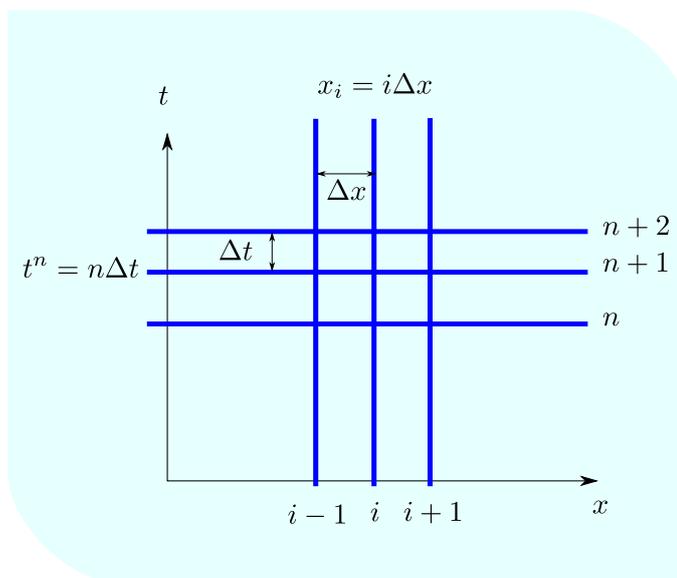


Figura 2.4: Discretización del tiempo y espacio de la ecuación física

2.2.1 Discretización de la ecuación de transporte difusivo 1D de una sustancia

Considerando, la ecuación simplificada de difusión pura:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.33)$$

podemos discretizarla aproximando la segunda derivada espacial mediante una diferencia centrada evaluada en el tiempo t^n , conduciendo a la siguiente expresión explícita:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &\simeq \frac{\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n}{\Delta x^2} \\ \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} &= E \frac{\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n}{\Delta x^2} \\ \phi_i^{n+1} &= \phi_i^n + \zeta (\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (2.34)$$

donde $\zeta = \frac{E\Delta t}{\Delta x^2}$ es el número de Péclet discreto.

Una ventaja de estos métodos es que el sistema se resuelve con un número mínimo de operaciones aritméticas. Su desventaja está en la estabilidad ya que, es necesario imponer severas restricciones en el paso de tiempo Δt de forma que $\zeta \leq 1/2$ [100]:

En los métodos implícitos, la derivada espacial se aproxima en un nivel de tiempo posterior ($t + \Delta t$), es decir:

$$\phi_{imax} = \frac{W_{imax}}{Y_{imax}} \quad (2.53)$$

Y el resto de las incógnitas ($0 \leq i < imax$) se pueden obtener recorriendo el sistema en sentido inverso para $imax - 1$

$$Y'_{imax-1}\phi_{imax-1} + Z_{imax-1}\phi_N = M'_{imax-1} \Rightarrow \phi_{imax-1} = \frac{M'_{imax-1} - Z_{imax-2}\phi_{imax}}{Y'_{imax-1}} \quad (2.54)$$

y escrito de una forma general para $imax - 2, \dots, 2$:

$$\phi_i = \frac{M'_i - Z_i\phi_{i+1}}{Y'_i} \quad (2.55)$$

La estabilidad incondicional es la característica habitual de los métodos implícitos. Sin embargo, el precio es un costo computacional más alto por paso de tiempo por tener que resolver un sistema. También hay que tener en cuenta que la estabilidad numérica no implica necesariamente precisión. Un método puede ser estable pero inexacto [74].

2.2.2 Discretización de la ecuación de transporte convectivo 1D de una sustancia

Como ejemplo canónico de los problemas de transporte consideremos la ecuación hiperbólica de convección lineal de primer orden en 1D, expresada como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi)}{\partial x} = 0 \quad (2.56)$$

siendo $\phi(x, t)$ una función (concentración) desconocida de (x, t) , ($f = u\phi$) el flujo convectivo físico. El método en volúmenes finitos ofrece un camino para la aproximación numérica de la ecuación diferencial parcial (2.56). La aproximación se aplica al volumen que rodea el punto (ver Figura 2.5), en lugar de aproximar la ecuación diferencial parcial en un punto como lo hace el método por diferencias finitas. Integrando (2.56) sobre un volumen de control $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi(x, t^n) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\phi(x_{i+1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\phi(x_{i-1/2}, t)) dt = 0 \quad (2.57)$$

El método de volumen finito considera un promedio espacial de la variable $\phi(x, t)$ en la celda i en un tiempo fijo $t = t^n$ definido como:

$$\phi_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(\phi(x, t)) dx \quad (2.58)$$

y los flujos promedio en el tiempo en las paredes de las celdas:

$$f_{i\pm 1/2}^* = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\phi(x_{i\pm 1/2}, t)) dt \quad (2.59)$$

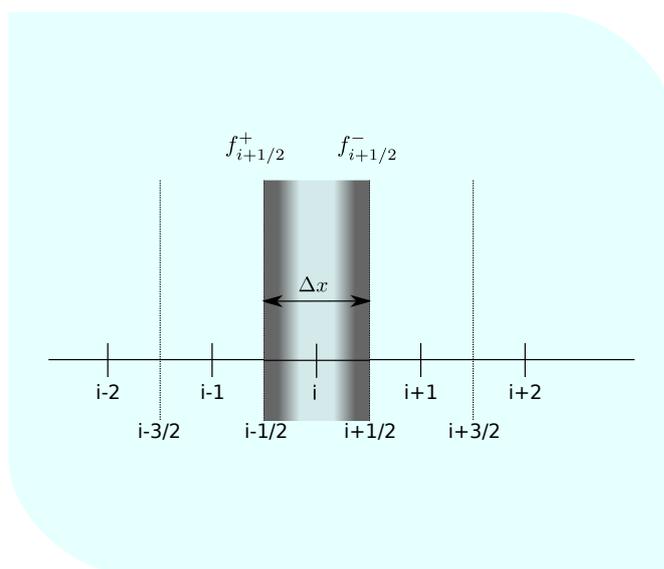


Figura 2.5: Espacio unidimensional dividido en celdas

La ecuación (2.56) puede ser discretizada de diferentes maneras con el fin de encontrar el valor de la variable ϕ , en todos los puntos de la malla y en cada nivel de tiempo.

2.2.2.1 Esquema explícito para convección (A)

Utilizando un procedimiento explícito descentrado de primer orden podemos avanzar desde un nivel de tiempo t a otro $t + \Delta t$ mediante:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (f_{i+1/2}^* - f_{i-1/2}^*) \Delta t = 0 \quad (2.60)$$

donde $f_{i+1/2}^* = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1}) - \frac{1}{2}|u|(\phi_{i+1} - \phi_i)$ con $u > 0$ está asociada a una aproximación descentrada de la derivada espacial.

Los esquemas con esta forma son conservativos porque producen una buena aproximación de la ecuación diferencial integrada entre los límites del dominio, de tal forma que las contribuciones del flujo en las paredes internas de las celdas de cálculo se cancelan entre sí, y la variación global de la variable conservada es debida exclusivamente a los flujos en los contornos [17].

Con el fin de destacar los posibles signos de las perturbaciones la ecuación (2.60) puede expresarse como:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (f_{i+1/2}^* - f_i + f_i - f_{i-1/2}^*)^n = 0 \quad (2.61)$$

o también:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\delta f_{i-1/2}^+ + \delta f_{i+1/2}^- \right)^n \quad (2.62)$$

con

$$\delta f_{i-1/2}^+ = u^+ \delta \phi_{i-1/2}$$

$$\delta f_{i+1/2}^- = u^- \delta \phi_{i+1/2}$$

y

$$u^+ = \frac{u + |u|}{2} \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}$$

$$\delta \phi_{i-1/2} = \phi_i^n - \phi_{i-1}^n \quad \delta \phi_{i+1/2} = \phi_{i+1}^n - \phi_i^n$$

Con el esquema (2.62), las contribuciones emergen de la pared $i + 1/2$ dependiendo del signo de u , y la función en los nodos vecinos. Si u es positivo, la onda se propaga hacia la derecha es decir la celda i se ve afectada por la pared $i - 1/2$, por el contrario, si u es negativo, la solución de la onda se desplaza hacia la izquierda. Como en todos los esquemas explícitos, existe una limitación para el tamaño del paso temporal compatible con la estabilidad numérica del esquema. Para formularla se utiliza una condición basada en el número adimensional numérico de Courant-Friendrichs-Lewy (CFL). Esta condición expresa que la relación de la malla $\Delta t/\Delta x$ tiene que ser elegida de tal manera que el dominio de dependencia de la ecuación diferencial esté completamente contenido en el dominio numérico de dependencia de las ecuaciones discretizadas [44]. Esta condición requiere que $\text{CFL} = \frac{u\Delta t}{\Delta x} < 1$ en este caso y por lo tanto permite escoger los pasos de tiempo:

$$\Delta t = \text{CFL} \frac{\Delta x}{u} \quad (2.63)$$

2.2.2.2 Esquema explícito para convección y difusión (B)

Cuando en un problema de transporte nos interesa incluir además del proceso de convección, el de difusión para describir un proceso físico más real, es necesario resolver la ecuación completa:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.64)$$

La ecuación diferencial parcial (2.64) se puede tratar de diferentes maneras. Si elegimos un esquema explícito, combinando (2.62) y (2.34) la expresión resultante será:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\delta f_{i-1/2}^+ + \delta f_{i+1/2}^- \right)^n + \zeta (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1})^n \quad (2.65)$$

Esta formulación explícita requiere un paso de tiempo limitado por la condición de estabilidad más restrictiva de los dos procesos convectivo y difusivo determinado por:

$$\Delta t = \min \left(\text{CFL} \frac{\Delta x}{u}, \frac{\zeta \Delta x^2}{E} \right) \quad (2.66)$$

Esto puede suponer un inconveniente en casos prácticos. Se presenta a continuación un ejemplo.

Caso 0. | Solución explícita de la ecuación de transporte convectivo (A).

Un canal prismático de longitud $L = 100\text{m}$ en el que se tiene flujo estacionario y uniforme con $A = 1\text{m}^2$ y $Q = 1\text{m}^3/\text{s}$, la velocidad de convección es $u = Q/A = 1\text{m/s}$. Se resuelve la ecuación de transporte de un soluto considerando $r = E = S = 0$ la ecuación (2.27) se reduce a (2.56). La condición inicial de este ejemplo es:

$$\phi(x, 0) = \exp(-0.01(x - 20)^2) \quad (2.67)$$

La solución numérica se evalúa con la solución analítica:

$$\phi(x, t) = e^{-0.01(x - 20.0 - ut)^2} \quad (2.68)$$

La condición de contorno para el soluto es:

$$\phi(0, t) = 0$$

La Figura 2.6 muestra el perfil longitudinal numérico (línea roja) usando (2.62) con CFL=1 y $\Delta x = 1$ m con el perfil longitudinal analítico (línea negra). Las distribuciones de concentración numérica y analítica a los 10s y 60s de simulación dan resultados similares.

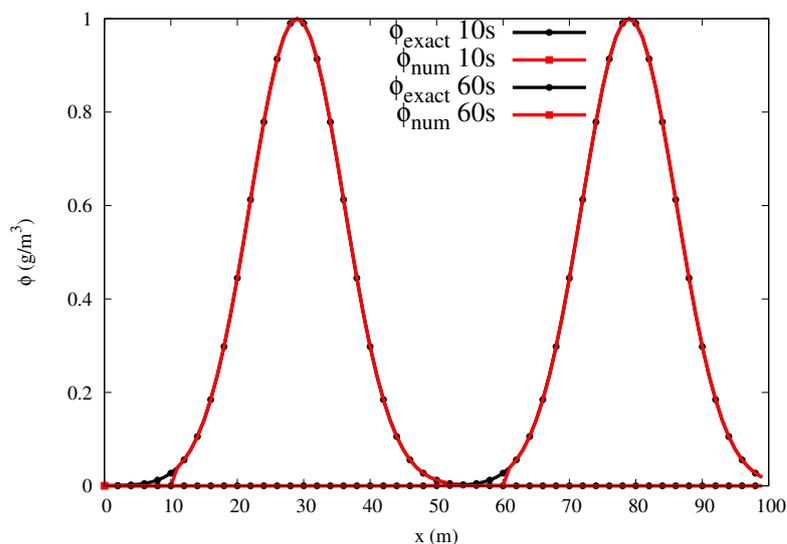


Figura 2.6: Perfil longitudinal de concentración en un canal prismático en $t=1000$ s. Caso 0

Caso 1. | Solución explícita de la ecuación de convección-difusión (B).

Suponiendo un canal prismático de longitud $L = 8000$ m en el que se tiene flujo estacionario y uniforme con $A=10\text{m}^2$ y $Q=2\text{m}^3/\text{s}$, la velocidad de convección es $u=Q/A=0.2$ m/s. Vamos a resolver la ecuación de transporte con las siguientes condiciones iniciales y de contorno:

$$\phi(x, 0) = 0 \text{ g/m}^3$$

$$\phi(0, t) = \begin{cases} 5 \text{ kg} & 0 < t \leq 300\text{s} \\ 0 \text{ kg/m}^3 & t > 300\text{s} \end{cases}$$

Suponiendo $r=S=0$ pero considerando ahora $E=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$, del mismo modo que antes, la concentración del vertido en el tramo puede ser desarrollada analíticamente por la expresión: [23]:

$$\phi(x, t) = \frac{m_p}{\sqrt{4\pi Et}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Et}} \quad (2.69)$$

donde $m_p = 500 \text{ g/m}^2$ es la masa de contaminante.

Los resultados calculados mediante (2.65) se presentan en la Figura 2.7. Los resultados numéricos se obtuvieron usando un CFL y $\zeta=0.5$ para garantizar la estabilidad numérica, y se comparan frente a la solución analítica. Como se observa, los resultados difieren entre sí. Esto se debe principalmente al valor de CFL utilizado, valor obligatorio para que los resultados en cada tiempo no presenten oscilaciones.

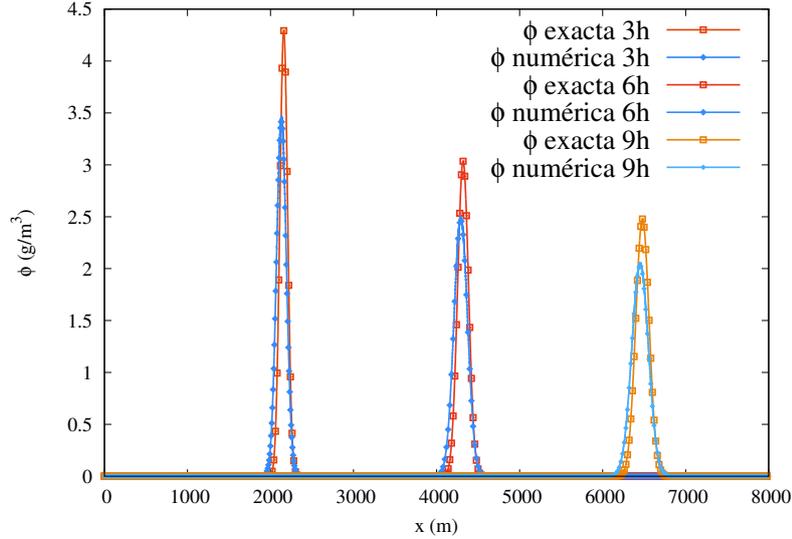


Figura 2.7: Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema explícito. Caso 1

2.2.2.3 Esquema explícito para la convección e implícito para la difusión (C)

Con el fin de aprovechar las ventajas de los dos esquemas distintos se necesita separar los dos procesos de convección y difusión de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \Rightarrow \phi^* \quad \text{Explícito} \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Rightarrow \phi^{n+1} \quad \text{Implícito} \quad (2.71)$$

Para el desarrollo de este esquema se precisa de dos etapas: 1) para la convección, con el método ya comentado usando la ecuación (2.62), se encuentra el valor de la variable ϕ^* , que la definiremos como valor intermedio. 2) Una vez conocido el transporte por

convección se calcula el término de difusión donde se encuentra el valor definitivo de la incógnita.

Si a (2.71) lo expresamos mediante el método de Euler implícito, la ecuación resultante es:

$$\phi_i^{n+1} - \phi_i^* - E \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1}) = 0 \quad (2.72)$$

Esta combinación solamente tiene el paso de tiempo restringido por a condición de $CFL < 1$

Caso 2. Resolución de la ecuación convección-difusión con el esquema C.

Para evitar los inconvenientes asociados a la estabilidad numérica del esquema B del Caso 1, se propone evaluar el mismo con el nuevo esquema (C). Los resultados con $CFL = 1$ se representan en la Figura 2.8. Las distribuciones de concentración temporales y espaciales numéricas se ajustan de mejor forma a la solución exacta y disminuyen progresivamente en el tiempo debido al proceso de la difusión.

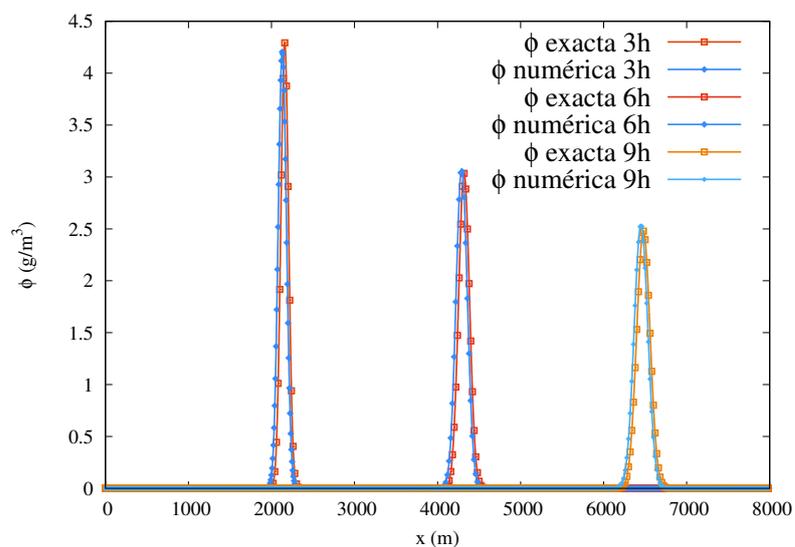


Figura 2.8: Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema C. Caso 3

2.2.2.4 Esquema explícito para la convección e implícita centrada para la difusión y reacción centrada (D)

Para representar todos los fenómenos que se dan en una descarga puntual, no puntual, natural o artificial se debe considerar además que el soluto no sea conservativo. Consideramos ahora que el término de reacción está presente en la ecuación de transporte (ecuación 2.28 asumiendo $S = 0$). Desde el punto de vista numérico los términos de reacción no condicionan la estabilidad ni requieren de un tratamiento particular. Por lo tanto se discretizan de forma explícita y centrada.

Supondremos que la reacción es de primer orden debido a que la mayoría de los procesos cinéticos se dan en esta relación. La expresión resultante se puede expresar como:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\delta f_{i-1/2}^+ + \delta f_{i+1/2}^- \right)^n + \frac{E\Delta t}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1})^{n+1} + k\phi_i^n \quad (2.73)$$

La secuencia de resolución del sistema (2.73) se define en tres pasos:

- Resolución del término de convección. Este proceso como se indicó se resuelve con un esquema explícito mediante la ecuación (2.62).
- Resolución del término de reacción. El proceso de reacción para uno o varios solutos se resuelven mediante un esquema centrado.
- Resolución del término de difusión. Este proceso en cambio se resuelve mediante un esquema dado por la ecuación (2.36).

Con este esquema (2.73) se garantiza la estabilidad numérica sin mas que controlar que $CFL \ll 1$ sin presentar oscilaciones en la evolución temporal ni en los perfiles longitudinales. Esta aseveración fue probada con el caso base propuesto en estas secciones.

Caso 3. Resolución de la ecuación de convección-difusión y reacción con el esquema D.

En este caso, considerando las condiciones de flujo de los casos 1 y 2, suponemos además un proceso de descomposición de primer orden $k = 2 \text{ d}^{-1}$. En este caso la solución analítica que describe estos procesos se expresa como:

$$\phi(x, t) = \frac{m_p}{\sqrt{4\pi Et}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Et} - kt} \quad (2.74)$$

Con este nuevo proceso incluido y con $CFL = 1$, la Figura 2.9 muestra concentraciones en $t = 3$, $t = 6$ y $t = 9$ horas tanto de la solución numérica como analítica. La

consecuencia de la degradación es evidente en las tres distribuciones, sus concentraciones son aproximadamente 1 g/m^3 menos con respecto al caso 2.

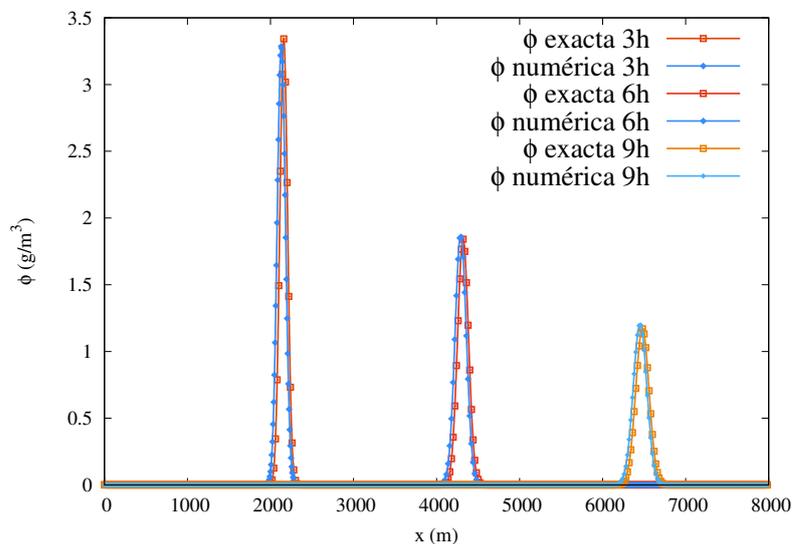


Figura 2.9: Perfiles longitudinales de concentración en un canal prismático con un esquema explícito para la convección e implícito para la difusión y centrada para la reacción. Caso 3

Caso 4. | Efecto de un vertido con degradación.

Este ejemplo consiste en un caso ideal de flujo estacionario y uniforme en un canal de sección rectangular con una área transversal de $A=10 \text{ m}^2$ y $Q = 1 \text{ m}^3/\text{s}$. El transporte del soluto se realiza con un $u = Q/A = 0.1 \text{ m/s}$. En relación a las características del soluto, su concentración queda definida mediante las siguientes condiciones:

$$\phi(x, 0) = \phi_E = 0 \quad \text{y} \quad \phi(0, t) = \phi_0 = \begin{cases} 1 \text{ kg/m}^3 & 0 < t \leq 1000 \text{ s} \\ 0 \text{ kg/m}^3 & t > 1000 \text{ s} \end{cases} \quad (2.75)$$

Para el proceso de difusión se considera un valor constante de $E = 5 \text{ m}^2/\text{s}$ durante toda la simulación mientras que, para la velocidad de descomposición del soluto se utilizó $k = 0.0005 \text{ s}^{-1}$.

Este caso test tiene solución analítica [38] en el espacio y en el tiempo y la solución numérica se compara con esta. La expresión analítica que considera los procesos de convección, difusión, degradación y producción para el pulso de soluto definido en (2.75) se expresa como:

$$\phi(x, t) = \begin{cases} (\phi_o - \frac{\gamma}{k}) \mathcal{M}(x, t) + \mathcal{N}(x, t) & 0 < t \leq t_o \\ (\phi_o - \frac{\gamma}{k}) \mathcal{M}(x, t) + \mathcal{N}(x, t) - \phi_o \mathcal{M}(x, t - t_o) & t > t_o \end{cases} \quad (2.76)$$

donde

$$\mathcal{M}(x, t) = \frac{u}{u + \alpha} \exp\left[\frac{(u - \alpha)x}{2E}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x - \alpha t}{\sqrt{4Et}}\right] + \frac{u}{u + \alpha} \exp\left[\frac{(u + \alpha)x}{2E}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x + \alpha t}{\sqrt{4Et}}\right] + \frac{u^2}{2kE} \exp\left(\frac{ux}{E} - kt\right) + \operatorname{erfc}\left[\frac{x + ut}{\sqrt{4Et}}\right] \quad (2.77)$$

$$\mathcal{N}(x, t) = (\phi_E) \exp(-kt) \left\{ 1 - \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left[\frac{x - \alpha t}{\sqrt{4Et}}\right] - \sqrt{\frac{u^2 t}{\pi E}} \exp\left[-\frac{(x - \alpha t)^2}{4Et}\right] \right. \\ \left. \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ux}{E} + \frac{u^2 t}{E} \right) \exp\left(\frac{ux}{E}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{x + \alpha t}{\sqrt{4Et}}\right] \right\} \quad (2.78)$$

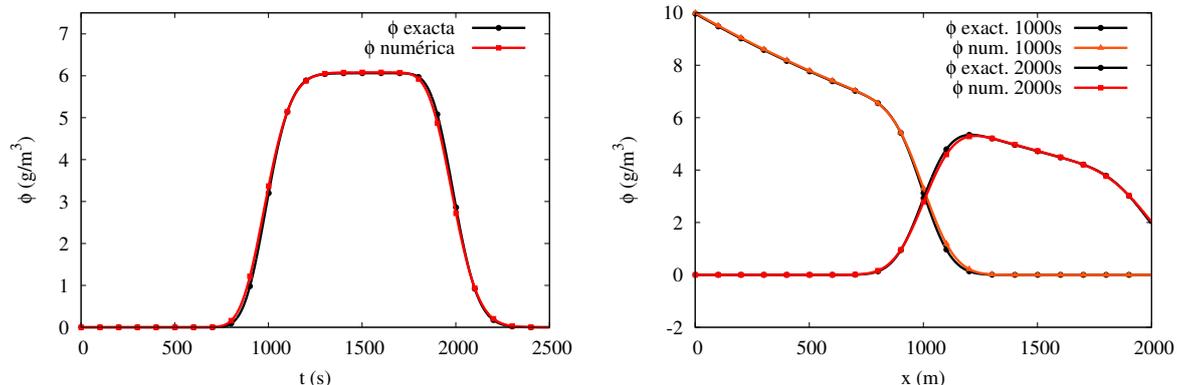
y

$$\alpha = u \sqrt{1 + 4kE/u^2} \quad (2.79)$$

Los resultados se representan en la Figura 2.10. La evolución temporal de la concentración en la posición $x=1000$ m (Fig. 2.10a) tanto de la solución numérica (línea roja) como analítica (línea negra) son idénticos. Si prestamos atención a los perfiles longitudinales en $t=1000$ s y $t=2000$ s, se observa que el avance de la concentración (analítica y numérica) en esos tiempos coinciden. Tanto el efecto de degradación como el de la difusión repercuten sobre la concentración inicial, es decir, su disminución es progresiva en el tiempo y en el espacio. Las variables hidrodinámicas no se presentan porque en este ejemplo son constantes. Adicionalmente, tanto la evolución temporal de la concentración en $x=1000$ m como los perfiles longitudinales en distintos tiempos no presente valores no reales ni tampoco inestabilidades durante todo el tiempo de simulación.

Caso 5. | Transporte reactivo de dos solutos acoplados

Presentamos para finalizar esta sección un caso de transporte convectivo-reactivo que involucra a dos solutos. Las ecuaciones de transporte suponiendo $u=2$ m/s, sin término de difusión ($E=0$) y con reacción de primer orden $k=0.1$ s⁻¹ se definen como:



(a) Evolución temporal de la concentración analítica vs numérica en $x=1000$ m

(b) Perfil longitudinal de la concentración analítica vs numérica

Figura 2.10: Simulación de los procesos de convección, difusión y reacción con solución analítica. Caso 4

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} + u \frac{\partial \phi_1}{\partial x} &= -k \phi_1 \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial t} + u \frac{\partial \phi_2}{\partial x} &= k \phi_1 \end{aligned} \quad (2.80)$$

Las condiciones iniciales y de contorno para el sistema (2.80) son:

$$\phi_1(x, 0) = \begin{cases} \sin\left(\frac{2\pi x_i}{l}\right) & 0 \leq x_i < 5 \\ 0 & x_i > 5 \end{cases}$$

$$\phi_2(x, 0) = \begin{cases} 1 - \sin\left(\frac{2\pi x_i}{l}\right) & 0 \leq x_i < 5 \\ 1 & x_i > 5 \end{cases}$$

$$\phi_1(0, t) = 0$$

$$\phi_2(0, t) = 1$$

Este caso posee solución analítica expresada como:

$$\phi_1 = \begin{cases} \sin \left[\frac{2\pi(x_i-ut)}{l} \right] e^{-k_1 t} & 0 \leq x_i < 5 \\ 0 & x_i > 5 \end{cases}$$

$$\phi_2 = \begin{cases} 1 - \sin \left[\frac{2\pi(x_i-ut)}{l} \right] e^{-k_1 t} & 0 \leq x_i < 5 \\ 1 & x_i > 5 \end{cases}$$

Utilizando una longitud $l = 10\text{m}$ discretizada mediante $\Delta x = 0.01\text{m}$ y $\text{CFL} = 1$ se obtiene las soluciones tanto para el soluto ϕ_1 como ϕ_2 . La Figura 2.11 muestra las comparaciones entre las distribuciones espaciales numéricas y analíticas de los solutos en $t=1\text{ s}$ y $t=10\text{ s}$. Debido a que el término de degradación de ϕ_1 es fuente de ϕ_2 todo lo que se consume del primer soluto es incorporado al soluto 2. Este proceso se observa en todo el proceso de simulación siendo corroborada por la solución analítica.

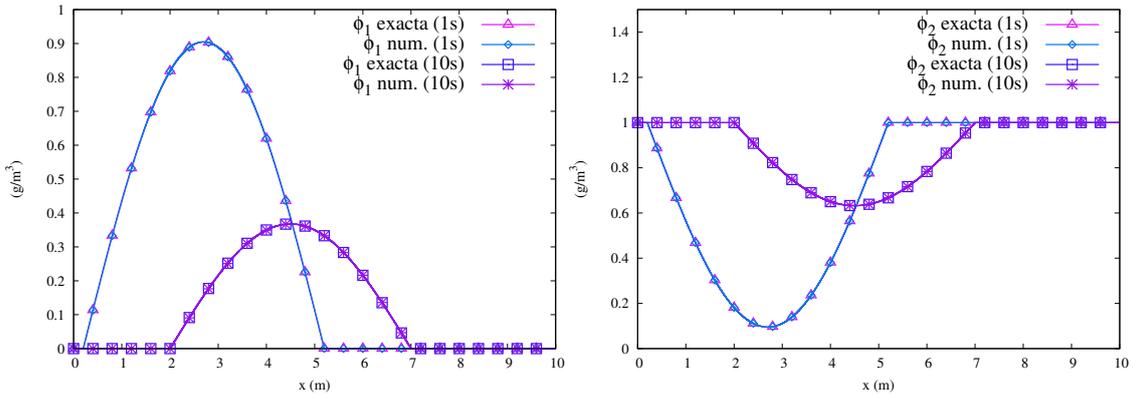


Figura 2.11: Distribución espacial del soluto ϕ_1 (izquierda) y ϕ_2 (derecha). Caso 5

2.2.3 Discretización de las ecuaciones aguas poco profundas en 1D

En ocasiones el transporte se produce en una corriente no uniforme incluso no permanente. Por lo tanto la sección mojada y el caudal pueden variar y es preciso resolver las variables del flujo simultáneamente.

El método de volúmenes finitos puede ser extendido para resolver simultáneamente las variables del flujo de agua y los solutos transportados en ella [8, 80]. El esquema de tipo Godunov upwind explícito de primer orden se consideró en este trabajo porque permite tener un gran control en la estabilidad numérica [78, 81], sobre todo cuando los términos fuente son relevantes [79]. El balance entre los flujos y términos fuentes es exacto, por tanto, asegura soluciones conservativas en el transitorio y cuando se acerca

al estacionario. Por último su formulación es fácilmente extendible a dos dimensiones y a esquemas de alto orden [82].

El sistema (2.24) puede ser discretizado en una malla regular de tamaño Δx por medio de un esquema explícito upwind de primer orden. La linealización de Roe [76] permite expresar las diferencias en variables conservadas y los términos fuente a través de las paredes $i + 1/2$ entre las celdas $(i, i + 1)$ como la suma de ondas expresada mediante combinación lineal de la base de vectores propios del Jacobiano:

$$\delta \mathbf{U}_{i+1/2} = \mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i = \sum_{m=1}^2 (\tilde{\alpha}^m \tilde{\mathbf{e}}^m)_{i+1/2} \quad (2.81)$$

$$\left(\tilde{\mathbf{H}}' \Delta x \right)_{(i+1/2)} = \sum_{m=1}^2 \left(\tilde{\beta}^m \tilde{\mathbf{e}}^m \right)_{i+1/2}$$

con

$$\tilde{\alpha}_1 = \frac{\tilde{\lambda}_2 \delta A - \delta Q}{2\tilde{c}} \quad \tilde{\alpha}_2 = \frac{-\tilde{\lambda}_1 \delta A + \delta Q}{2\tilde{c}}$$

$$\tilde{u} = \frac{\sqrt{A_i} u_i + \sqrt{A_{i+1}} u_{i+1}}{\sqrt{A_i} + \sqrt{A_{i+1}}} \quad \tilde{c} = \sqrt{g \frac{A_i + A_{i+1}}{B_i + B_{i+1}}} \quad (2.82)$$

$$\tilde{\beta}_1 = -\frac{1}{2\tilde{c}} \left\{ g\tilde{A} \left[(\tilde{S}_0 - \tilde{S}_f) \Delta x - \delta h + \frac{1}{\tilde{B}} \delta A \right] \right\} \quad \tilde{\beta}_2 = -\tilde{\beta}_1$$

con $\tilde{A} = 1/2(A_i + A_{i+1})$ y $\tilde{B} = 1/2(B_i + B_{i+1})$, y

$$\delta A_{i+1/2} = A_{i+1} - A_i$$

$$\delta Q_{i+1/2} = Q_{i+1} - Q_i$$

$$(\tilde{S}_0)_{i+1/2} = -\frac{z_{i+1} - z_i}{\Delta x} \quad (2.83)$$

$$(\tilde{S}_f)_{i+1/2} = \frac{(S_f)_i + (S_f)_{i+1}}{2}$$

Por lo tanto, el esquema numérico para actualizar en todas las celdas se define como [79, 76]:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\sum_m \tilde{\lambda}^+ \tilde{\gamma} \tilde{\mathbf{e}} \right)_{i-1/2}^m + \left(\sum_m \tilde{\lambda}^- \tilde{\gamma} \tilde{\mathbf{e}} \right)_{i+1/2}^m \right]^n \quad (2.84)$$

donde $\tilde{\gamma}_{i+1/2}^m = \left(\tilde{\alpha} - \frac{\tilde{\beta}}{\lambda}\right)_{i+1/2}^m$, Δt es el paso de tiempo, el superíndice indica el nivel de tiempo y m es el número de valores propios.

Las contribuciones entrantes desde las paredes izquierda y derecha son usadas para actualizar el valor de las variables en cada celda, generando que el esquema desarrollado sea robusto, conservativo, bien equilibrado y preservando la positividad [75].

El paso de tiempo se elige dinámicamente, evitando la interacción entre las otras ondas externas adyacentes del problema de Riemann considerando la velocidad de las ondas y el tamaño de celda. La relación que garantiza la estabilidad de la solución numérica es la generalización a sistemas de la condición presentada anteriormente:

$$\Delta t = \text{CFL} \min_{i,m} \left(\frac{\Delta x}{|\tilde{\lambda}_m|_i} \right) \text{ con CFL} < 1 \quad (2.85)$$

siendo $\tilde{\lambda}_m$ la velocidad promedio de las ondas evaluada en cada pared de la malla. Vale la pena destacar que este paso global se calcula de forma dinámica y que además controla la estabilidad del sistema acoplado.

En un modelo de calidad de agua orientado a flujo en ríos, además de la evolución de las variables hidráulicas (A, Q) se desea conocer la de las variables químicas que se transportan con el agua. Todas ellas están sometidas a los procesos de convección, difusión y reacción/fuentes. Se ilustra a continuación la metodología que se ha adoptado utilizando para ello la ecuación de transporte de la temperatura del agua.

2.2.4 Discretización de la ecuación de transporte 1D (Temperatura)

Para ilustrar el procedimiento, en este apartado se toma como referencia la ecuación de transporte de la temperatura. El proceso para encontrar la solución de cada volumen de control consiste en tres fases: parte advectiva, parte difusiva y reactiva/fuentes.

$$\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial(QT)}{\partial x}}_{\text{convección}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial T}{\partial x} \right]}_{\text{difusión}} + \underbrace{\frac{AH_n}{\rho C_p h} + S_T}_{\text{reacción/fuentes}}$$

Parte advectiva o convección

$$\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} = 0 \quad (2.86)$$

El esquema para actualizar la parte advectiva de la temperatura en todas las celdas i es:

$$(AT)_i^* = (AT)_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(qT)_{i+1/2}^\downarrow - (qT)_{i-1/2}^\downarrow \right]^n \quad (2.87)$$

donde q^\downarrow se define para desacoplar el transporte del soluto advectivo completamente del sistema hidrodinámico en una forma conservativa [77]:

$$q_{i+1/2}^\downarrow = Q_i + \sum_{m=1}^2 \left(\tilde{\lambda}^- \tilde{\gamma} \tilde{\mathbf{e}}^1 \right)_{i+1/2}^m \quad (2.88)$$

Por otro lado,

$$T_{i+1/2}^\downarrow = \begin{cases} T_i & \text{if } q_{i+1/2}^\downarrow > 0 \\ T_{i+1} & \text{if } q_{i+1/2}^\downarrow < 0 \end{cases} \quad (2.89)$$

Parte reactiva. La resolución de este proceso parte de la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial(AT)^*}{\partial t} = AR + S_T \quad (2.90)$$

siendo $R = \frac{H_n}{\rho C_p h}$. La formulación del término R será analizado en detalle en el siguiente capítulo cuando se consideren más variables de estado. En consecuencia, la expresión (2.90) puede ser discretizada como:

$$(AT)_i^{**} = (AT)_i^* + \Delta t (A)_i^n R_i \quad (2.91)$$

donde los superíndices *, ** representan estados de cálculos intermedios antes de conseguir la solución final de la variable independiente.

Parte difusiva. Para evitar valores de paso de tiempo más pequeños que (2.85) impuestos por la condición de CFL usaremos un esquema implícito. La parte difusiva se expresa como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(AT)^{**}}{\partial t} &= E \frac{\partial}{\partial x} \left(A \frac{\partial T}{\partial x} \right) \\ \frac{(AT)_i^{n+1} - (AT)_i^{**}}{\Delta t} &= E \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left\{ (AT)_{i+1}^{n+1} - (2AT)_i^{n+1} - (AT)_{i-1}^{n+1} \right\} \end{aligned} \quad (2.92)$$

El esquema implícito para la ecuación difusión es:

$$\left(-\frac{\Delta t}{\Delta x^2} E \tilde{A}\right) T_{i-1}^{n+1} + \left(1 + 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} E \tilde{A}\right) T_i^{n+1} + \left(-\frac{\Delta t}{\Delta x^2} E \tilde{A}\right) T_{i+1}^{n+1} = (AT)_i^{**} \quad (2.93)$$

Este sistema puede resolverse con el mismo algoritmo de Thomas explicado anteriormente. Con el esquema upwind explícito-implícito formulado en estado no estacionario nos permite tener un mayor control de la estabilidad numérica. El balance entre los flujos y términos fuentes es exacto, por tanto aseguramos soluciones conservativas en ambos escenarios transitorios y estacionarios.

Del mismo modo, se establece en tres pasos la resolución de la ecuación de transporte de cualquier sustancia escalar con concentración ϕ de la forma:

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \frac{(Q\phi)}{\partial x} = E \frac{\partial}{\partial x} \left(A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + Ar\phi + S \quad (2.94)$$

Con el fin de comprobar las ventajas antes mencionadas, en especial la estabilidad numérica, se proponen una serie de casos test. Cada una de estas simulaciones consideran cambios de régimen en la hidrodinámica, situaciones transitorias, diferentes canales prismáticos, así como pulsos de concentración. Por simplicidad, y porque más adelante se estudiará de forma meticulosa el término de reacción, para estos casos se considera una degradación de primer orden.

Caso 6. | Transporte de un vertido en un flujo subcrítico estacionario.

Una vez realizado el análisis de la ecuación de transporte con todos sus procesos en un caso analítico, el siguiente paso es darle más realismo al transporte hidrodinámico. Es conveniente utilizar casos de flujo no uniforme que posean solución exacta. McDonald [69] desarrolló soluciones de flujo no uniforme en canales de fondo variable con fricción. Proponemos añadir a estos flujos el transporte convectivo de una sustancia para evaluar la calidad de las soluciones. El caso test consiste en un canal rectangular de 150 m de longitud con fondo variable, con un coeficiente de fricción de Manning de 0.03 s/m^{1/3} uniforme en todo el dominio. Las condiciones iniciales para el flujo y solutos son:

$$\begin{aligned} Q(x, 0) &= 10 \text{ m}^3/\text{s} \\ A(x, 0) &= 10 \text{ m}^2 \\ \phi(x, 0) &= 0 \text{ g/m}^3 \end{aligned}$$

Las condiciones de contorno para el flujo son las de un flujo estacionario subcrítico mientras que supondremos un pulso temporal de soluto en la entrada:

$$\begin{aligned} Q(0, t) &= 20 \text{ m}^3/\text{s} \\ h(0, t) &= 0.800054 \text{ m} \\ \phi(0, t) &= \begin{cases} 10 \text{ g/m}^3 & 0 < t \leq 100\text{s} \\ 0 \text{ g/m}^3 & t > 100\text{s} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.95)$$

Como para este caso no existe solución analítica del transporte del soluto solo observaremos su evolución numérica en el tiempo y espacio. Para las variables del flujo haremos la evaluación respecto a la solución analítica del calado a lo largo del canal $h(x)$ que para este caso viene dada por:

$$h(x) = 0.71 + 0.25 \sin^2 \left(\frac{3\pi x}{300} \right) \quad (2.96)$$

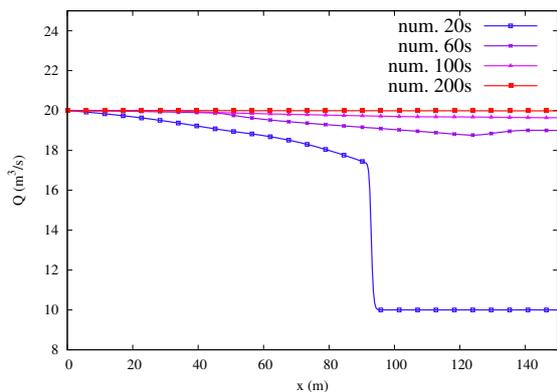
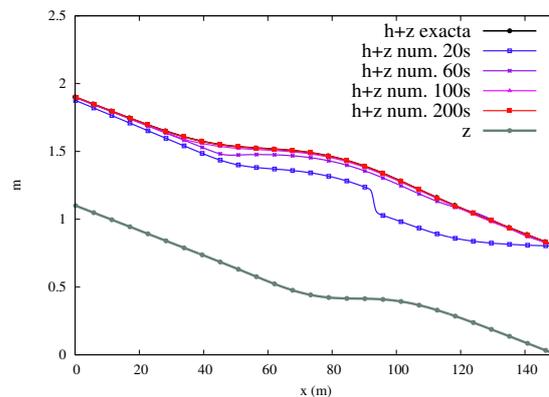
La solución numérica se calcula con $CFL = 1$ y número de celdas igual a 400. Las distribuciones temporales y espaciales para el soluto y flujo (solo espaciales) se muestra en la Figura 2.12. Observando el perfil longitudinal tanto del caudal como del nivel convergen a la solución buscada después de los 200 s. La Figura 2.12c y Figura 2.12d, del soluto presentan resultados igual de satisfactorios que el hidrodinámico. Sus distribuciones temporales como longitudinales están libres oscilaciones en el escenario propuesto.

Caso 7. | Transporte de un vertido en un flujo transcrito estacionario.

Estudiaremos ahora un caso más complejo con sección trapezoidal y régimen subcrítico en la primera mitad del dominio pasando por una transición suave a flujo supercrítico en el resto del dominio. De igual manera que antes, el caso fue extraído de [70]. Las características son: ancho de la base de 10 m, longitud del dominio de 200 m con un coeficiente de Manning de 0.03 m/s^{-1} y una pendiente lateral $S_L = tg\alpha_L = 2$ (ver Figura 2.13).

Las condiciones iniciales para el flujo y solutos son las del caso anterior:

$$\begin{aligned} Q(x, 0) &= 10 \text{ m}^3/\text{s} \\ A(x, 0) &= 10 \text{ m}^2 \\ \phi(x, 0) &= 0 \text{ g/m}^3 \end{aligned}$$

(a) Perfil longitudinal de Q 

(b) Perfil longitudinal del nivel (analítica vs numérica)

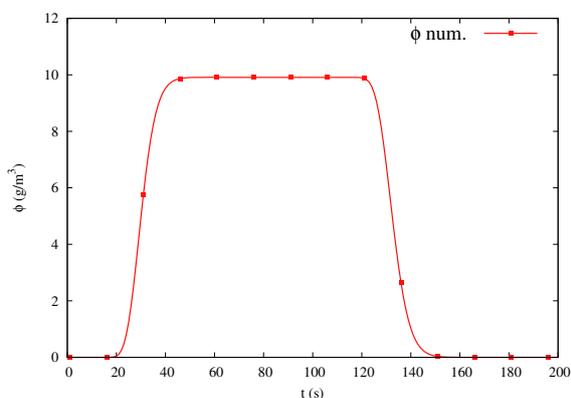
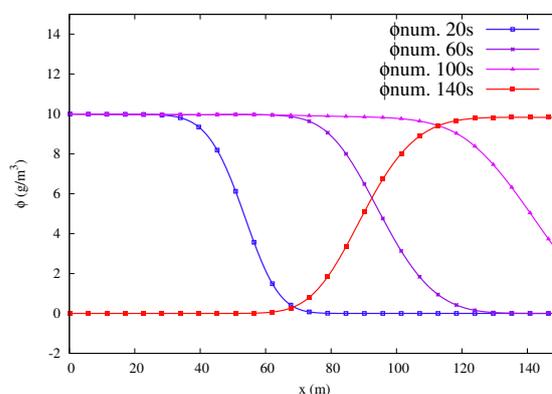
(c) Evolución temporal ϕ en $x=75$ m(d) Perfil longitudinal de ϕ

Figura 2.12: Régimen subcrítico y pulso de soluto. Caso 6

Las condiciones de contorno para el flujo son las de un flujo estacionario con salida libre mientras que supondremos un pulso temporal de soluto en la entrada:

$$Q(0, t) = 20 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\phi(0, t) = \begin{cases} 10 \text{ g/m}^3 & 0 < t \leq 100\text{s} \\ 0 \text{ g/m}^3 & t > 100\text{s} \end{cases} \quad (2.97)$$

La Figura 2.14, muestra perfiles longitudinales de calado, caudal y concentración en varios tiempos. De esta última variable también se presenta la evolución temporal a los 75 m. Las distribuciones de las variables hidrodinámicas llegan al estacionario

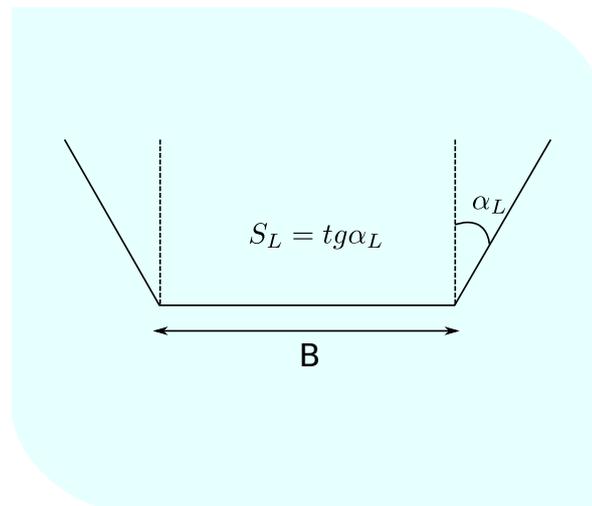


Figura 2.13: Esquema sección trapezoidal

después de los 200 s de simulación apropiadamente. El comentario previo se apoya en la comparación numérica del nivel con la solución exacta, al finalizar el proceso estos dos resultados son muy parecidos entre sí (ver Figura 2.14b).

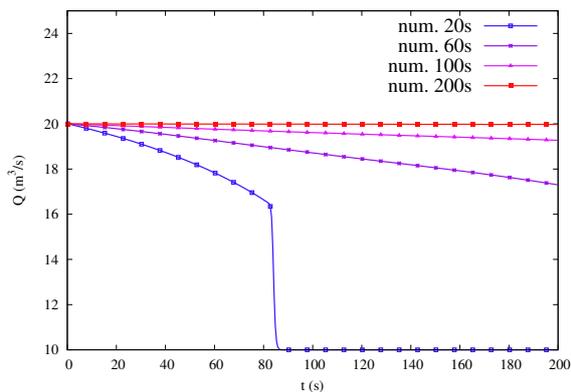
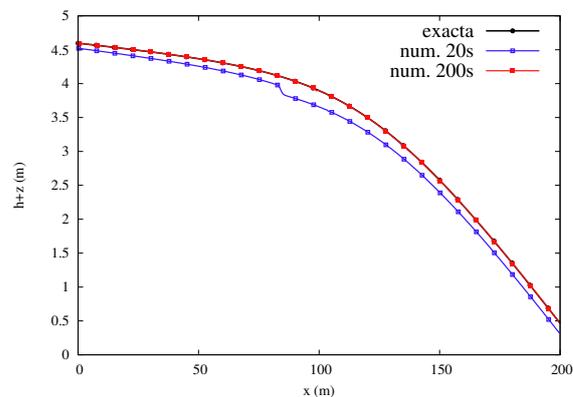
Si observamos con atención las distribuciones de ϕ en el tiempo difieren entre sí entre el Caso 6 y Caso 7 a pesar de que el caudal de entrada y el pulso se han definido iguales. La diferencia es debida a la forma de la sección y al régimen del flujo en el que se transporta este soluto.

Caso 8. | Transporte en flujo transitorio de tipo rotura de presa

Con el fin de evaluar el comportamiento del método numérico propuesto en presencia no sólo de cambios espaciales en la geometría sino también de cambios temporales en el flujo se incluye ahora un caso test de transporte en condiciones de variación brusca. Las características del caso son: un canal de $L=100\text{m}$ sin fricción con ancho variable. El ancho del canal es $B=5\text{ m}$ desde $x=0\text{m}$ hasta $x=50\text{m}$ y $B=30\text{m}$ desde $x=50\text{m}$ hasta $x=100\text{m}$. La presa está ubicada en $x=30\text{m}$ donde además existe un escalón de 2m en el fondo. La Figura 2.15 es un esquema del caso.

Las condiciones iniciales para el flujo son velocidad nula con profundidad de agua y concentración de soluto discontinuas:

$$h(x, 0) = \begin{cases} 4\text{ m} & 0 < x \leq 30\text{m} \\ 1\text{ m} & x > 30\text{m} \end{cases} \quad \phi(x, 0) = \begin{cases} 1\text{ g/m}^3 & 0 < x \leq 30\text{m} \\ 0\text{ g/m}^3 & x > 30\text{m} \end{cases} \quad (2.98)$$

(a) Perfil longitudinal de Q 

(b) Perfil longitudinal del nivel (analítica vs numérica)

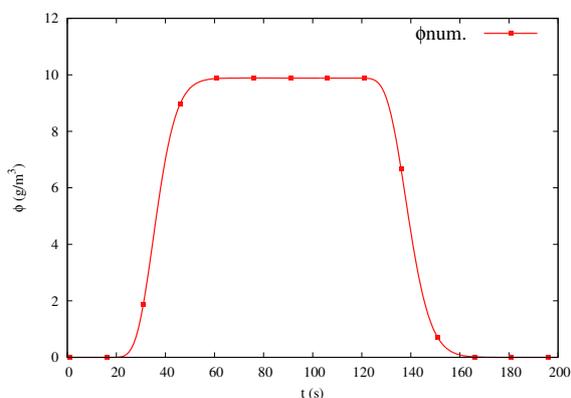
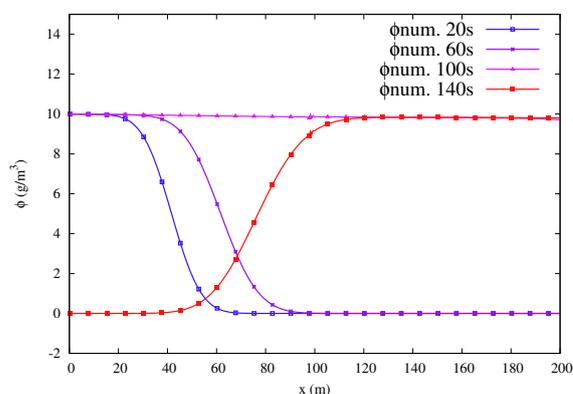
(c) Evolución temporal ϕ en $x=75$ m(d) Perfil longitudinal de ϕ

Figura 2.14: Régimen subcrítico y pulso de soluto Caso 7

En este caso no hay difusión ($E=0$) ni reacción ($r=0$) con el fin de evaluar el esquema únicamente con el transporte convectivo. En este caso se usó un $\Delta x = 0.5$ m y $CFL=1$.

La Figura 2.16 y Figura 2.17 representan la condición inicial del nivel y del fondo del canal y la solución numérica de los perfiles del nivel de agua en algunos tiempos de simulación.

La evolución de la concentración en algunos tiempos se ilustra en la Figura 2.18. Una particularidad de este transporte está en la velocidad de avance de onda, cuando entra en la zona de ensanchamiento su velocidad disminuye comparado con la velocidad de advección de aguas arriba.

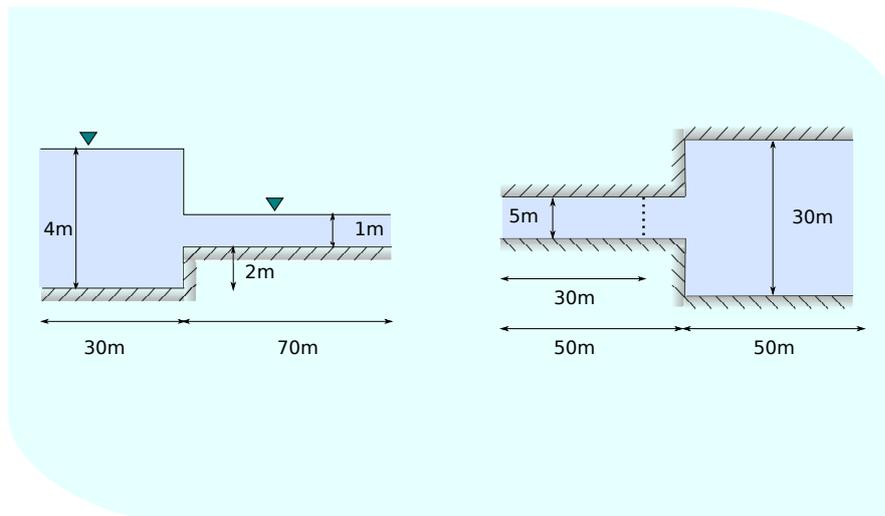


Figura 2.15: Vista lateral (izquierda) y vista en planta (derecha) de la sección rectangular. Caso 8

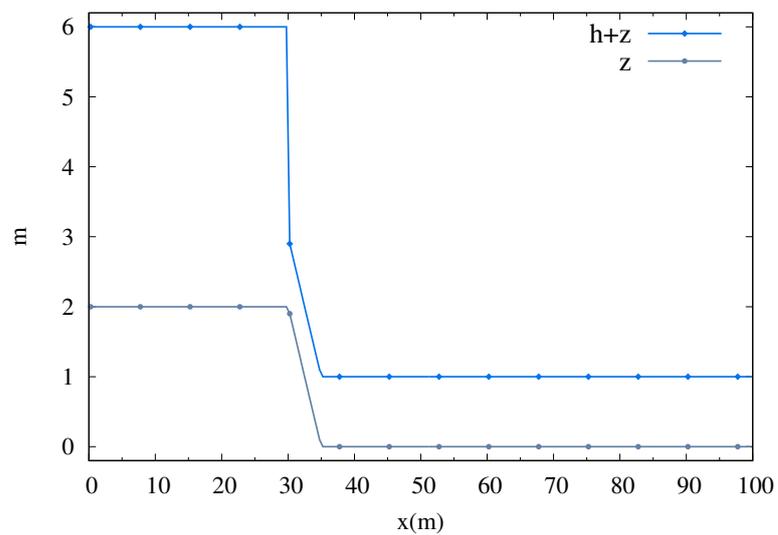


Figura 2.16: Condición inicial del nivel. Caso 8

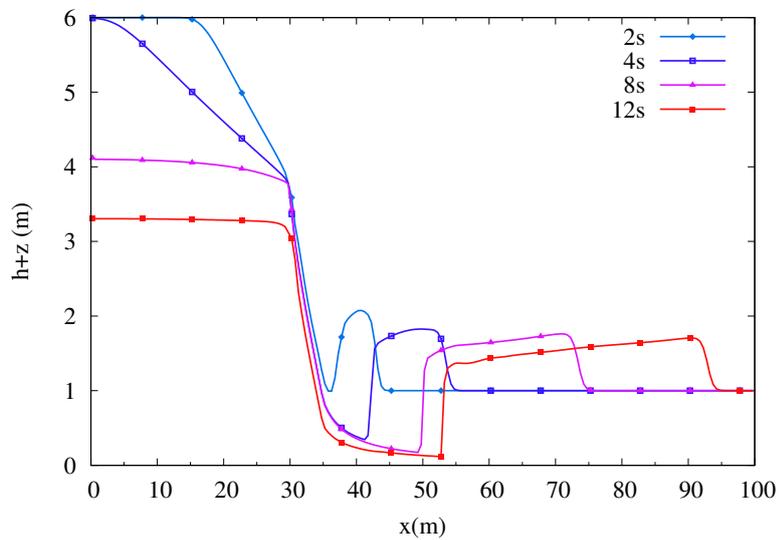


Figura 2.17: Evolución del perfil longitudinal del nivel. Caso 8

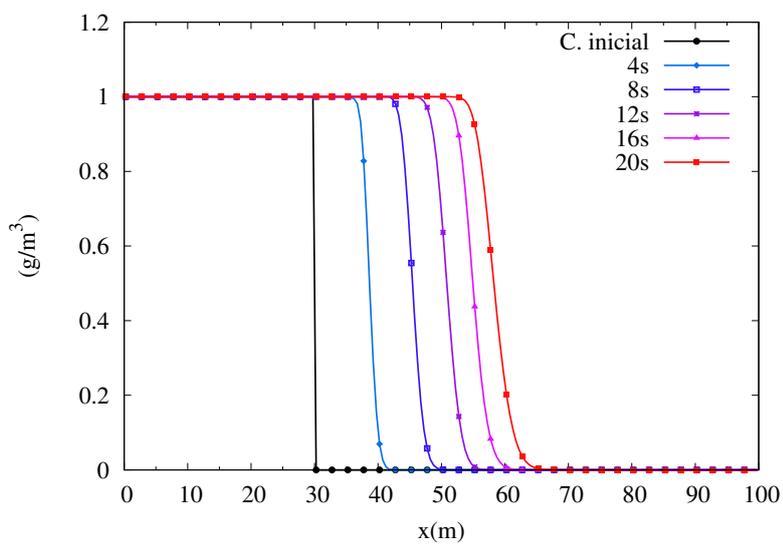


Figura 2.18: Perfiles longitudinales de concentración. Caso 8

Modelos de calidad de agua

3.1 Modelos de calidad de agua en ríos

El objetivo de analizar la calidad del agua en ríos es caracterizar de forma apropiada las relaciones causa/efecto entre las descargas y el deterioro de un volumen de agua. Por tanto, es necesario que cualquier acción relacionada con la calidad del agua vaya acompañada de evaluaciones precisas, en particular de las condiciones hidráulicas [9]. El flujo, nivel, geometría y velocidad en los que se transporta una sustancia, condicionan el destino y comportamiento de la misma. Los indicadores de calidad del agua pueden ser medidos en cuerpos de aguas y descargas puntuales y no puntuales. Algunos de los parámetros más importantes presentes en ambientes acuáticos son:

- Temperatura (T).
- Oxígeno disuelto (OD).
- Salinidad (S).
- Conductividad.
- Carbono orgánico total (COT).
- Coliformes totales (CT).
- Demanda química de oxígeno (DQO).
- Demanda bioquímica de oxígeno debido al carbón (DBO-C).

- Metales y no metales (Cd, Cr, Al, As..).
- Fósforo orgánico (PO).
- Fósforo inorgánico (PI).
- Nitrógeno orgánico (NO).
- Amonio ($\text{NH}_4 - \text{N}$).
- Nitrato (NO_3).
- Algas (Al).

Cada uno de estos parámetros puede ser medido en puntos representativos de la cuenca. Estas muestras son analizadas mediante técnicas específicas para detectar y cuantificar con exactitud la proporción que existe de cada una de ellas en un volumen de agua determinado. Los indicadores de calidad descritos anteriormente están presentes de forma natural en los cuerpos de agua o su aparición es debida a vertidos deliberados sobre estas masas de agua. Estos vertidos pueden ser caracterizados como fuentes puntuales y no puntuales, las mismas que pueden estar gobernadas por diferentes mecanismos.

Fuente puntual. Es una fuente de contaminación que puede ser atribuida a una ubicación física específica y se distingue fácilmente porque generalmente sale de una tubería [53]. Algunos ejemplos de fuentes puntuales son las salidas de plantas de aguas residuales y plantas potabilizadoras, refinerías de petróleo, plantas de energía nuclear, instalaciones ganaderas, entre otras. Estas fuentes se encuentran reguladas por organismos de control que evitan la descarga fuera de ciertos umbrales establecidos. Estos límites están restringidos por un número de factores, como por ejemplo el período estacional, el caudal del agua receptor o la calidad del agua en el tramo principal, etc.

Fuente no puntual o difusa. Este tipo de contaminación proviene de numerosos lugares o fuentes que no tienen puntos de origen bien establecidos y que, al no ser regulados por ningún organismo de control, amenazan seriamente la calidad del agua y los sistemas naturales. Entre los ejemplos de fuentes no puntuales se encuentran las escorrentías de áreas agrícolas, el sector de la construcción (fabricación de materiales), escurrimientos fluviales contaminados por el lavado de plazas de estacionamiento, carreteras y autopistas. La característica principal de esta categoría es que difieren mucho de las fuentes puntuales en la distribución temporal y espacial de estos vertidos, haciendo mucho más difícil su evaluación y control en los cuerpos receptores.

La salud de un río está directamente relacionada con la magnitud, tipo de fuente descargada y con la calidad de la cuenca circundante. Frecuentemente actúa como un

sumidero de estas descargas y, por ende, todos los procesos deben ser estudiados, con el fin de preservar el buen estado de estas fuentes de agua para los diferentes usos en beneficio de la sociedad.

Para mejorar las predicciones en el tiempo y espacio de los indicadores de calidad más relevantes en el entorno fluvial se propone en este trabajo un modelo unidimensional hidráulico acoplado con varias leyes de transporte. Antes de la formulación detallada del modelo de calidad propuesto en este trabajo se requiere aclarar ciertos aspectos:

- El modelo de calidad contempla varios niveles de complejidad que se identifican como subconjuntos de los que se muestran en la Tabla 3.1. Se empezará describiendo la formulación del balance de calor (ϕ_1). Seguiremos con la interacción entre las variables de estado OD (ϕ_6) y DBO-C (ϕ_2), el proceso de nitrificación (ϕ_3, ϕ_4 y ϕ_5), modelo simplificado que describe la interacción predador-presa. Y finalmente el modelo de la eutrofización que involucra a todas las variables de la Tabla 3.1.

- Los procesos cinéticos de cada variable se han formulado conforme al modelo WASP debido a su uso en la predicción y destino de parámetros de calidad más comunes en ríos, estuarios, lagos y embalses [47, 54, 66, 130]. Estos procesos representan el mecanismo de reacción incluido en la ecuación general de transporte de una sustancia que recordamos por completitud:

$$\frac{\partial(A\phi_k)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial(Q\phi_k)}{\partial x}}_{\text{convección}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial \phi_k}{\partial x} \right]}_{\text{difusión}} + \underbrace{AR_k + S_k}_{\text{reacción/fuentes}}$$

- La terminología utilizada para representar los procesos cinéticos de las variables dependientes será la letra R acompañada de un sufijo numérico que viene dado por la variable de estado en estudio. Por ejemplo, R_1 indicará proceso de aumento o disminución de la concentración de la variable de estado ϕ_1 . De esta forma se formulará una matriz donde las filas serán los procesos cinéticos de acuerdo a la complejidad elegida y el número de columnas igual a las variables de estado.

3.2 Modelo meteorológico para la ecuación de transporte de la temperatura del agua

Todo masa de agua natural tiene la propiedad de intercambiar calor por medio de la radiación, evaporación y conducción [36]. Estos intercambios de calor son adicionales a la variación de la energía asociada al flujo neto en un volumen de control. Se deben estimar adecuadamente para evaluar de forma correcta el balance total de calor que

Nombre	Variable
Temperatura	ϕ_1
Materia orgánica	ϕ_2
Nitrógeno orgánico	ϕ_3
Amonio	ϕ_4
Nitrato	ϕ_5
Oxígeno disuelto	ϕ_6
Fósforo orgánico	ϕ_7
Fósforo inorgánico	ϕ_8
Algas	ϕ_9
Zooplankton	ϕ_{10}

Tabla 3.1: Variables de estado del modelo de calidad

ingresa en un volumen de control. Esta tasa neta de intercambio de calor por unidad de área y tiempo en la interfaz aire-agua despreciando las paredes sólidas se expresa como:

$$H_n = \underbrace{[(H_s - H_{sr}) + (H_a - H_{ar})]}_{\text{Independientes de T}} - \underbrace{(H_{br} \pm H_c \pm H_e)}_{\text{Dependientes de T}} \quad (3.1)$$

donde H_n = Intercambio de calor neto a través de la superficie del agua

H_s = Radiación solar de onda corta

H_{sr} = Radiación reflejada de onda corta

H_a = Radiación atmosférica de onda larga

H_{ar} = Radiación reflejada de onda larga

H_{br} = Radiación de onda larga desde el agua

H_c = Calor transferido por conductividad

H_e = Calor transferido por evaporación

El primer grupo de la derecha en (3.1), es conocido con el nombre de radiación absorbida neta y es independiente de la temperatura del agua, por tanto puede ser medida o calculada a partir de las medidas meteorológicas observadas en ciertos puntos de control, mientras que, el segundo grupo sí depende de la variable temperatura.

3.2.1 Radiación absorbida neta

Las dos fuentes de radiación que varían la temperatura del agua provienen de la atmósfera y del sol. Puede ser calculada como una función de: la radiación extraterrestre (R_0), la cuál es atenuada por la transmisión atmosférica (a_t), nubosidad (a_c), sombra (c_s) y la reflexión (c_r) [21]:

$$H_s - H_{sr} = \Delta H = R_0 a_t a_c (1 - c_r)(1 - c_s) \quad (3.2)$$

Radiación extraterrestre (R_0). Se calcula como:

$$R_0 = \frac{\mathcal{W}_0}{2} \text{sen}\psi \quad (3.3)$$

donde \mathcal{W}_0 es una constante solar (1367 W/m^2), es el radio normalizado de la órbita de la tierra y ψ la altitud del sol [35].

Atenuación atmosférica (a_t). Existen diferentes métodos para estimar la fracción de atenuación atmosférica desde un cielo despejado [14, 108].

Nubosidad (a_c). Se calcula mediante la siguiente expresión:

$$a = C_1 - 0.65C_l^2 \quad (3.4)$$

donde C_l es la fracción del cielo cubierto con nubes.

Radiación atmosférica de onda larga: H_a y H_{ar} . La radiación atmosférica depende principalmente de la temperatura del aire y la humedad y se incrementa a medida que aumenta el contenido de humedad del aire. Esta radiación constituye la principal fuente térmica para un cuerpo de agua en la noche, días nublados y cálidos. Es función de muchas variables, en particular de las distribuciones de humedad, temperatura, dióxido de carbono y otros constituyentes atmosféricos.

Esta ganancia puede ser representada como una modificación de la ley de Stefan-Boltzmann.

$$H_a = \sigma_{SB}(T_a + 273)^4 (\mathcal{A}_{H_a} + 0.031\sqrt{e_a})(1 - R_L) \quad (3.5)$$

donde σ_{SB} = constante de Stefan-Boltzmann = 4.9×10^{-8} o 11.7×10^{-8}

T_a = temperatura del aire

e_a = presión de vapor del aire

\mathcal{A}_{Ha} = coeficiente que relaciona la T_a y la tasa de radiación solar medida
(rango entre 0.5 y 0.7)

R_L = coeficiente de reflexión (valor en torno a 0.03)

La presión de vapor de aire es equivalente a la presión de saturación correspondiente a la temperatura de punto de rocío T_d

$$e_a = 4.596e^{\frac{17.27T_d}{237.3+T_d}} \quad (3.6)$$

La radiación reflejada de onda larga generalmente es pequeña y su valor está alrededor de un 3 % de la radiación de onda larga entrante.

3.2.2 Parámetros dependientes de la temperatura

Este grupo de términos son dependientes de la variable temperatura del agua (T) que denotamos por ϕ_1 .

Radiación de onda larga desde el agua. Este fenómeno se puede describir de nuevo mediante la ley de Stefan-Boltzmann

$$H_{br} = \epsilon\sigma_{SB}(\phi_1 + 273)^4 \quad (3.7)$$

donde ϵ es la emisividad del agua (alrededor de 0.97) y ϕ_1 es la temperatura del agua superficial.

Conducción. La velocidad de transferencia de calor por conducción depende de las diferencias de temperatura que ocurren en la interfase aire-agua. Esta transferencia está condicionada por la velocidad del viento sobre el agua (U_w) y la temperatura del aire T_a .

$$H_c = c_1(19.0 + 0.95U_w^2)(\phi_1 - T_a) \quad (3.8)$$

donde c_1 es un coeficiente de proporcionalidad (coeficiente de Bowen) que depende de U_w . Su valor es aproximadamente $0.47 \text{ mmHg}^\circ\text{C}^{-1}$. Para la medición de U_w existe

instrumentación específica como los anemómetros de copa, que en general son más sensibles a bajas velocidades del viento. Se ha establecido como satisfactorio que la altura de referencia estándar sea de 7m por encima de la superficie del agua siempre y cuando el terreno local tenga poca influencia en las condiciones del viento.

Evaporación y condensación. La tasa de pérdida de calor por evaporación (H_e) se puede evaluar mediante la ley de Dalton:

$$H_e = c_1(19.0 + 0.95U_w^2)(e_s - e_a) \quad (3.9)$$

donde e_s presión de vapor de saturación. La diferencia $e_s - e_a$ puede expresarse como $\phi_1 - T_d$, donde T_d es la temperatura del punto de rocío del aire [36]. De allí que, si $\phi_1 > T_d$ el agua se evapora y H_e es positivo, caso contrario el agua se condensa sobre la superficie y por ende H_e es negativo.

La Figura 3.1 representa una combinación de los cinco procesos comentados anteriormente.

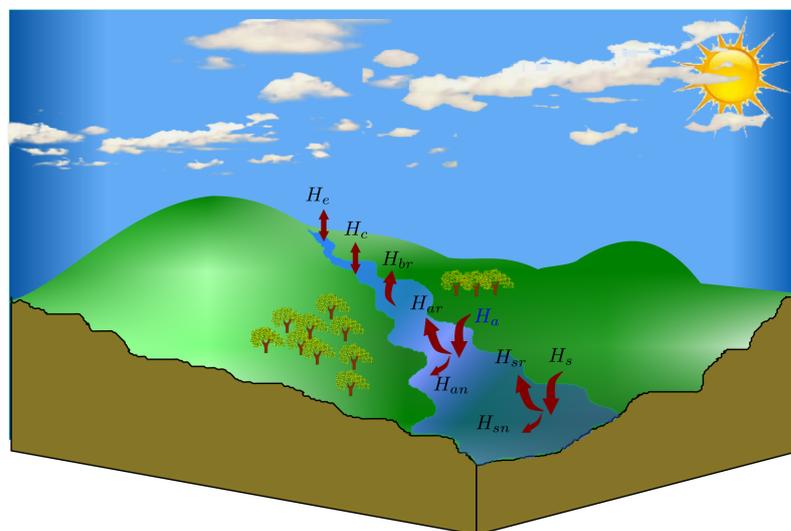


Figura 3.1: Procesos de intercambio de calor en la interfaz aire-agua en la superficie de una corriente

Se han desarrollado una variedad de aproximaciones para tratar esta interacción compleja de la temperatura del agua. En estas aproximaciones, el balance de calor ha sido sometido a simplificaciones e hipótesis razonables, con el fin de conseguir una solución apropiada del problema. Presentamos a continuación la formulación elegida en esta tesis.

3.2.3 Ecuación del balance de calor simplificada

Edinger [35] propuso que el intercambio de calor con la atmósfera se exprese como:

$$R_1 = \frac{\Delta H}{\rho C_p h} \quad (3.10)$$

$$\Delta H = K_h(T_e - \phi_1)$$

donde K_h es el coeficiente de intercambio neto general y T_e es la temperatura de equilibrio, que se podría alcanzar si todas las condiciones meteorológicas fueran constantes en el tiempo. Si K_h y T_e son conocidas, o pueden ser evaluadas de alguna manera, entonces se puede calcular la tasa de intercambio de calor de un cuerpo de agua con la atmósfera.

Para determinar K_h se requiere de parámetros tales como la temperatura del agua, velocidad del viento, presión de vapor saturada, etc. Por consiguiente, el resultado es una función compleja [35].

$$K_h = 4.5 + 0.035\phi_1 + \beta f_w(U_w) + 0.47f_w(U_w) \quad (3.11)$$

donde $f_w(U_w)$ es una función de la velocidad del viento:

$$f_w(U_w) = 9.2 + 0.46U_w^2 \quad (3.12)$$

β representa la influencia de la humedad y temperatura del aire. Para el cálculo de β se utiliza la expresión:

$$\beta = 0.35 + 0.015T_v + 0.0012T_v^2 \quad (3.13)$$

donde T_v es una temperatura promedio entre la temperatura del agua y la temperatura de rocío del aire:

$$T_v = \frac{\phi_1 + T_d}{2} \quad (3.14)$$

y T_d se define mediante la expresión

$$T_d = \frac{237.3(T_a^* + \ln(r_h))}{(17.27 - \ln(r_h) - T_a^*)} \quad (3.15)$$

siendo r_h la humedad relativa y T_a^* es temperatura del aire normalizada definida de la siguiente manera

$$T_a^* = \frac{17.27T_a}{237.3 + T_a} \quad (3.16)$$

De la misma manera T_e puede determinarse como:

$$T_e = T_d + \frac{\Delta H}{K_h} \quad (3.17)$$

Por tanto se han definido las variables K_h y T_e como un medio para estimar el intercambio de calor neto a través de la superficie.

Caso 9. | Caso test de distribución de temperatura en flujo estacionario con múltiples fuentes.

Consideramos un caso de estudio simplificado como paso previo a la simulación realista de un curso fluvial con calidad de agua. Las características del caso son muy similares a los procesos que se dan en la realidad, ayudándonos a validar tanto la formulación empírica utilizada para este proceso como el esquema numérico elegido en este trabajo.

Se trata de un canal trapezoidal de longitud 110 km como el representado en la figura 3.2 [23]. Presenta dos pendientes longitudinales a lo largo del dominio: $S_0 = 0.0002$ desde $x=0$ km hasta $x=50$ km y $S_0 = 0.00018$ desde $x=50$ km en adelante. Además la sección tiene un pendiente lateral $S_L = 2$ y una anchura en la base $B=10$ m. La rugosidad se caracteriza con un coeficiente de Manning $n=0.035$.

Se simula la convergencia resolviendo las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y temperatura del agua a partir de las condiciones iniciales $A(x, 0) = 14.71 \text{ m}^2$, $Q(x, 0) = 5.787 \text{ m}^3/\text{s}$, $\phi_1(x, 0) = 20 \text{ }^\circ\text{C}$. El cálculo se completa con las condiciones de contorno aguas arriba de caudal constante $Q(0, T) = 5.787 \text{ m}^3/\text{s}$, y temperatura constante $\phi_1(0, T) = 20 \text{ }^\circ\text{C}$. Aguas abajo se establecen condiciones de flujo libre. Además, existen dos descargas puntuales ubicadas en $x_1=10$ km y $x_2=50$ km respectivamente. La primera descarga es un vertido proveniente de una planta de tratamiento de aguas residuales con un caudal $Q_1=0.463 \text{ m}^3/\text{s}$ a una temperatura de $T_1=28 \text{ }^\circ\text{C}$. La segunda descarga es un afluente que tiene un caudal $Q_2=1.157 \text{ m}^3/\text{s}$ a una temperatura de $T_2=15 \text{ }^\circ\text{C}$. Con estos valores la simulación progresa hasta converger al estado estacionario.

El objetivo de este caso es, una vez alcanzado el estado estacionario, observar el efecto producido por las descargas puntuales ubicadas a los 10 y 50 km, además de los aportes ambientales que se dan en su entorno sobre el perfil longitudinal de la temperatura del agua. Siguiendo las indicaciones de [23] las variables meteorológicas

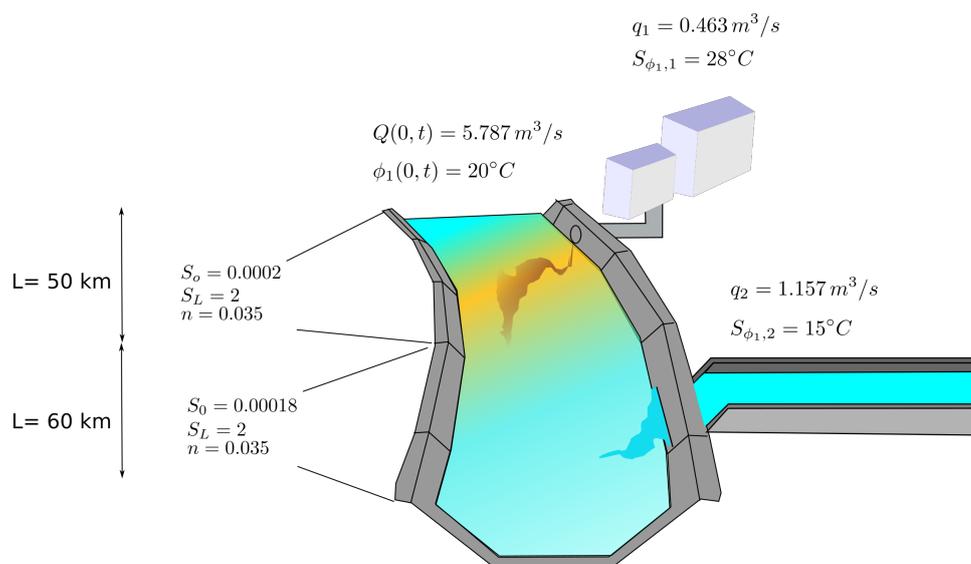


Figura 3.2: Esquema del canal trapezoidal para el balance de la temperatura. Caso 9

afectan a partir de $x = 10$ km en este caso test y su información viene dada en la Tabla 3.2

Variable	Valor
H_s	$300 \text{ cal cm}^{-2}\text{d}^{-1}$
T_a	$25 \text{ }^\circ\text{C}$
U_w	3 ms^{-1}
h_r	60%

Tabla 3.2: Variables meteorológicas para el balance de calor (Caso 9)

El resultado después de cinco días de simulación se presenta en la Figura 3.3. Tanto el aporte lateral (planta de tratamiento) como las variables meteorológicas incrementan la temperatura del agua de forma acelerada durante los primeros 50 km. Esta situación podría mantenerse si no existiera el otro aporte lateral que hace de regulador en el canal principal. Este escenario se puede asemejar a la típica estación de verano en donde la temperatura ambiente llega a alcanzar valores por encima de los $25 \text{ }^\circ\text{C}$ en algunas ciudades y, por tanto, podría llegar a ser perjudicial.

El otro aspecto a destacar de este caso es que el modelo con el esquema propuesto es robusto y confiable, ya que los resultados son similares a los obtenidos en [23] con el modelo QUAL2E. Esto quiere decir que tanto los balances en los diferentes puntos como el intercambio de calor neto se formulan correctamente con la herramienta unidimensional presentada.

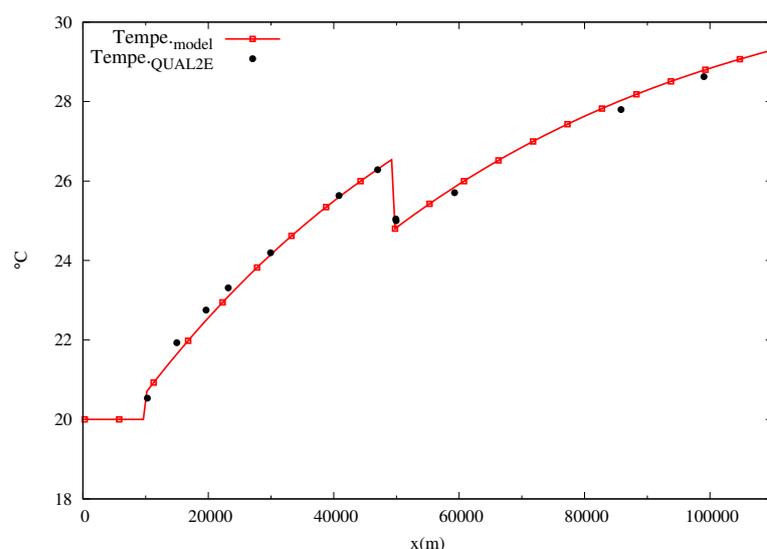


Figura 3.3: Comparaciones de los perfiles longitudinales de la temperatura del agua en un canal prismático entre el modelo propuesto (línea roja) y QUAL2E (puntos negros). Caso 9

3.3 Modelo de transporte de OD-DBO-C

Para conocer la capacidad de un río para recibir y oxidar aguas residuales se requiere conocer su recurso de oxígeno disponible. Esto se consigue formulando un balance entre dos procesos fundamentales: la descomposición de materia orgánica y la aireación de oxígeno. Las dos reacciones opuestas, la desoxigenación y la re-aireación, tienden siempre a llegar a una condición de equilibrio temporal. Este equilibrio, sin embargo, es momentáneo ya que la disminución de la demanda de oxígeno de la materia orgánica resultante de su propia oxidación hace que la tasa de agotamiento sea menor y permita la recuperación gradual del oxígeno disuelto hasta su valor de saturación total. La formulación pionera que relaciona estas interacciones complejas fue desarrollada en [91].

Modelo de Streeter-Phelps. Esta formulación vincula dos mecanismos principales que gobiernan el OD en una corriente que recibe aguas residuales, descomposición de la materia orgánica y reaeración [23]. Esto quiere decir, que el modelo predice el efecto tanto de una fuente puntual como no puntual sobre el OD en el flujo. Las expresiones tanto para el oxígeno como para la materia orgánica se expresa como:

$$\begin{aligned}
 R_2 &= -k_d \theta_D^{T-20} \left(\frac{\phi_6}{k_{DBO} + \phi_6} \right) \phi_2 - \frac{v_{S8}(1-f_{d2})}{h} \phi_2 \\
 R_6 &= -k_d \phi_2 + k_a (\phi_{sat} - \phi_6)
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

siendo ϕ_2 = concentración de DBO-C
 ϕ_6 = concentración de OD
 k_a = velocidad de reaeración
 ϕ_{sat} = concentración de oxígeno de saturación
 k_d = velocidad de des-oxigenación

Oxígeno disuelto (OD). Se refiere a la cantidad de oxígeno que está disuelto en el agua. Este indicador es uno de los parámetros más importantes en materia de calidad del agua debido a la actividad bioquímica en el agua. La producción de oxígeno está relacionada con la fotosíntesis y el intercambio con la atmósfera por difusión o mezcla turbulenta, mientras que su consumo dependerá de la respiración, descomposición de sustancias orgánicas y otras reacciones químicas que se estudiarán en estas secciones.

Una clasificación según su concentración y las consecuencias que pueden producir esta caída de OD se presenta en la Tabla 3.3

Concentración g/m ³	Estado	Efecto
0	Anoxia	Muerte de peces, especialmente larvas
0-5	Hipoxia	Desaparición de organismos especialmente de especies sensibles
5-8	Aceptable	Condición adecuada para la
8-12	Buena	mayoría de organismos aerobios

Tabla 3.3: Rangos de concentración de OD

Al mismo tiempo, el OD es dependiente de la temperatura. Aguas con mayor temperatura son capaces de disolver menores cantidades de oxígeno porque se genera un aumento en las velocidades metabólicas de la vida acuática y por tanto un mayor consumo de OD. Por esto, una descarga de agua caliente al curso de agua principal puede significar la disminución del OD a niveles por debajo del límite necesario para algunas formas de vida.

Una clasificación adicional del estado de una masa de agua viene determinada por el peor valor de su estado químico y ecológico en el contexto de la Directiva Marco del Agua (DMA). La caracterización del estado ecológico de cada masa de agua viene representado con un código de colores para reflejar la clasificación del estado ecológico (Tabla 3.4).

Con el objeto de reflejar la clasificación del estado químico de la masa de agua la

Clasificación del estado ecológico	Código de colores
Muy bueno	Azul
Bueno	Verde
Aceptable	Amarillo
Deficiente	Naranja
Malo	Rojo

Tabla 3.4: Clasificación del estado ecológico para aguas superficiales según DMA

DMA propone un código de colores para cada demarcación hidrográfica (véase Tabla 3.5).

Clasificación del estado químico	Código de colores
Bueno	Azul
No alcanza el buen estado	rojo

Tabla 3.5: Clasificación del estado químico para aguas superficiales según DMA

3.3.1 Modelo de Streeter-Phelps DBO-OD modificado

El balance de OD se resuelve mediante las ecuaciones de Streeter-Phelps DBO-OD ligeramente modificadas. El modelo cinético para el OD se expresa como:

$$R_6 = k_a \theta_a^{T20} (\phi_{sat} - \phi_6) - k_d \theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{DBO} + \phi_6} \right) \phi_2 - \frac{D_{OS}}{h} \theta_s^{T20} \quad (3.19)$$

Mientras que, el modelo cinético de la demanda bioquímica de oxígeno se define como:

$$R_2 = -k_d \theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{DBO} + \phi_6} \right) \phi_2 - \frac{v_{SS}(1 - f_{d2})}{h} \phi_2 \quad (3.20)$$

siendo ϕ_2 = concentración de DBO-C

ϕ_6 = concentración de OD

k_a = velocidad de reaeración

ϕ_{sat} = concentración de oxígeno de saturación

k_d = velocidad de des-oxigenación

k_{BOD} = constante media de saturación para la limitación de oxígeno para DBO-C

D_{OS} = demanda de oxígeno desde el sedimento

v_{S8} = velocidad de sedimentación

f_{d2} = fracción disuelta de DBO-C

En la ecuación (3.19), el primer término representa la transferencia de OD al agua mediante la interfaz aire-agua, mientras que los dos siguientes son sumideros debidos a la oxidación de la materia carbonosa y la D_{OS} . En esta expresión se asume que la velocidad de re-aireación es proporcional a la diferencia entre la concentración de saturación y la concentración de OD. Es conveniente mencionar que en cualquiera de los procesos considerado p la velocidad de reacción k_p es función de la temperatura. La relación empírica que relaciona esta dependencia se escribe en general como:

$$k_p = k_{p20} \theta_p^{\phi_1 - 20} \quad (3.21)$$

donde k_p es la velocidad de degradación, k_{p20} es la velocidad de degradación de dicho proceso a 20°C y θ_p es un factor de corrección de temperatura específico para ese proceso. Por claridad el término $\phi_1 - 20$ se denota $T20$ de ahora en adelante.

Velocidad de reaireación. Hay tres formulas comúnmente usadas para calcular la reaireación de una corriente: O'Connor-Dobbins O'Connor and Dobbins [86], Churchill Churchill et al. [26], y Owens-Gibbs. Las tres aproximan la velocidad de renovación en función del cociente entre la velocidad y la profundidad promedio del flujo.

$$k_a = C_a \frac{u^{m_a}}{h^{n_a}} \quad (3.22)$$

La tabla 3.6 contiene los valores específicos de cada formulación. En este trabajo se aplicó la formulación de O'Connor and Dobbins [86],

Autor	C_a	m_a	n_a
O'Connor-Dobbins	3.93	0.5	1.5
Churchill	5.026	1	1.67
Owens-Gibbs	5.32	0.67	1.85

Tabla 3.6: Coeficientes y exponentes en las leyes de aireación

Oxígeno de saturación. Desde el punto de vista de calidad, ϕ_{sat} puede ser afectado por la temperatura, salinidad y por las variaciones de presión atmosférica. La expresión

ajustada a una curva polinomial de segundo orden en función de la temperatura puede expresarse como [23]:

$$\phi_{sat} = 0.0035\phi_1^2 - 0.3369\phi_1 + 14.407 \quad (3.23)$$

Variable $i \rightarrow$ Process $j \downarrow$	ϕ_2 DBO - C	ϕ_6 OD	Proceso
1. Re-aireación		1	$k_a\theta_2^{T20}(\phi_{sat} - \phi_6)$
2. Desoxigenación	-1	-1	$k_d\theta_D^T \left(\frac{\phi_6}{k_{BOD} + \phi_6} \right) \phi_2$
3. Sedimentación	-1		$\frac{v_{ss}(1-fd_2)}{h} \phi_2$
4. D_{OS}		-1	$\frac{D_{OS}}{h} \theta_s^{T20}$

Tabla 3.7: Matriz de procesos de Petersen con las variables de estado OD y DBO-C

Con los procesos cinéticos definidos se crea la matriz comentada al principio del capítulo. La matriz con las dos variables de estado se define como la Tabla 3.7.

Caso 10. Caso test de distribución del OD en flujo estacionario con fuentes puntuales a temperatura constante.

Tomando como referencia el Caso 9 de la subsección (3.2.3) verificaremos el modelo de Streeter-Phelps modificado. El ejemplo contempla en este caso dos fuentes puntuales, con descargas de DBO-C y OD a temperatura constante tanto en los vertidos como en el cauce principal (véase Figura 3.4). Las condiciones iniciales y de contorno de las variables hidráulicas son las mismas del Caso 9. Las condiciones iniciales de concentración de OD y DBO-C son $\phi_6(x, 0) = 7.5 \text{g/m}^3$ y $\phi_2(x, 0) = 2.0 \text{g/m}^3$ respectivamente. Se realizó la simulación hasta alcanzar el estado estacionario usando las condiciones de contorno aguas arriba $\phi_6(0, t) = 7.5 \text{g/m}^3$ y $\phi_2(0, t) = 2.0 \text{g/m}^3$. Además, las concentraciones de las descargas de la primera y segunda fuente en los puntos establecidos para el OD fue de $\phi_6(10000, t) = 2.0 \text{g/m}^3$ y $\phi_2(10000, t) = 200 \text{g/m}^3$, $\phi_6(50000, t) = 9.0 \text{g/m}^3$ y $\phi_2(50000, t) = 5.0 \text{g/m}^3$.

Las velocidades de reacción y sedimentación de la materia orgánica son de 0.5 y 0.25 d^{-1} a 25 °C. Para el proceso de D_{OS} se utilizó un valor de 5 $\text{g/m}^2\text{d}$, mientras que la re-aireación se calculó mediante (3.22).

La Figura 3.5 muestra la comparación de las distribuciones longitudinales de las concentraciones DBO-C y OD con la salida del modelo QUAL2E. Analizando el efecto

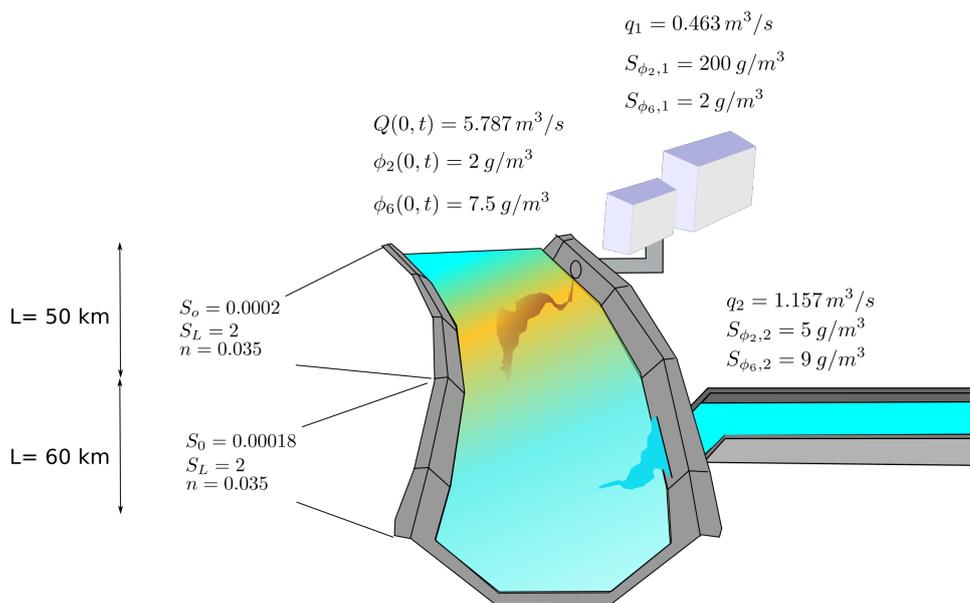


Figura 3.4: Esquema de la sección del canal trapezoidal con vertidos de DBO-C y OD. Caso 10

producido por la primera descarga de materia orgánica sobre el OD se observa que las condiciones del agua en el cauce no son aptas para recibir tan altas concentraciones de materia orgánica. Aproximadamente 40 km aguas abajo de la fuente puntual 1 existe un estado de hipoxia, que produciría efectos perjudiciales sobre los organismos acuáticos más sensibles.

Desde el punto de vista numérico, el esquema utilizado representa y predice acertadamente las variables que entran en juego en esta configuración.

Caso 11. Distribución de OD en flujo estacionario con temperatura variable

En este caso test vamos a combinar la variabilidad de la temperatura del aire y la información de la temperatura de las descargas del Caso 9 con los datos de los vertidos del Caso 10 para evaluar qué cambios se producen en los perfiles longitudinales de las variables ϕ_2 y ϕ_6 en el estado estacionario.

Al incluir la temperatura todas las velocidades de reacción se modifican. En particular, esto provoca un mayor consumo de OD en los procesos. El efecto comentado se muestra en la Figura 3.6, donde la caída de OD alcanza un valor mínimo de 2.75 g/m³ aproximadamente. Si este valor lo comparamos con la caída de la Figura 3.5 (4.33 g/m³), se deduce, que incluir la temperatura con todos sus términos fuentes al modelo permite predecir de mejor manera las distribuciones de concentración de todas

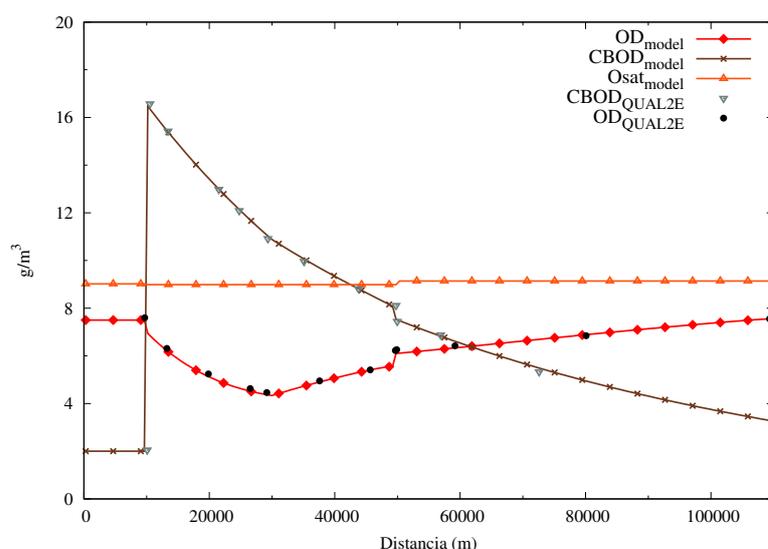


Figura 3.5: Comparación de los perfiles longitudinales (DBO-C y OD) de QUAL2E con el modelo propuesto. Caso 10

las demás sustancias involucradas.

3.4 Modelo de Nitrificación

En esta sección se analizan los procesos de transformación del nitrógeno y el impacto sobre los niveles de OD (nitrificación). Principalmente los procesos se desencadenan debido a las operaciones agrícolas que llegan a los ríos por escurrimiento. Los fertilizantes aplicados a los cultivos contienen grandes cantidades de nitrógeno que, en contacto con el agua, se diluyen y son transportados, generando efectos negativos sobre el estado trófico y la calidad de las aguas receptoras.

Efecto del nitrógeno sobre la calidad del agua

La Figura 3.7 representa un esquema de los eventos de amonificación, nitrificación y desnitrificación que se producen en el agua.

- *Amonificación.* La amonificación es la conversión a ión amonio del nitrógeno. En el agua, los seres acuáticos producen directamente amoníaco (NH_3) que en disolución se convierte en ión amonio (NH_4^+). La forma no iónica debe tener un control riguroso porque, en altas concentraciones, puede ser perjudicial para los organismos acuáticos. La segunda forma es inocua en niveles registrados en la mayoría de las aguas superficiales. El equilibrio entre estas dos formas es gobernado por el pH; por tanto la cantidad de NH_3 que se convierte en NH_4^+ depende de la temperatura y el nivel de pH del agua.

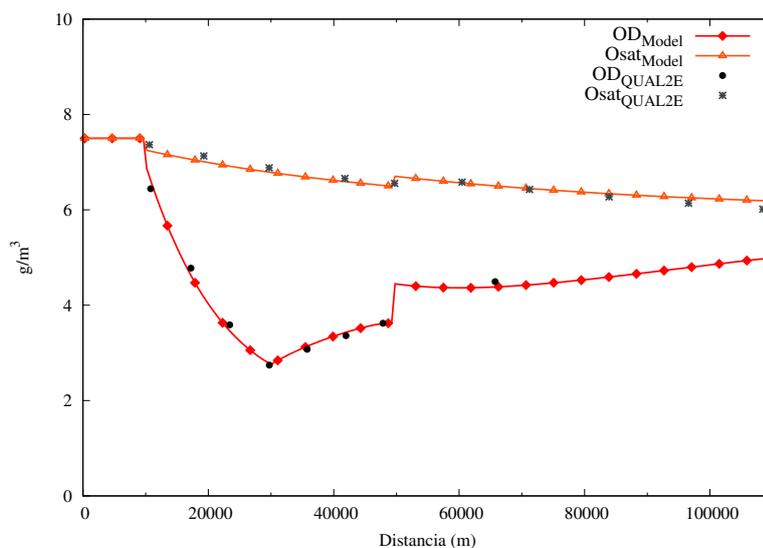


Figura 3.6: Comparación de los perfiles longitudinales (OD y O_{sat}) de QUAL2E con el modelo propuestos. Caso 11

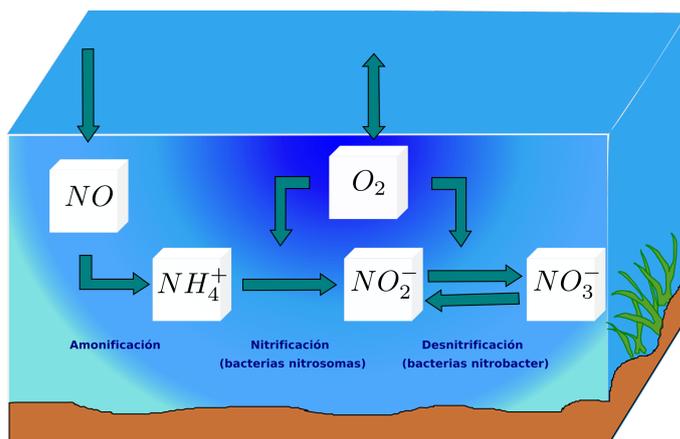


Figura 3.7: Ciclo del nitrógeno en aguas naturales

Las representaciones con velocidades de reacción de primer orden tanto para el NO como para $NH_4 - N$ son:

$$R_3 = -K_{34}\theta_{34}^{T_{20}}\phi_3 - \frac{v_{S8}(1 - f_{D3})}{h}\phi_3 \quad (3.24)$$

$$R_4 = K_{34}\theta_{34}^{T_{20}}\phi_3 - K_{45}\theta_{45}^{T_{20}}\phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) \quad (3.25)$$

donde ϕ_3 denota el nitrógeno orgánico (NO), K_{34} la velocidad de mineralización del NO, θ_{34} y θ_{45} coeficientes de corrección de temperatura, f_{D3} fracción disuelta de NO, ϕ_4 es la concentración de amonio (NH_4), K_{NIT} saturación media para la limitación de oxígeno (O_2) en la nitrificación y K_{45} velocidad de nitrificación.

En la ecuación (3.24) los sumideros para el NO son la velocidad de mineralización y de sedimentación. Sin embargo en la ecuación (3.25) el incremento se debe a la mineralización del NO y su reducción a la nitrificación.

- *Nitrificación.* La transformación del NH_4^+ a nitrito (NO_2^-) por medio de las bacterias nitrosomas se denomina nitrificación. Esta evolución solo puede producirse bajo condiciones aeróbicas generando cantidades de NO_2^- usualmente muy pequeñas e inestables comparadas con la concentración de nitrato (NO_3^-). El mecanismo de nitrificación en aguas naturales es complejo por la dependencia que existe entre el OD, pH, carbón inorgánico total (CIT), alcalinidad, bacterias nitrobacter, nitrosomas y condiciones del flujo.

En modelos de calidad de agua el NO_3^- se usa frecuentemente para representar tanto el NO_3^- como el NO_2^- . El proceso de oxidación del NO_2^- a NO_3^- por medio de bacterias nitrobacter es generalmente más rápido que la conversión de amonio a nitrito. Esto refleja el hecho de que aproximadamente tres veces la cantidad de sustrato se consume en el segundo paso, para derivar la misma cantidad de energía.

- *Desnitrificación.* Este proceso puede llevarse a cabo tanto por bacterias heterótrofas como autótrofas. Estas bacterias toman el nitrato o nitrito como aceptor terminal de electrones en condiciones anaeróbicas hasta reducirlo a nitrógeno molecular. El proceso de desnitrificación depende de la temperatura, OD, etc.; así, la ecuación cinética que representa los cambios de concentración del NO_3^- puede expresarse como:

$$R_5 = K_{45}\theta_{45}^{T-20}\phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) - K_{5D}\theta_{5D}^{T-20}\phi_5 \left(\frac{K_{\text{NO}_3}}{K_{\text{NO}_3} + \phi_6} \right) \quad (3.26)$$

siendo ϕ_5 concentración de nitrato, K_{5D} velocidad de desnitrificación a 20°C, y K_{NO_3} saturación media para la limitación de O_2 en la desnitrificación.

El control de la concentración de nitratos se debe a su efecto tóxico sobre la salud. Bajo ciertas condiciones de pH, en el intestino, estómago y en la saliva humana los nitratos se convierten a nitritos provocando un exceso de metahemoglobina en la sangre. Por tanto, existen normas estrictas que rigen la cantidad de nitrato en el agua potable.

La matriz de procesos para el ciclo del nitrógeno se muestra en la Tabla 3.8

Caso 12. **Distribución de las componentes del ciclo del nitrógeno con un vertido puntual a temperatura constante.**

En este ejemplo experimental propuesto por [121] se analiza la evolución de las con-

Variable $i \rightarrow$	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5	ϕ_6	Proceso
Process $j \downarrow$	DBO – C	NO	NH ₄ – N	NO ₃	OD	
1. Re-aireación					1	$k_a \theta_2^{T20} (\phi_{sat} - \phi_6)$
2. Desoxigenación	-1				1	$k_d \theta_D^T \left(\frac{\phi_6}{k_{BOD} + \phi_6} \right) \phi_2$
3. Sedimentación	-1					$\frac{v_{s8}(1-f_{d2})}{h} \phi_2$
4. D_{OS}					1	$\frac{D_{OS}}{h} \theta_s^{T20}$
5. Mineralización NO		-1	1			$K_{34} \theta_{34}^{T20} \phi_3$
6. Sedimentación NO		-1				$\frac{v_{s8}(1-f_{d3})}{h}$
7. Nitrificación		-1	1		$-\frac{64}{14}$	$K_{45} \theta_{45}^{T20} \phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right)$
8. Desnitrificación	$-\frac{5}{4} \frac{32}{14}$			-1		$K_{5D} \theta_{5D}^{T20} \phi_5 \left(\frac{K_{NO_3}}{K_{NO_3} + \phi_6} \right)$

Tabla 3.8: Matriz de procesos de Petersen del ciclo del nitrógeno

centraciones DBO₅, NH₃ – N, NO₃ – N, OD tras la descarga puntual de una planta de tratamiento de aguas residuales a lo largo de un canal rectangular de anchura $B=5\text{m}$. La Figura 3.8 resume los procesos que intervienen en este ejemplo. El canal tiene una longitud $L=50\text{km}$ con una pendiente longitudinal $S_0=0.0001$. Para este problema se utilizó un coeficiente de Manning $n=0.1$ con el fin satisfacer los calados y velocidades dadas por [121]. Las condiciones iniciales para las variables hidráulicas fueron $Q(x,0)=2.832\text{m}^3/\text{s}$, $A(x,0)=9.65\text{m}^2$. Las condiciones iniciales de las concentraciones de DBO-C, OD, NH₃ – N y NO₃ – N fueron $\phi_2(x,0) = 2.0\text{g}/\text{m}^3$, $\phi_6(x,0) = 8.3\text{g}/\text{m}^3$, $\phi_4(x,0) = 0.2\text{g}/\text{m}^3$ y $\phi_5(x,0) = 0.5\text{g}/\text{m}^3$, respectivamente.

Con respecto a las condiciones de contorno, se impuso el caudal inicial y las concentraciones iniciales de DBO-C, OD, NH₃ – N y NO₃ – N en el extremo aguas arriba. La condición aguas abajo se supuso libre. Además se supone que existe una fuente puntual situada en $x=1720\text{m}$ donde se descarga un caudal de $Q_L=0.0328\text{m}^3/\text{s}$ con unas concentraciones $\phi_2(1720,t) = 80.0\text{g}/\text{m}^3$, $\phi_6(1720,t) = 8.5\text{g}/\text{m}^3$, $\phi_4(1720,t) = 15.0\text{g}/\text{m}^3$ y $\phi_5(1720,t) = 0.5\text{g}/\text{m}^3$. Los coeficientes cinéticos de degradación de la materia orgánica y nitrificación utilizados este caso fueron de 0.3 y 0.15d^{-1} respectivamente. Con estas condiciones se simuló hasta alcanzar el estado estacionario.

Los resultados numéricos obtenidos para el perfil de las variables DBO – C, OD, NH₃ – N y NO₃ – N a lo largo del canal cuando se ha alcanzado el estado estacionario. Con $CFL=1$ y $\Delta x = 205\text{m}$ se presentan en la Figura 3.9.

Es importante señalar que los datos numéricos de concentración CBOD-C obtenidos a partir de su ecuación de transporte no son directamente comparables con los datos

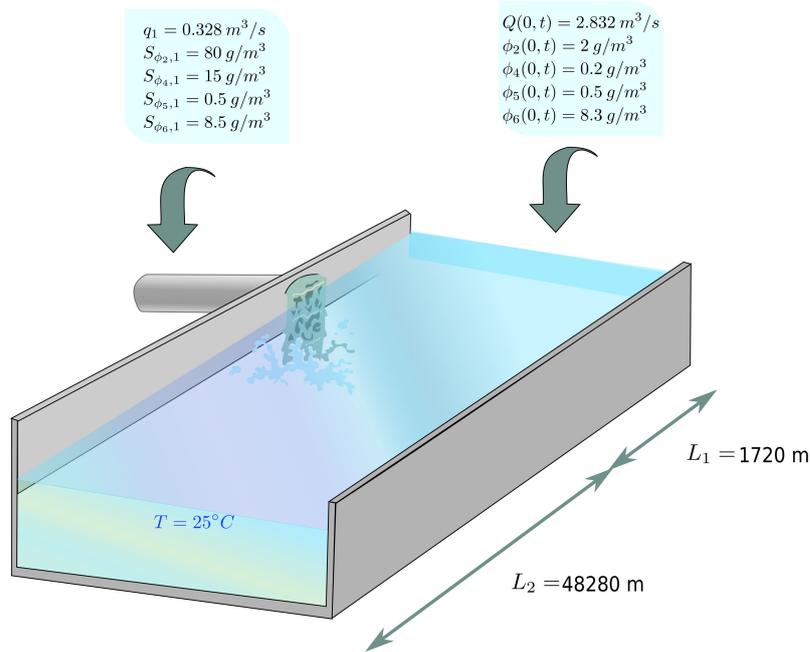


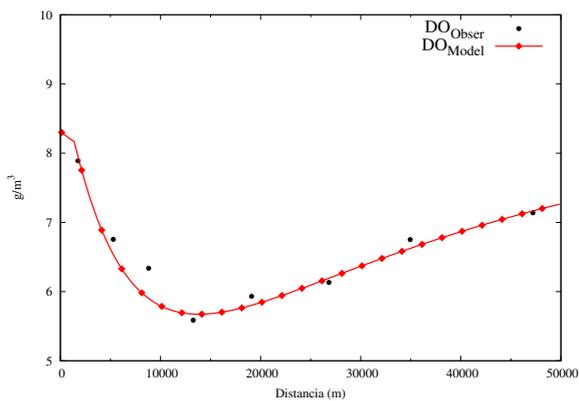
Figura 3.8: Tramo del canal que recibe una descarga de una planta de tratamiento de aguas residuales. Caso 12

experimentales medidos en laboratorio DBO_5 [22]. La expresión que permite relacionar los datos de laboratorio con la DBO-C se expresa como:

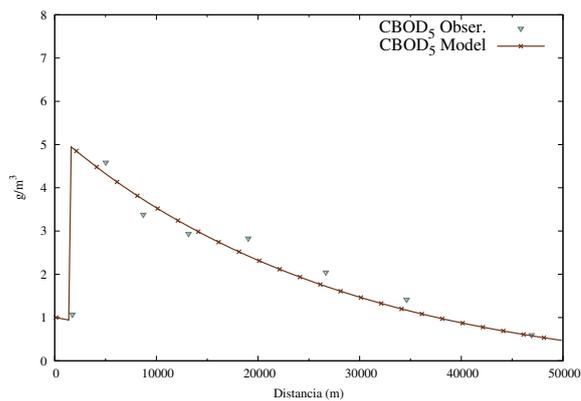
$$DBO_5 = \phi_2(1 - e^{5k_{dbot}}) \quad (3.27)$$

donde k_{dbot} es el coeficiente de velocidad de desoxigenación (laboratorio).

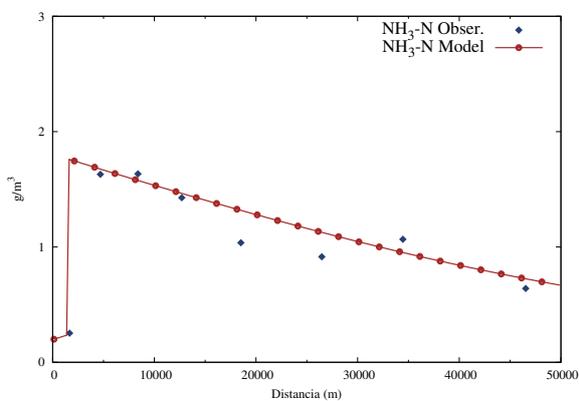
Las distribuciones de los perfiles de las medidas observadas y las del modelo corregidas usando (3.27) son muy similares entre sí. Una caída significativa durante los primeros metros se puede notar en la concentración de OD a causa de los altos niveles de descarga de DBO-C (Figura 3.9 a), conforme se avanza aguas abajo, la concentración del OD llega a recuperarse hasta un valor aproximadamente de 7.3 g/m^3 . Con relación a las distribuciones tanto de la DBO-C como del $\text{NO}_3 - \text{N}$ los resultados son muy cercanos a los medidos. Por último, la dinámica del perfil longitudinal del amonio calculado frente a los valores medidos también mantienen estrecha relación verificándose de esta forma la predicción del modelo de nitrificación cuando existen vertidos laterales.



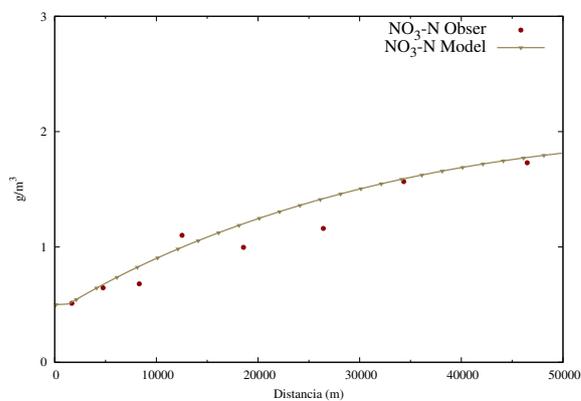
(a) Perfil longitudinal del OD (Observado vs Modelo)



(b) Perfil longitudinal del DBO₅ (Observado vs Modelo)



(c) Perfil longitudinal del NH₃ – N (Observado vs Modelo)



(d) Perfil longitudinal del NO₃ – N (Observado vs Modelo)

Figura 3.9: Ciclo del nitrógeno: Comparación de los perfiles longitudinales observados con la salida del modelo propuesto. Caso 12

3.5 Modelo matemático simplificado que describe la interacción predador-presa

Para describir esta interacción se formula las ecuaciones de Lotka-Volterra.

Ecuaciones de Lotka-Volterra. Es un modelo biomatemático que pretende predecir la dinámica de las poblaciones de fitoplancton (presa) y depredador (zooplancton) bajo ciertas hipótesis:

- El ecosistema está aislado, es decir, no hay migración, no hay otras especies.
- El crecimiento de la presa es exponencial en ausencia de depredadores.
- La muerte de predadores es exponencial, si no hay crecimiento de presas.

Bajo ciertas condiciones constantes de temperatura y velocidad de crecimiento neto de fitoplancton se puede definir las ecuaciones simplificadas de fitoplancton-zooplancton:

$$R_9 = (K_{4C} - K_{4R})\phi_9 - C_{gz}\phi_{10}\phi_9 \tag{3.28}$$

$$R_{10} = (a_{ca}f_{ep}C_{gz})\phi_{10}\phi_9 - K_{dz}\phi_{10} \tag{3.29}$$

siendo ϕ_9 = concentración de fitoplancton

ϕ_{10} = concentración de zooplancton

K_{4C} = velocidad de máximo crecimiento del fitoplancton a 20°C

K_{4R} = velocidad de respiración del fitoplancton a 20°C

C_{gz} = velocidad de captura del zooplancton

a_{ca} = tasa de carbono a clorofila a en la biomasa de fitoplancton

f_{ep} = factor de eficiencia de captura

K_{dz} = velocidad de pérdida por respiración, excreción y muerte

Para modelar la interacción simplificada de nutrientes y la cadena alimentaria es conveniente integrar un nutriente limitante en el esquema fitoplancton-zooplancton. Esta expresión se determina como:

$$R_8 = a_{pa}(1 - f_{ep})C_{gz}\phi_{10}\phi_9 + a_{PC}K_{rz}\phi_{10} - a_{pa}(K_{4C} - K_{4R})\phi_9 \tag{3.30}$$

donde ϕ_8 fósforo inorgánico, a_{pa} velocidad de generación del fósforo, a_{PC} relación fósforo a carbono y K_{rz} velocidad de pérdida sin predación.

Caso 13. | Dinámica del fitoplancton y zooplancton con un nutriente.

Se considera un caso test que incluya la dinámica del fitoplancton, zooplancton y fósforo en un sistema agregado dependiente del tiempo las características se resumen en la Tabla 3.9. Las concentraciones dadas son las condiciones iniciales de la interacción presa-depredador con un nutriente. Este proceso actúa sin ninguna alimentación por la entrada. En este caso la discretización espacial no es relevante. Nótese que las distribuciones del fitoplancton, zooplancton y nutriente forman un patrón cíclico durante el tiempo de simulación (véase Figura 3.10).

Variable	Valor
ϕ_8	20 $\mu\text{gP/L}$
ϕ_9	1.0 mgChla/m^3
ϕ_{10}	0.05 gC/m^3
a_{ca}	0.04 gC/mgChl
C_{gz}	1.5 m^3/gCd
$K_{4C} - K_{4R}$	0.3 d^{-1}
a_{pa}	1.0 mgP/mgChl
f_{ep}	0.6
K_{dz}	0.1 d^{-1}

Tabla 3.9: Datos para representar la interacción predador-presa con un nutriente limitante. Caso 13

Con suficiente cantidad de nutriente (concentración mínima de 6.08 $\mu\text{gP/L}$), y debido a que la población de zooplancton es pequeña, el crecimiento de fitoplancton es exponencial. Aproximadamente a los 10 días las plantas llegan a alcanzar su máximo crecimiento (11.16 mgChla/m^3), permitiendo que la población de zooplancton también aumente. Consecuentemente este incremento causa que las plantas disminuyan hasta 0.305 mgChla/m^3 (aproximadamente a los 40 días). Esta disminución provoca que la población de zooplancton disminuya durante 20 días hasta que nuevamente las plantas se recuperen, promoviendo a que un nuevo ciclo se repita. Una consideración adicional está en el efecto de C_{gz} , que provoca una disminución complementaria en el crecimiento de las plantas.

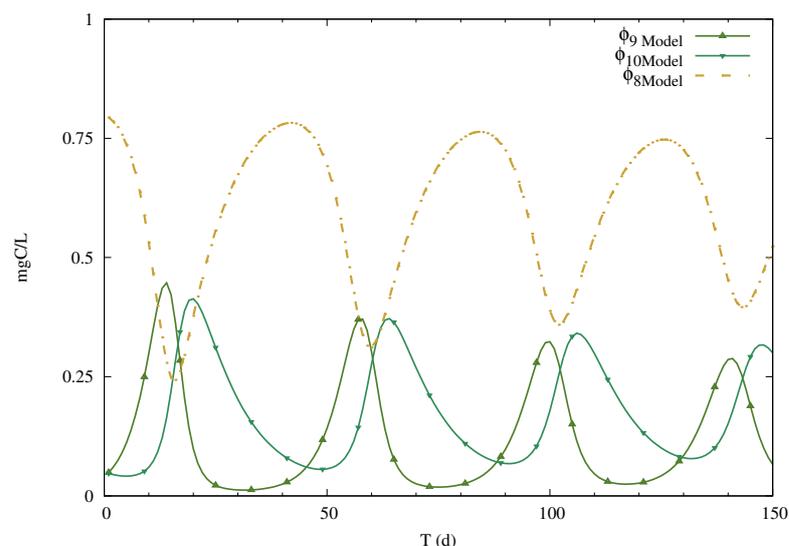


Figura 3.10: Modelo presa-predador con un nutriente en un ejemplo agrupado. Caso 13

3.6 Modelo de la eutrofización

Un ecosistema eutrofizado se caracteriza por una abundancia anormalmente alta de nutrientes (nitrógeno y fósforo) producto de actividades humanas o naturales. Estos ambientes ricos en nutrientes provocan un crecimiento descontrolado en la biomasa de las algas provocando un empobrecimiento de la calidad del agua.

La sobre-abundancia de nutrientes producto de la excesiva fertilización de campos restringe los usos potables, recreativos y ecológicos de las fuentes de agua. Una clasificación de las fuentes de agua según su estado trófico puede ser:

- *Oligotrófico*. Caracterizado por una débil fertilización.
- *Mesotrófico*: Moderada fertilización.
- *Eutrófico*: Bien fertilizado.
- *Hipertrófico*: Sobre-fertilizado.

En la Figura 3.11 se presenta un esquema de cómo se producen las interacciones entre los nutrientes y la biomasa de algas en ecosistemas naturales sobre la concentración de OD. Además se observa cómo el crecimiento de las algas (ϕ_9) depende del fosfato o fósforo inorgánico (ϕ_8), amonio y nitrato como nutrientes limitantes aunque, en la realidad, existen otras condiciones que limitan este desarrollo. Si por cualquier motivo estos dos nutrientes están ausentes, el crecimiento de algas no existe, independientemente de la abundancia del otro nutriente.

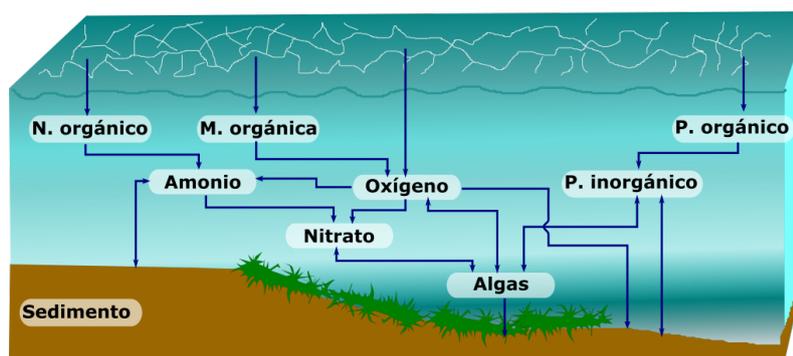


Figura 3.11: Ciclo del N, P e interacciones de las algas con el OD en aguas naturales

El propósito de esta revisión es enfatizar qué ecuaciones se integran en nuestro modelo de eutrofización y, a su vez, conocer la complejidad de contemplar todos estos mecanismos presentes en el agua.

3.6.1 Modelo matemático de las algas: fitoplancton

Las plantas consideradas son el colectivo de organismos que están adaptados para pasar parte o la totalidad de sus vidas en aparente suspensión en aguas abiertas del mar, de lagos, lagunas y ríos [106]. Estas plantas contribuyen con la mayor parte del carbono orgánico disponible para las redes alimenticias pelágicas. Por tanto, debe considerarse un modelo dinámico de población de fitoplancton.

Siguiendo a Di Toro et al. [29], el modelo considerado se desarrolla sobre la base de tres sistemas dependientes primarios: la población del fitoplancton, la población herbívora de zooplancton y el sistema nutriente. Además, estos tres sistemas no sólo se ven afectados por sus interacciones, sino también por las variables ambientales externas. Las tres variables analizadas en este estudio son:

- La temperatura, que influye en todas las reacciones biológicas y químicas.
- La dispersión y el flujo advectivo, que son los principales mecanismos de transporte de masa en un cuerpo de agua natural.
- La radiación solar, que es la fuente de energía para el crecimiento fotosintético del fitoplancton.

Disminución al crecimiento del fitoplancton

Ignorando ahora la influencia del zooplancton y considerando la variación con respecto a las condiciones ambientales (temperatura, nutrientes, luz y muerte) el término fuente para el fitoplancton puede escribirse como:

$$R_9 = \left(G_{p4} - (K_{4R} + K_{4D}) - \frac{v_{s9}}{h} \right) \phi_9 \quad (3.31)$$

donde $G_{p4} = K_{4C}(\phi_1, N, I)$ es la velocidad de crecimiento del fitoplancton en función de la temperatura (ϕ_1), nutrientes (N) y luz (I), K_{4R} es la velocidad de respiración del fitoplancton, K_{4D} es la velocidad de muerte de fitoplancton y v_{s9} velocidad de sedimentación.

Temperatura

Chapra [23] demostró que niveles altos de temperatura y luz extinguen el crecimiento de las algas. El modelo que permite describir este efecto es el ya conocido modelo theta:

$$K_{4C,T} = K_{4C,20} \theta^{T-20} \quad (3.32)$$

Esto quiere decir que la temperatura óptima para el crecimiento de las algas parece estar en el rango entre 20 ° y 25 °C. A temperaturas más altas, generalmente hay una supresión de la tasa de crecimiento saturada.

Luz

En ambientes naturales, la intensidad de luz no es uniforme y su valor varía en función de la profundidad debido a la turbidez presente y la variación diurna de la luz superficial. Aplicando el modelo de Steele [29, 114] podemos obtener una ecuación para la limitación del crecimiento de las algas en función de la profundidad:

$$F [I(h)] = \frac{I_0 e^{K_e z}}{I_s} e^{-\frac{I_0 e^{-K_e z}}{I_s} + 1} \quad (3.33)$$

donde I_0 = Intensidad de luz incidente

$$I_s = H_s$$

$$K_e = \text{Extinción de luz}$$

con

$$K_e = K_e^i + 0.0089\phi_9 + 0.0054\phi_9^{2/3}$$

$$K_e^i = K_{ew} + 0.052\mathcal{N} + 0.174h$$

donde K_{ew} es la extinción de luz debido a las partículas libres en el agua y el color, \mathcal{N} son los sólidos no suspendidos volátiles y D es el detritus. Si la ecuación (3.33) la integramos sobre h y tiempo obtenemos

$$X_{RI} = \frac{1}{h} \int_0^h \frac{1}{T} \int_0^{fT} \frac{I_0 e^{-K_e z}}{I_s} e^{-\frac{I_0 e^{-K_e z}}{I_s} + 1} dt dh \quad (3.34)$$

con $T=1$ día y f la fracción de luz diurna del día. Evaluando la doble integral de la ecuación (3.34) resulta:

$$X_{RI} = \frac{e}{K_e h} f \left[\exp \left\{ -\frac{I_0}{I_s} \exp(-K_e h) \right\} - \exp \left(-\frac{I_0}{I_s} \right) \right] \quad (3.35)$$

Consecuentemente, X_{RI} cuantifica la reducción de luz no óptima como una función del coeficiente de extinción y la profundidad de cada tramo considerado.

Nutrientes

El efecto de los nutrientes sobre la proliferación de las algas es complejo. La ecuación de Michaelis-Menten proporciona una aproximación adecuada para manipular la limitación de nutrientes. Los nutrientes más importantes que determinan esta reproducción son el N y P.

Existen tres aproximaciones para determinar el efecto combinado de los nutrientes: multiplicativa, mínima y media armónica. De los tres enfoques, la mínima se formuló en este modelo.

$$X_{RN} = \min \left(\frac{DIN}{K_{mN} + DIN}, \frac{DIP}{K_{mP} + DIP} \right) \quad (3.36)$$

donde DIN nitrógeno orgánico disuelto, DIP fósforo inorgánico disuelto, K_{mN} saturación media para la limitación del N en la absorción del fitoplancton y K_{mP} saturación media para la limitación del P en la absorción del fitoplancton

Muerte del fitoplancton

Numerosos mecanismos se han propuesto para reducir el desarrollo del fitoplancton. Estas formulaciones están enfatizadas en la respiración, excreción y la predación. Los dos primeros mecanismos han sido incluidos para predecir la muerte del fitoplancton.

La respiración endógena es el proceso en el cual las algas oxidan su carbón orgánico a dióxido de carbono. La velocidad de respiración en función de la temperatura se expresa como:

$$K_{4R,T} = K_{4R,20} \theta_{4R}^{T-20} \quad (3.37)$$

Mientras que la excreción es debida por alguna infección de las algas provocadas por otro microorganismo o materiales tóxicos K_{4D} .

El mecanismo total de reacción del fitoplancton considerando todos los procesos puede ser formulada como:

$$R_{10} = K_{1C,T}X_{RI}X_{RN} - (K_{4R,T} + K_{4D}) \quad (3.38)$$

En la ecuación (3.38) se observa las interacciones que intervienen en la predicción aproximada del florecimiento y muerte del fitoplancton. Adicionalmente, se deben incluir algunas otras transformaciones o sub-productos que se generan de este intercambio; por ejemplo, la generación de oxígeno producto del crecimiento de las plantas. Por tanto, es necesario adaptar la formulación revisada en anteriores lecturas del ciclo del nitrógeno, fósforo, materia orgánica y oxígeno disuelto, tomando en cuenta el mecanismo de las algas. Las ecuaciones que rigen estos cambios están en base al programa de simulación de análisis de la calidad del agua (WASP) [2, 3]. Así re-definiendo los procesos (R) de cada una de las variables se obtiene lo siguiente:

DBO-C

$$R_2 = a_{oc}K_{1D}\phi_9 - k_d\theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{DBO} + \phi_6} \right) \phi_2 - \frac{v_{S8}(1 - f_{d2})}{h} \phi_2 - \frac{5}{4} \frac{32}{14} K_{5D}\theta_{5D}^{T20} \phi_5 \left(\frac{K_{NO_3}}{K_{NO_3} + \phi_6} \right) \quad (3.39)$$

Nitrógeno

$$R_3 = -K_{34}\theta_{34}^{T20} \phi_3 \left(\frac{\phi_9}{K_{PHY} + \phi_6} \right) - \frac{v_{S8}(1 - f_{D3})}{h} \phi_3 + a_{NC}K_{4R,T}\phi_9 + a_{NC}f_{ON}K_{4D}\phi_9 \quad (3.40^a)$$

$$R_4 = K_{34}\theta_{34}^{T20} \phi_3 \left(\frac{\phi_9}{K_{PHY} + \phi_6} \right) - K_{45}\theta_{45}^{T20} \phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) - a_{NC}P_{NH_4}G_{P4}\phi_9 + a_{NC}(1 - f_{ON})K_{4D}\phi_9 \quad (3.40^b)$$

$$R_5 = K_{45}\theta_{45}^{T20} \phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) - K_{5D}\theta_{5D}^{T20} \phi_5 \left(\frac{K_{NO_3}}{K_{NO_3} + \phi_6} \right) - a_{NC}(1 - P_{NH_4})G_{P4}\phi_9 \quad (3.40^c)$$

donde K_{PHY} = Saturación media para la limitación del fitoplancton en la mineralización

a_{NC} = Relación nitrógeno carbono

f_{ON} = Fracción de fitoplancton muerto reciclado a NO

P_{NH_4} = Factor de preferencia de amonio

$$P_{NH_4} = \phi_4 \left(\frac{\phi_5}{(K_{mN} + \phi_4)(K_{mN} + \phi_5)} \right) + \phi_4 \left(\frac{K_{mN}}{(\phi_4 + \phi_5)(K_{mN} + \phi_5)} \right)$$

Oxígeno disuelto

$$R_6 = k_a \theta_2^{T20} (\phi_{sat} - \phi_6) - k_d \theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{DBO} + \phi_6} \right) \phi_2 - \frac{D_{OS}}{h} \theta_5^{T20} - \frac{64}{14} K_{45} \theta_{45}^{T20} \phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) + b^a G_{P4} \phi_9 + \frac{32}{12} K_{4R,T} \phi_9 \quad (3.41)$$

con

$$b^a = \frac{32}{12} + \frac{48}{14} \frac{14}{12} (1 - P_{NH_4}) \quad (3.42)$$

donde b^a es la tasa total de producción de oxígeno debido al crecimiento del fitoplancton.

Fósforo

Para modelar el ciclo del fósforo se utiliza un enfoque análogo al utilizado en el ciclo del nitrógeno. Las dos únicas formas utilizadas en este esquema son: el fósforo orgánico (ϕ_7) e inorgánico (ϕ_8). Sus cinéticas son descritas como:

$$R_7 = -K_{78} \theta_{78}^{T20} \phi_7 \left(\frac{\phi_9}{K_{PHY} + \phi_6} \right) - \frac{v_{S8}(1 - f_{D3})}{h} \phi_7 + a_{PC} K_{4R,T} \phi_9 + a_{PC} f_{OP} K_{4D} \phi_9 \quad (3.43^a)$$

$$R_8 = K_{78} \theta_{78}^{T20} \phi_7 \left(\frac{\phi_9}{K_{PHY} + \phi_6} \right) - a_{PC} G_{P4} \phi_9 + a_{PC} (1 - f_{OP}) K_{4R,T} \phi_9 \quad (3.43^b)$$

donde K_{78} = velocidad de mineralización del fósforo orgánico (PO)

f_{D7} = fracción disuelta de NO

f_{OP} = fracción de fitoplancton muerto reciclado a PO

Los términos en el lado derecho de la ecuación (3.43^a) representan la pérdida debido a la mineralización, la sedimentación del fósforo orgánico particulado y la producción de fósforo orgánico debido a la respiración y muerte del fitoplancton respectivamente. Mientras que, los términos de la derecha de (3.43^b) representan la ganancia debido a la mineralización, consumo por el crecimiento de las algas y la producción de fósforo inorgánico debido a la muerte y respiración de las algas respectivamente. La matriz de procesos para el proceso de eutrofización se indica en la Tabla 3.10

Variable $i \rightarrow$ Process $j \downarrow$	ϕ_1 T	ϕ_2 DBO - C	ϕ_3 NO	ϕ_4 NH ₄ - N	ϕ_5 NO ₃	ϕ_6 OD	ϕ_7 PO	ϕ_8 PI	ϕ_9 Algas	Proceso
1. Re-aireación						1				$k_d \theta_1^{20} (\phi_{nat} - \phi_6)$
2. Desoxigenación		-1				1				$k_d \theta_1^{20} \left(\frac{\phi_6}{K_{NO_3} + \phi_6} \right) \phi_2$
3. Sedimentación		-1								$\frac{v_{ss}(1-f_{DB})}{h} \phi_2$
4. D_{OS}						-1				$\frac{D_{OS} \theta_1^{20}}{h}$
5. Mineralización NO			-1	1						$K_{34} \theta_1^{20} \phi_3 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right)$
6. Sedimentación NO			-1							$\frac{v_{ss}(1-f_{DB})}{h} \phi_3$
7. Nitrificación				-1	1	$-\frac{64}{14}$				$K_{45} \theta_1^{20} \phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right)$
8. Desnitrificación		$-\frac{32}{14}$			-1					$K_{57} \theta_1^{20} \phi_5 \left(\frac{K_{NO_3}}{K_{NO_3} + \phi_6} \right)$
Limitación del nitrógeno										
9. Cre. Fito.						b^r		$-a_{pc}$	1	$G_{P_4} \phi_9$
10. Resp. Fito.						$-\frac{32}{12}$	a_{pc}		-1	$K_{4R,T} \phi_9$
11. Muerte Fito.		a_{OC}					$a_{pc} f_{OP}$	$a_{pc}(1-f_{OP})$	-1	$K_{4D} \phi_9$
12. Mineralización PO							-1	1		$K_{78} \theta_1^{20} \phi_7 \left(\frac{\phi_9}{K_{P_1N} + \phi_9} \right)$
13. Sedimentación PO										$\frac{v_{ss}(1-f_{DB})}{h} \phi_7$
Limitación del fósforo										
14. Cre. Fito.		a_{OC}		$-a_{NC} P_{NH_4}$	$-a_{NC}(1-P_{NH_4})$	b^r		$-a_{pc}$	1	$G_{P_4} \phi_9$
15. Resp. Fito.			a_{NC}			$-\frac{32}{12}$	a_{pc}		-1	$K_{4R,T} \phi_9$
16. Muerte Fito.			$a_{NC} f_{NO}$	$-a_{NC}(1-f_{NO})$					-1	$K_{4D} \phi_9$
17. Temperatura	1									$\frac{\Delta H}{\rho C_p h}$

Tabla 3.10: Matriz de procesos de Petersen para la eutrofización

Caso 14. Distribución del oxígeno disuelto contemplando la Eutrofización con el mecanismo de la temperatura en flujo estacionario.

La interacción de los nutrientes sobre la biomasa de las plantas se evalúan con el ejemplo de la sección 3.3. Las condiciones iniciales, de contorno y las fuentes para configurar este caso vienen proporcionadas por la Tabla 3.11 y por lo tanto no se repiten aquí. Las condiciones del flujo son iguales a las ya comentadas en el Caso 11.

Variable	Unidad	C. Inicial	C. Contorno	Fuente 1	Fuente 2
ϕ_1	°C	20	20	28	15
ϕ_2	g/m ³	2	2	200	5
ϕ_3	gN/m ³	5	5	0	1
ϕ_4	gN/m ³	0.05	0.05	10	0.05
ϕ_5	gN/m ³	0.02	0.02	15	0.02
ϕ_6	g/m ³	7.5	7.5	2.0	9.0
ϕ_7	gP/m ³	0.1	0.1	1.0	0.1
ϕ_8	gP/m ³	0.01	0.01	0.5	0.01
ϕ_9	μgCh/L	0.01	0.01	10.0	0.01

Tabla 3.11: Datos para configurar la interacción plantas/nutrientes. Caso 14

Las constantes de reacción usadas en este ejemplo son:

$$K_{34} = 0.25 d^{-1}; K_{45} = 0.15 d^{-1}; K_{5D} = 0.25 d^{-1}; a_{NC} = 0.05 gN/gC;$$

$$K_{4R,20} = 2 gO/gA; K_{1C,20} = 1.6 gO/gA; K_{mN} = 0.155 gN/m^3;$$

$$K_{mP} = 0.025 gP/m^3; K_e = 0.2 m^{-1}; f = 0.44; K_{78} = 0.1 d^{-1}; a_{PC} = 0.013 gP/gC.$$

Las otras velocidades que no están descritas adoptan un valor de 0 debido a las condiciones del caso propuesto [23].

La Figura 3.12 muestra los efectos de integrar las cinéticas del P y N sobre la distribución de la concentración del OD a lo largo del canal. Puede verse que, respecto a la distribución en la Figura 3.6, se ha reducido debido a la influencia del proceso de nitrificación y la interacción del mecanismo de las plantas. Este último creando variaciones de la concentración del OD a lo largo del día.

Una observación adicional es con relación al parámetro oxígeno de saturación. Con la formulación (3.23) se consigue encontrar distribuciones espaciales muy semejantes a las salidas del modelo QUAL2E, esto a su vez determina que la solución numérica de la concentración de OD a lo largo del dominio se ajuste al valor de salida observado.

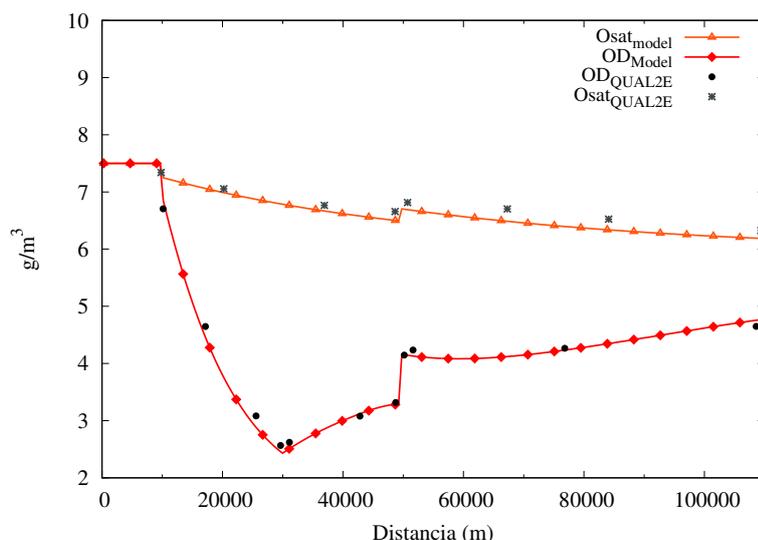


Figura 3.12: Ciclo del N, P e interacciones de las algas con el OD: Comparación de los perfiles longitudinales de OD y O_{sat} con la salida del modelo QUAL2E. Caso 14

3.7 Aplicación del modelo predictivo de calidad de agua a casos fluviales

Consideramos la aplicación a un tramo del río Ebro (España). Nuestro estudio se centra en el tramo comprendido entre Alagón y la ciudad de Zaragoza con una longitud aproximada de 40 km (ver Figura 3.13). El tramo elegido tiene ciertas características que lo hacen especial debido a la aportación del río Jalón, las estaciones de control y la derivación de caudal al Canal Imperial de Aragón aguas arriba.

En el punto 1 (Figura 3.13), inicio del dominio, hay una estación de medida de calidad (Estación 930), que en la actualidad no hay señales activas. En esta estación se medía en continuo indicadores de calidad tales como: OD, $NH_4 - N$, temperatura, entre otros. A 50 m existe una estación de aforo (Estación A286) en donde se mide la variable hidrodinámica calado. Asimismo, siguiendo el curso del río, existe un afluente del río Jalón que tiene una estación de control para las variables de OD y temperatura (no en continuo) y una estación de aforo. El punto de control para verificar tanto la calidad del agua como las variables hidrodinámicas se encuentra cerca del casco urbano de Zaragoza (punto 2 o estación A011).

Es importante mencionar que existe una obra hidráulica paralela al margen derecho del río Ebro denominada Canal Imperial de Aragón. Este canal fue construido en primera instancia para mejorar el riego entre los municipios de Fontellas (Navarra) y Fuentes de Ebro (Zaragoza) y tiene una longitud de 110 km. Su diseño original fue

de $30 \text{ m}^3/\text{s}$ por lo que su efecto es de vital importancia sobre todo en períodos de estiaje, ya que el caudal de extracción representa un porcentaje importante del caudal del propio río Ebro.

Toda la información referente a caudales, variables químicas y regularización de las agua y riegos de la cuenca hidrográfica del Ebro la gestiona la Confederación Hidrográfica del Ebro (CHE). Este organismo gubernamental maneja un sistema de control en línea con el fin de determinar la salud de los ríos de la cuenca hidrográfica. Los parámetros hidráulicos que se miden con frecuencia de 15 minutos son el nivel superficial y el caudal de las estaciones de aforo. Los parámetros químicos que se miden son las concentraciones de OD, CBOD-C y de $\text{NH}_3 - \text{N}$ con frecuencia irregular. Además se realizan medidas de la temperatura del agua con frecuencia irregular.



Figura 3.13: Tramo de estudio considerado entre Alagón y Zaragoza

Caso 15. | Caso fluvial sobre un tramo del río Ebro en el período estacional de verano.

Se escoge un primer escenario en el período comprendido entre los días 3 y 21 de julio del 2006 estación de verano. Los valores de entrada disponibles para la temperatura del agua y caudal fueron proporcionados por la CHE. Mientras que para los parámetros meteorológicos se consideró un valor promedio de los 18 días de la estación (E085) ubicada a 15.8 km del punto 1. Para construir la malla de cálculo donde en cada centro de la celda se tienen las variables velocidad, sección transversal y componentes del modelo de calidad se requiere las coordenadas x, y, z del tramo en estudio. Del

Instituto Geográfico Nacional (ING) se obtiene el Modelo Digital de Terreno (MDT) de resolución 5×5 m para obtener la muestra densa de la superficie de la tierra dando mediciones exactas de x , y y z . Debido a la técnica de teledetección óptica que utiliza la luz de láser no se recoge el fondo del cauce porque la lámina de agua dificulta esta toma de datos. Para evitar este inconveniente se realizó una reconstrucción del cauce interpolando las secciones batimétricas medidas a lo largo del tramo en estudio. Con esta información se construye la malla de 600 celdas con $\Delta x = 62.916$ m. La figura 3.14 representa la forma real de una de las secciones las cuales sirven para construir la malla.

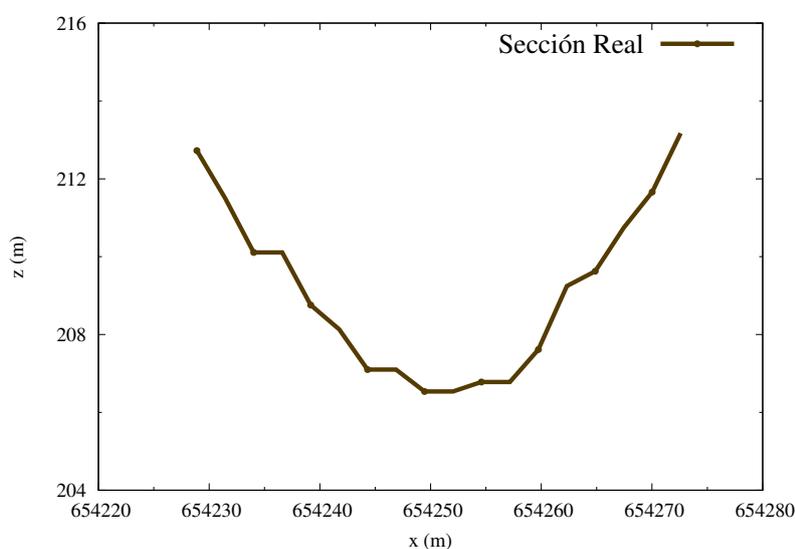


Figura 3.14: Sección real del cauce del río Ebro

Para establecer las condiciones iniciales y de contorno del evento transitorio se utilizó la información proporcionada por la CHE. La periodicidad de esta información varía en frecuencia dependiendo de la variable sea esta hidrodinámica o de calidad, por ejemplo el caudal que se impone en $t = 0$ y en el contorno se tiene cada 15 min, sin embargo en el caso de las concentraciones de OD, amonio, materia orgánica y la temperatura la frecuencia de registro es irregular yendo desde 15min (con intermitencia) hasta meses. Las condiciones iniciales se establecieron con un estacionario calculado en una simulación previa utilizando condiciones de contorno de entrada estacionarias correspondientes al primer valor de las variables de entrada en la serie temporal. Además se utilizó un coeficiente global de $n=0.0325 \text{ sm}^{-1/3}$ para indicar todas las coberturas presentes en el terreno y un $\text{CFL}=1$. Con estas condiciones los resultados se representan en las Figuras 3.15, 3.16 y 3.17. Si prestamos atención a la variable hidrodinámica Q Figura (3.15), los resultados que proporciona el modelo presentan una concordancia aceptable con respecto de las medidas disponibles. A pesar de esto, se observa discre-

pancias que se asocian a: que es muy difícil considerar todas las extracciones que se dan a lo largo del río para los diferentes usos sobre todo para el riego. La variación espacial del coeficiente de Manning, entre otras.

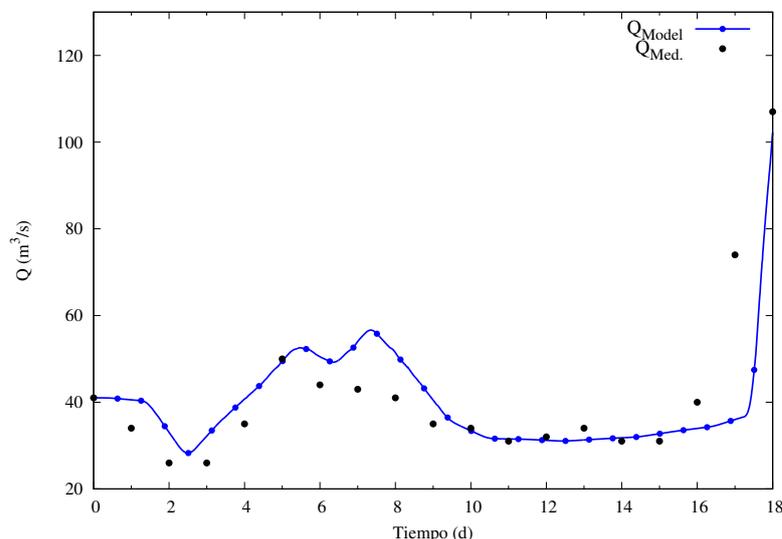


Figura 3.15: Evolución temporal numérica y medida del caudal del río Ebro (Estación verano) en Zaragoza. Caso 15

Por el contrario, la Figura 3.16 presenta diferencias significativas entre las distribuciones temporales del modelo (línea roja) y los datos medidos en el punto 2 (puntos negros) de la variable de estado temperatura del agua. La causa se puede atribuir a las señales meteorológicas; en esta simulación estas variables se consideraron constante en el tiempo. El valor determinado para tal efecto fue un promedio del día, es decir, no existió variabilidad de acuerdo a la hora del día. Estos cambios a lo largo del día son primordiales sobre todo cuando los caudales están en un rango comprendido entre los 20 y 50 m³/s (ver Figura 3.15). Para evitar estas diferencias, se debe realizar una calibración de estos parámetros o por el contrario considerar valores meteorológicos de mejor calidad.

Para calibrar la temperatura del agua en estas condiciones, se requiere realizar una serie de simulaciones de prueba y error, con el fin de obtener los valores más idóneos de las variables radiación solar, temperatura ambiente, velocidad del viento y humedad relativa. El proceso se inicia con unas condiciones iniciales de partida de los parámetros citados. Este conjunto de valores determinan la evolución temporal de la variable a calibrar una vez que se haya resuelto la ecuación (2.32). Si la solución final no es igual a los valores medidos en la estación 909 (punto 2) se repite el proceso con un nuevo conjunto de valores para las variables meteorológicas. El proceso termina cuando las diferencias entre lo medido y simulado son aceptables.

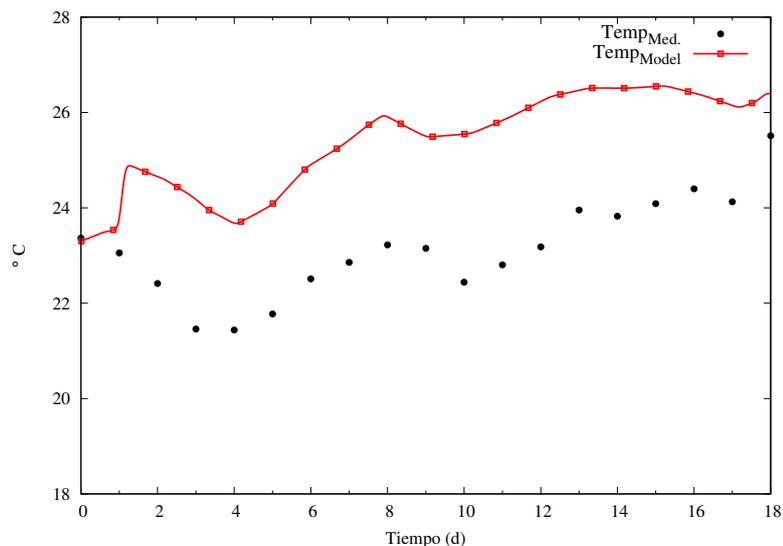


Figura 3.16: Distribución temporal numérica y medida de la temperatura del agua en el río Ebro antes de la calibración (estación verano) en Zaragoza. Caso 15

La Figura 3.17 reproduce las distribuciones temporales de la temperatura del agua medida (puntos negros) frente a la temperatura del agua simulada (línea roja). Las diferencias se ven reducidas después de la calibración correspondiente. De la Figura 3.17 se deduce un incremento progresivo de la temperatura. Con el modelo predictivo propuesto se puede llegar a predecir aceptablemente este incremento y tener un mayor control sobre la variable temperatura del agua. Esto a su vez podría ayudar en la toma de decisiones de remediación de la masa de agua. Una afección tangible por citar como ejemplo está en la fauna ictícola del río Ebro, concretamente en la especie esturión (excepcionalmente pescada en la actualidad). De esta especie se sabe que puede vivir a temperaturas que varían ampliamente desde sólo 1°C a 25–26°C. Según esto se observa que esta especie es bastante resistente a contenidos bajos de oxígeno disuelto pero en tales condiciones no gana peso, consecuentemente, su metabolismo debe adaptarse a estas nuevas condiciones del entorno que, como se observa no son las más idóneas. Para este tipo de eventualidades el modelo propuesto puede servir como un apoyo adicional en donde, se puede crear diferentes escenarios y observar posibles predicciones que determinaran su mayor o menor impacto sobre una cuenca en concreto.

Caso 16. | Caso fluvial sobre la cuenca del río Ebro en el período estacional de invierno.

El siguiente caso propuesto es de igual manera un evento transitorio muy pronunciado tanto para el caudal (Q) como para las variables químicas. El dominio utilizado es el

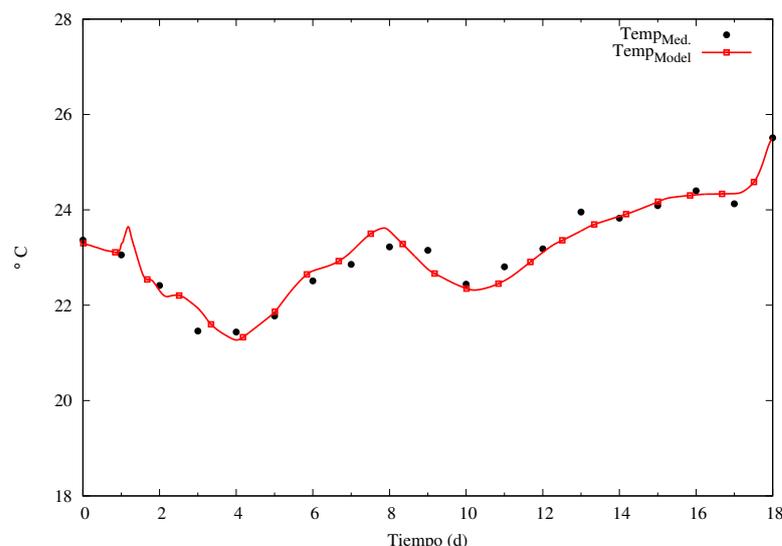


Figura 3.17: Distribución temporal numérica y medida de la temperatura del agua en el río Ebro (estación verano) en Zaragoza. Caso 15

mismo tramo del río Ebro (Caso 15) pero esta vez en un período invernal y con un tiempo de simulación de 181 días.

Considerando la hidrodinámica, la Figura 3.18 representa la evolución temporal del caudal en la estación A011 Ebro-Zaragoza (punto 2 de la Figura 3.13); la línea azul indica el caudal calculado mientras que los puntos indican los valores medidos. En el hidrograma contemplamos un transitorio muy marcado que va desde los 50 hasta 1100 m³/s. Los dos picos de caudal producidos a los 57 y 78 días aproximadamente se reproducen de manera aceptable. Si se analiza la evolución del nivel superficial (véase Figura 3.19), los resultados indican de la misma manera que el modelo logra capturar todas las variaciones temporales registradas en la estación medida. Por consiguiente en base a estos resultados se puede decir que el modelo predice los procesos hidrodinámicos de manera adecuada.

Por otro lado, la evolución temporal de la temperatura del agua frente a las medidas registradas durante el período comprendido entre el 1 de enero y 30 de junio se observa en la Figura 3.20. En esta ocasión el conjunto de datos presentan resultados bastante similares en el tiempo evaluado. Al transportar caudales más grandes, el impacto de las variables meteorológicas no es tan relevante y esto a su vez produce que no sea necesaria una calibración tan detallada como en el caso anterior. Por lo tanto se puede concluir que la evolución de la temperatura del agua viene gobernada por su temperatura y el caudal transportado más que por la variación meteorológica.

Si prestamos atención a la variable OD (ver Figura 3.21) observamos que su con-

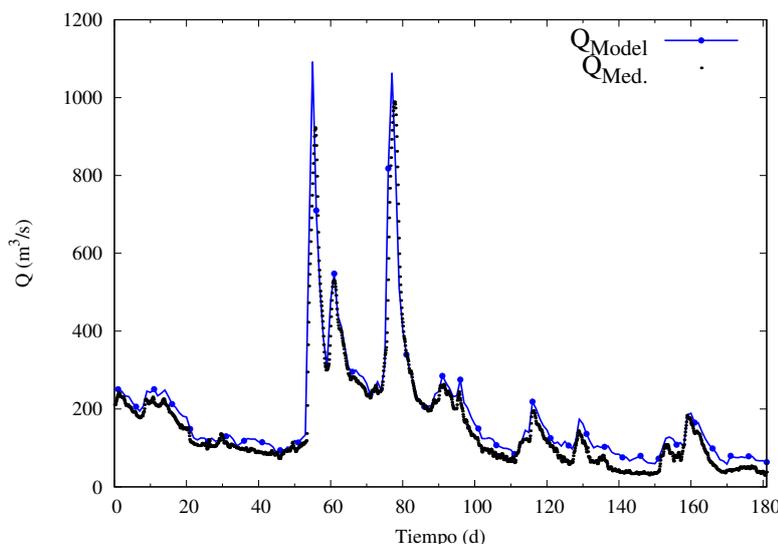


Figura 3.18: Comparación del modelo con datos de campo para el caudal del río Ebro (estación invierno) en Zaragoza. Caso 16

centración oscila entre 6 a 10 g/m^3 , según este intervalo la CHE clasifica el estado de esta masa de agua como *bueno-moderado*. Esta clasificación está en base únicamente a la variable OD que depende de la masa de agua. Según este mismo organismo tipifica esta masa de agua superficial como grandes ejes en ambiente mediterránea. Esta distinción se basa en aquellos factores que determinan las características naturales del río, lo que a su vez condicionan la estructura y composición de la comunidad biológica. Esta distribución temporal de OD puede afectar de forma negativa a la clasificación del estado ecológico. Según la CHE, este tramo con estas concentraciones de OD se le ha etiquetado una clasificación *acceptable*.

De acuerdo a la predicción los resultados obtenidos por el modelo son razonables. Sin embargo, algunas diferencias significativas entre los valores registrados y calculados se dan en ciertos intervalos de tiempo. Este hecho podría ser consecuencia de:

- la limitación en los datos registrados en la estación 930. Una interpolación lineal suplía esta falta de información cuando era necesario.
- falta de calibración in situ de las velocidades de descomposición y sedimentación de todos los procesos. Estos valores deben ser calibrados in situ debido a que las características del agua y los procesos son propios de cada zona. En este caso particular se consideró valores de referencia dados en la literatura [13].
- información precaria de las variables algas, materia orgánica y nitrógeno orgánico. Puesto que estamos inevitablemente condicionados por la financiación y porque las variables medidas no están destinadas a apoyar los modelos de simulación existe

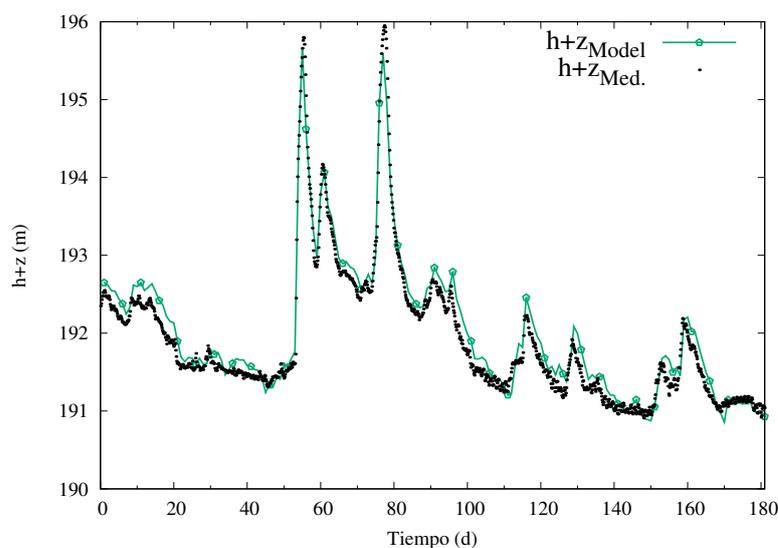


Figura 3.19: Comparación del modelo con datos de campo del nivel del río Ebro (estación invierno) en Zaragoza. Caso 16

una deficiencia en la información. Esto provoca que los datos no sean recolectados en el tiempo y espacio apropiadamente, en consecuencia para este escenario se realizó una interpolación para algunas variables de estado, mientras que la variable algas directamente no se consideró en el modelo.

Otra variable de calidad que se puede comparar con el modelo presentado es el $\text{NH}_4 - \text{N}$. La evolución de las concentraciones a lo largo del período de simulación se presenta en la Figura 3.22. El diagnóstico del estado ecológico según el organismo gubernamental (CHE) fue de muy *bueno-bueno*, es decir, no superó el promedio anual de 0.25 g/m^3 .

Respecto a las distribuciones de los resultados numéricos frente a los medidos son aceptables. Para alcanzar esta relación nuevamente se recurrió al ensayo de prueba error que se ha venido utilizando en previas ocasiones. En este caso el proceso consistió en proponer un conjunto de valores dentro de un rango aceptable para las variables de estado $\text{DBO} - \text{C}$, NO y $\text{HN}_4 - \text{N}$. Este proceso se aplicó porque como ya se comentó anteriormente no existe suficiente información requerida para estos escenarios transitorios. La serie de simulaciones lanzadas se realizó hasta que se logre una reproducción razonable de los datos observados o hasta que no haya ninguna posible mejora adicional. Como en este tipo de modelos también se necesita de la calibración de los parámetros, estos valores se representan en la Tabla 3.12, y al igual que antes este conjunto de valores fueron obtenidos mediante una calibración cuyos valores de partida fueron recogidos de la literatura existente.

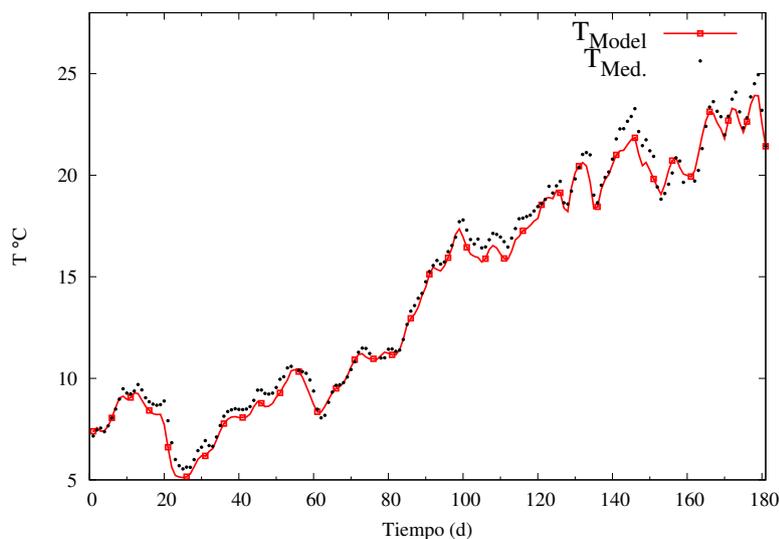


Figura 3.20: Distribución temporal de la temperatura del agua en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16

Otro análisis complementario es la evaluación estadística del desempeño del modelo para las variables temperatura y OD en la estación invernal. Para este estudio se utilizaron las variables estadísticas de la raíz del error cuadrático medio (RECM) y el coeficiente Nash-Sutcliffe [45]. Los valores calculados se muestran en la Tabla 3.13. De acuerdo a estos parámetros, la predicción del modelo se considera aceptable. La mejor predicción se encuentra en la temperatura (0.991 Nash-Sutcliffe), mientras que en el OD se obtiene un valor de 0.814 para el coeficiente de Nash-Sutcliffe.

Parámetro	Unidad	Valor calibrado	Valor calibrado
Velocidad de desoxigenación DBO-C (k_d) at 20 °C	day ⁻¹	0.2	0.16-0.21
Saturación media para DBO-C (k_{BOD})	gO ₂ /m ³	0.5	0.5
Velocidad de mineralización NO (k_{71}) at 20 °C	day ⁻¹	0.075	0.075
Velocidad de nitrificación (k_{12}) at 20 °C	day ⁻¹	0.11	0.09-0.13
Saturación media de nitrificación (k_{NIT})	gO ₂ /m ³	0.5	2.0
Velocidad de desnitrificación (k_{2d}) at 20 °C	day ⁻¹	0.089	0.09
Saturación media de desnitrificación (k_{NO3})	gO ₂ /m ³	0.113	0.1

Tabla 3.12: Parámetros calibrados para el caso río Ebro. Caso 16

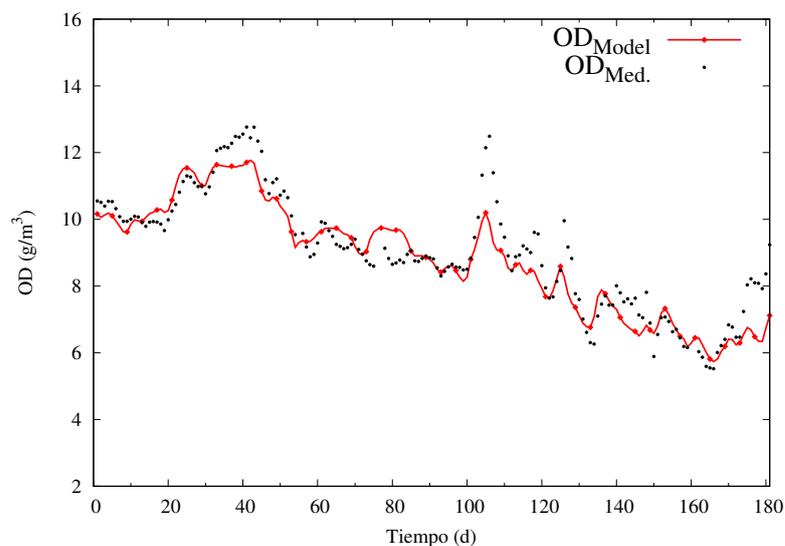


Figura 3.21: Concentración de OD en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16

Variable	RECM	Coef. Nash
ϕ_1	0.533 °C	0.991
ϕ_6	0.6897 g/m ³	0.814

Tabla 3.13: Variables estadísticas de calidad para la estación invernal. Caso 16

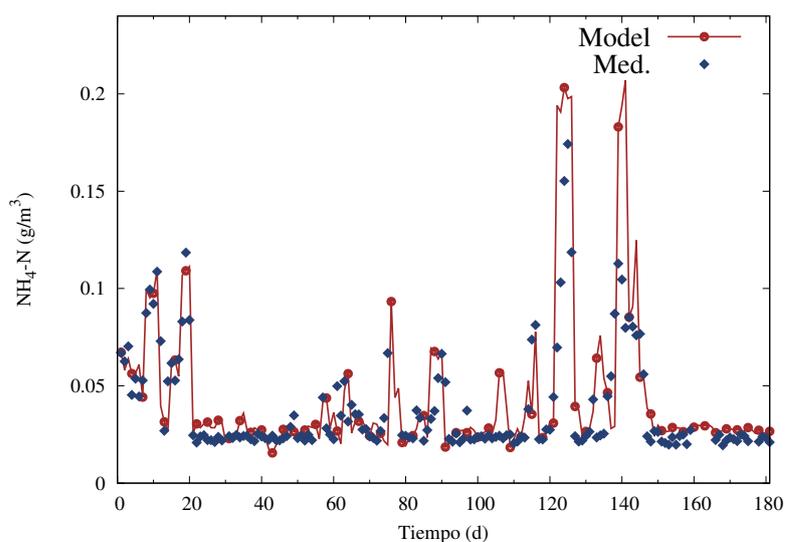


Figura 3.22: Concentración de NH₄ – N en el río Ebro (estación invierno) en la estación 909. Caso 16

Optimización y cálculo inverso de procesos de transporte

4.1 Introducción

La simulación, como se estudió en el capítulo anterior, comprende la construcción de diferentes modelos con el fin de predecir escenarios. El objetivo principal de estas formulaciones consiste en reproducir los procesos de transporte de la forma más fiel posible a partir de un estado inicial y unas condiciones de contorno, y encontrando respuestas a determinadas acciones sobre un problema en particular.

Para verificar el modelo es indispensable la comparación de sus resultados con los datos medidos. Además, si se utilizan valores de parámetros consistentes con los datos observados, o que estén dentro de los rangos generales de los valores de la literatura, se consigue calibrar el modelo desarrollado. La importancia de la calibración es debida a la naturaleza semi-empírica de algunos términos de los modelos hidrodinámicos (fricción) y de calidad de agua (procesos de reacción).

El proceso de calibración puede requerir un tiempo significativo. Este consumo dependerá del proceso físico considerado y del escenario propuesto. No es lo mismo calibrar un modelo hidrodinámico que uno de calidad sabiendo que en el segundo se tiene una serie de parámetros que, en muchos de los casos, son totalmente desconocidos y que la única opción práctica es confiar en los valores de la literatura o de casos similares. Y tampoco es igual realizar esta calibración cuando los escenarios son en

flujo estacionario o en flujo transitorio por las continuas variaciones que se producen a lo largo del tiempo y del espacio en el segundo caso.

Por último un modelo calibrado es técnicamente válido solo para el escenario particular y un conjunto de datos considerados. Después de la calibración, se procede con la verificación, que consiste en confirmar la utilidad del modelo sobre una amplia gama de condiciones externas. En esta etapa, los parámetros calibrados podrían ajustarse ligeramente, con el fin de que el modelo pueda ser capaz de reproducir adecuadamente los datos de campo y las nuevas condiciones externas establecidas. Una vez que los datos calculados y observados hayan alcanzado un nivel de confianza apropiado se puede establecer que el modelo está calibrado y verificado.

Para conseguir la fase de calibración y validación de un modelo, se sobreentiende que la información establecida tanto en el inicio de la simulación (condiciones iniciales) como en la frontera del dominio (condiciones de contorno) se conoce en el tiempo y con la calidad necesaria. Por tanto, esta información debe ser registrada en campo con una frecuencia establecida y sobre todas las variables físicas presentes en ambos procesos físicos (hidrodinámico-transporte).

La carencia de información provoca diferencias entre los valores calculados y los medidos. Para minimizar estas diferencias es necesario implementar en los modelos de calidad existentes un procedimiento adicional de recuperación de la información necesaria. Estas técnicas proporcionarían ventajas sobre el tiempo utilizado en la calibración de un modelo y sobre el diseño de nuevas estrategias de control. Por tanto, se justifica la necesidad de desarrollar técnicas complementarias que permitan recuperar parte de la información si se dispone de alguna medida puntual.

Todas estas acciones podrían ser estudiadas a través de un proceso de optimización que conlleve a un estado aceptable de contaminación de un río. Para tal efecto, deben considerarse los vertidos puntuales y no puntuales que se descargan en un sistema físico real y que son la causa principal de contaminación de las fuentes de agua.

4.1.1 Modelos de optimización

El objetivo de la optimización es minimizar o maximizar una función objetivo J de k variables, $J = f(\phi_1, \dots, \phi_k)$ sujeto a restricciones lineales de igualdad o desigualdad [101]. Con este planteamiento simplificado se pueden distinguir los principales elementos en un problema de optimización:

- Una función objetivo que se optimizará.

- Variables de diseño, en nuestro caso reales.
- Restricciones, que hace referencia a las limitaciones sobre las cuales se trabaja.

Para resolver un problema de optimización existen diferentes métodos de resolución, los más importantes son:

- **Técnicas de programación matemática.** Son útiles para encontrar el mínimo de una función de muchas variables bajo un conjunto prescrito de restricciones.
- **Técnicas de proceso estocástico.** Se utilizan para analizar los problemas descritos por un conjunto de variables aleatorias que tienen distribuciones de probabilidad conocidas.
- **Métodos estadísticos.** Permiten analizar datos experimentales y en base a ellos construir modelos empíricos para obtener una representación más exacta de una realidad física.

En este trabajo el análisis se centra en una clasificación particular de las técnicas de programación matemática.

4.2 Técnicas de programación matemática

Un problema de control óptimo se formula mediante dos tipos de variables: las variables de control (ϕ_p) o de diseño que definen el sistema y gobiernan la evolución del sistema desde una etapa a la siguiente y las variables de estado (ϕ_o) que describen el comportamiento del sistema en alguna etapa. El fin de la optimización es encontrar un conjunto de variables de control que minimicen la función objetivo en todas las etapas [101]. En función de la forma de $f(\phi)$ los problemas de optimización se clasifican en:

- **Problemas de programación lineal (PPL).** Cuando $f(\phi)$ y las restricciones son lineales.
- **Problemas de programación no lineal (PPNL).** Cuando $f(\phi)$ no es lineal ni cuadrática y/o las restricciones no son lineales.
- **Problemas de programación geométrica (PPG).** Cuando $f(\phi)$ o sus restricciones se pueden expresar como un posinomio.
- **Problemas de programación cuadrática (PPC).** Cuando $f(\phi)$ es cuadrática y las restricciones son lineales.

Otra clasificación de los problemas de optimización es según su dimensionalidad. Existen dos clasificaciones: unidimensionales y multidimensionales. La primera cate-

goría involucra funciones que dependen de una sola variable independiente. Aquí la búsqueda del mínimo consiste en ascender o descender picos y valles unidimensionales. Por el contrario, los problemas multidimensionales implican funciones que dependen de dos o más variables independientes. La búsqueda de picos y valles no se realiza en una única dirección, es decir, se examina la topografía para alcanzar el objetivo de forma eficiente.

Nuestro estudio se dirige sobre la PPNL para abordar el problema de optimización. En este contexto, adaptando la función objetivo al problema de calidad del agua, ésta puede determinarse desde dos puntos de vista: una por minimización de costes (fuera del alcance de este estudio) y la otra por un control sobre un parámetro del modelo. Desde el punto de vista del control, existen distintas variables sobre las que se puede actuar: una o varias fuentes, la condición inicial, una condición de contorno o un proceso cinético en concreto son algunos ejemplos de optimización que se pueden desarrollar (Figura 4.1).

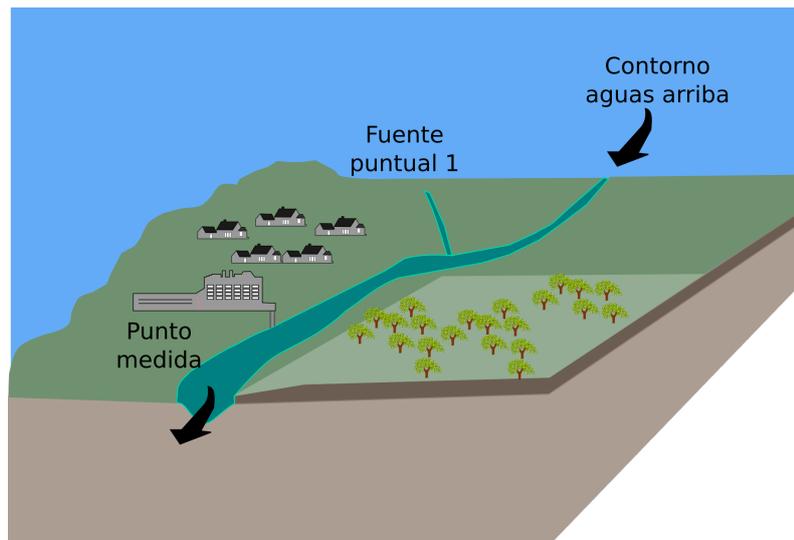


Figura 4.1: Esquema para la aplicación de un modelo de programación no lineal

En los cuatro casos citados lo que se persigue es recuperar información a partir de un objetivo establecido, esto se logra minimizando el error medido y calculado en un punto de medida.

Para alcanzar el objetivo propuesto es necesario definir el funcional de acuerdo a las necesidades del problema. La función objetivo elegida se basa en el error cuadrático medio (ECM) definido para una componente:

$$J = f(\phi(x, t)) = \frac{1}{2N_T} \sum_{p=1}^{N_T} (\phi_p - \phi_{o,p})^2 \quad (4.1)$$

siendo N_T número total de pares observados-calculados a lo largo del tiempo, ϕ_p las concentraciones calculadas y ϕ_o las concentraciones observadas en el punto de medida (punto 4 de la Figura 4.1).

La ecuación (4.1) es más difícil de minimizar que en el caso PPL. Estas dificultades aparecen incluso en el caso más simple de minimizar la función de una variable en \mathbb{R} (sin restricciones). El estudio de la posición de las rectas tangentes es un punto de partida para abordar este problema. La figura 4.2 muestra un problema en el que el mínimo se alcanza en puntos donde la recta tangente es horizontal.

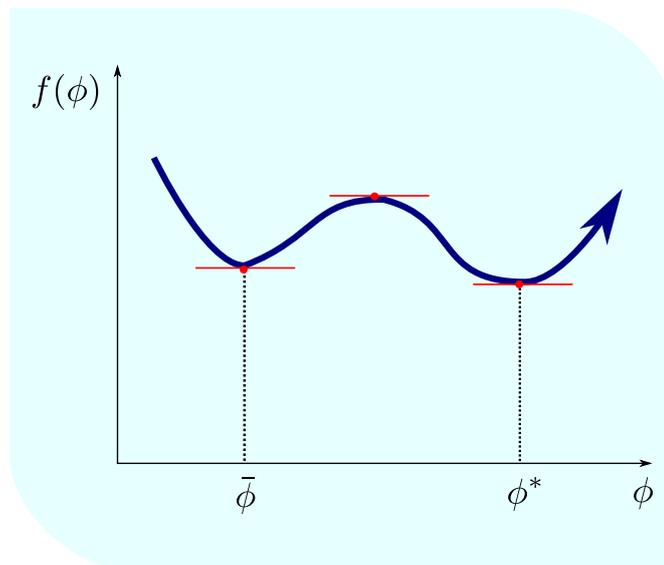


Figura 4.2: Ejemplo de mínimo local ($\bar{\phi}$) y global (ϕ^*)

La programación no lineal diferenciable no está exenta de dificultades aún cuando se hayan podido caracterizar los candidatos a mínimo de la función. De hecho si observamos la Figura 4.2 se observa que hay más de un punto en que la recta tangente es horizontal, es decir, que el mínimo local no es un mínimo global. La condición de convexidad aparece como una condición suficiente para evitar este trastorno. Además es importante saber si existe al menos una solución del problema de optimización. Para esto existen condiciones de optimalidad de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), las cuales deben ser satisfechas por todos los mínimos locales [113].

Se logra llegar a una convergencia suponiendo que nuestro PPNL es un problema convexo diferenciable, aunque en la práctica estos algoritmos son aplicables incluso cuando no se satisfacen estas condiciones de convergencia.

Anteriormente se clasificó la optimización de acuerdo a su dimensionalidad. En base a esto, existen tres métodos para determinar el mínimo o el máximo de una función con una sola variable no restringida. Estos son: búsqueda de la sección dorada (*golden*

search, en inglés), interpolación cuadrática y el método de Newton. Por su relevancia en la optimización multidimensional se analizan los dos primeros. Además, la optimización multidimensional no restringida puede englobarse desde dos puntos de vista:

Métodos directos. La esencia de estos algoritmos es que interpolan iterativamente la función objetivo y al mismo tiempo derivan fórmulas que calculan el mínimo de la función interpolada, generando una sucesión que converge a la solución buscada. Para la resolución de estos métodos existen dos tipos de técnicas: búsquedas aleatorias y búsquedas univariadas [57].

Métodos de gradiente. Estos métodos utilizan la primera o segunda derivada y operan directamente sobre la condición necesaria de optimalidad (KKT) para encontrar el óptimo. El método de paso ascendente/descendente así como otros más avanzados (gradiente conjugado, el método de Newton y los métodos cuasi-Newton) serán analizados brevemente en esta sección.

4.2.1 Optimización unidimensional no restringida

En esta sección se describirán técnicas para encontrar el mínimo de una función de una sola variable $f(\phi)$.

Método de búsqueda de la sección dorada. Pertenece a los métodos de búsqueda lineal basados en intervalos. La técnica se utiliza para hallar el extremo mínimo o máximo de una función unimodal, mediante reducciones sucesivas del rango de valores en el cual se sabe que se encuentra el extremo [116].

El método de la sección dorada es igual en esencia al método de la bisección para localizar raíces. Esto quiere decir que se puede comenzar por definir un intervalo donde la función sea univaluada. Este intervalo contendrá un solo mínimo. La diferencia con el método de la bisección se encuentra en cómo determinar el mínimo dentro del intervalo $[a,b]$ (ver Figura 4.3) en lugar de utilizar solamente dos valores de la función, se necesitarán tres valores de la función para detectar si existe un mínimo. Después hay que tomar un cuarto punto y la prueba para el mínimo podrá aplicarse para determinar si el mínimo se encuentra dentro de los dos primeros o en los últimos tres puntos.

El objetivo es minimizar una función en intervalo (a,b) partiendo de dos valores x_1, x_2 tales que:

$$l_2 = b - x_1, l_1 = x_1 - a \quad (4.2)$$

Esto se logra especificando las siguientes dos condiciones:

$$l_0 = l_1 + l_2 \quad (4.3)$$

$$\frac{l_1}{l_0} = \frac{l_2}{l_1} = R \quad (4.4)$$

donde l_0 , l_1 y l_2 son definidas como distancias (Figura 4.3). La primera condición específica que la suma de las dos sub-longitudes debe ser igual a la longitud total. La segunda condición indica que:

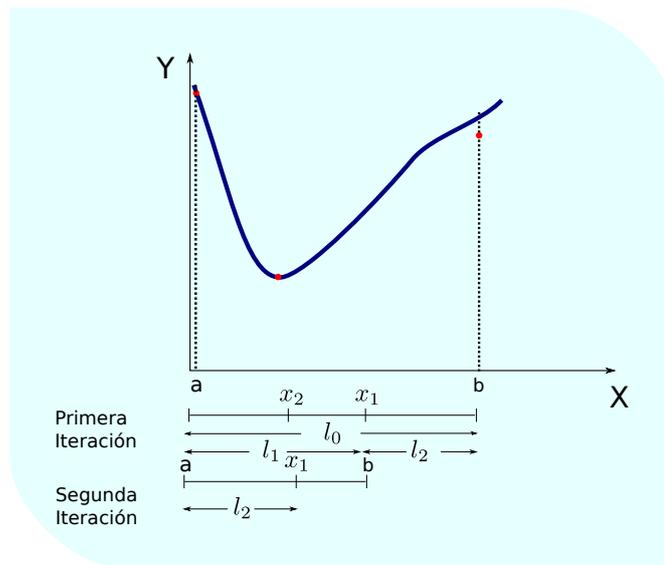


Figura 4.3: Búsqueda de la sección dorada

$$\frac{l_1}{l_1 + l_2} = \frac{l_2}{l_1} \quad (4.5)$$

Si reordenamos en (4.5) y realizamos las operaciones correspondientes:

$$R^2 + R - 1 = 0 \quad (4.6)$$

que conduce a $R = 0.618803$, a este término se lo conoce con el nombre de la razón dorada, el cuál es elemento clave del método.

El algoritmo para implementar este procedimiento empieza con un intervalo dado $[a^{iter}, b^{iter}]$. Posteriormente se escogen dos puntos interiores de acuerdo con la razón dorada:

$$\begin{aligned} x_1^{iter} &= b^{iter} - R(b^{iter} - a^{iter}) \\ x_2^{iter} &= a^{iter} + R(b^{iter} - a^{iter}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Seguidamente se evalúa la función en los dos puntos interiores. De este análisis pueden darse dos casos:

- $f(x_1^{iter}) < f(x_2^{iter})$. El nuevo intervalo de incertidumbre será $[a, x_2]$ y los nuevos puntos a evaluar la función serán $x_2^{iter+1} = x_1$ y x_1^{iter+1} se obtiene de la expresión (4.7).
- $f(x_1^{iter}) > f(x_2^{iter})$. El nuevo intervalo de incertidumbre será $[x_1^{iter}, b^{iter}]$, luego la función se evaluará en los puntos $x_1^{iter+1} = x_2$ y el nuevo x_2^{iter} vendrá dado por la expresión (4.7).

Se continúa con este procedimiento hasta que se determine un intervalo lo suficientemente pequeño donde se encuentre el mínimo.

Interpolación cuadrática. Este algoritmo analiza la búsqueda lineal mediante interpolación cuadrática. El método supone que se minimiza (4.1), y se consideran tres puntos $a < b < c$ de manera que se cumpla:

$$f(a) \geq f(b) \leq f(c) \quad (4.8)$$

Se observa en la Figura 4.4 que al menos una de las dos desigualdades anteriores se cumple estrictamente. En caso contrario, por convexidad, f sería constante y todos los puntos del intervalo $[a, c]$ serían mínimos. Posteriormente se ajusta una parábola que pase por los puntos $(a, f(a))$, $(b, f(b))$ y $(c, f(c))$. Su vértice viene dado por:

$$v = b - \frac{1}{2} \frac{(b-a)^2[f(b)-f(c)]^2 - (b-c)^2[f(b)-f(a)]}{(b-a)[f(b)-f(c)] - (b-c)[f(b)-f(a)]} \quad (4.9)$$

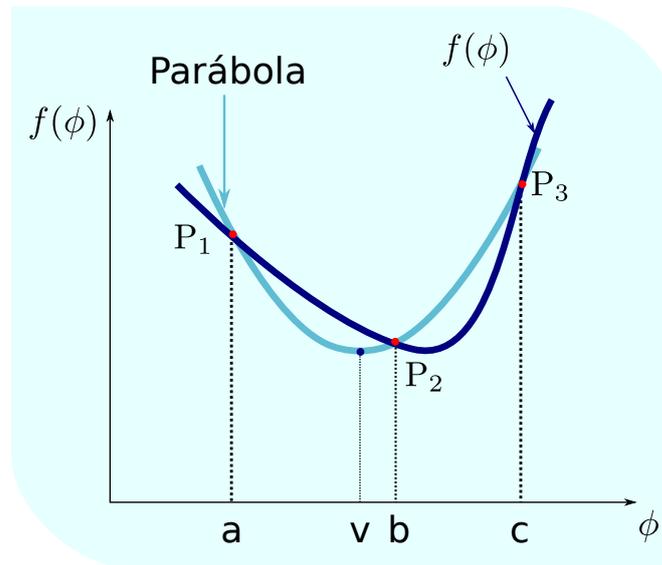


Figura 4.4: Método de búsqueda lineal sin derivadas

Bajo la condición (4.8) nótese que, primero, no puede haber puntos colineales haciendo cero el denominador de (4.9) y, segundo, se garantiza que el vértice sea un mínimo y no lo contrario; además de encontrarse en el intervalo (a, c) .

Con los puntos disponibles $\{a, b, c, v\}$ se puede elegir un nuevo conjunto de tres puntos con los que se puede repetir el proceso, pero recordando que la elección debe realizarse con la condición (4.8). De esta selección surgen tres casos:

Caso 1. Si $v < b$, hay dos posibilidades: a) cuando $f(b) \geq f(v)$ el mínimo de la función f se encuentra en el intervalo (a, b) ; en donde los tres nuevos puntos son $\{a, v, b\}$ (ver Figura 4.5a); b) cuando $f(b) < f(v)$ el mínimo se ubica en el intervalo (v, c) y sus puntos deben ser $\{v, b, c\}$.

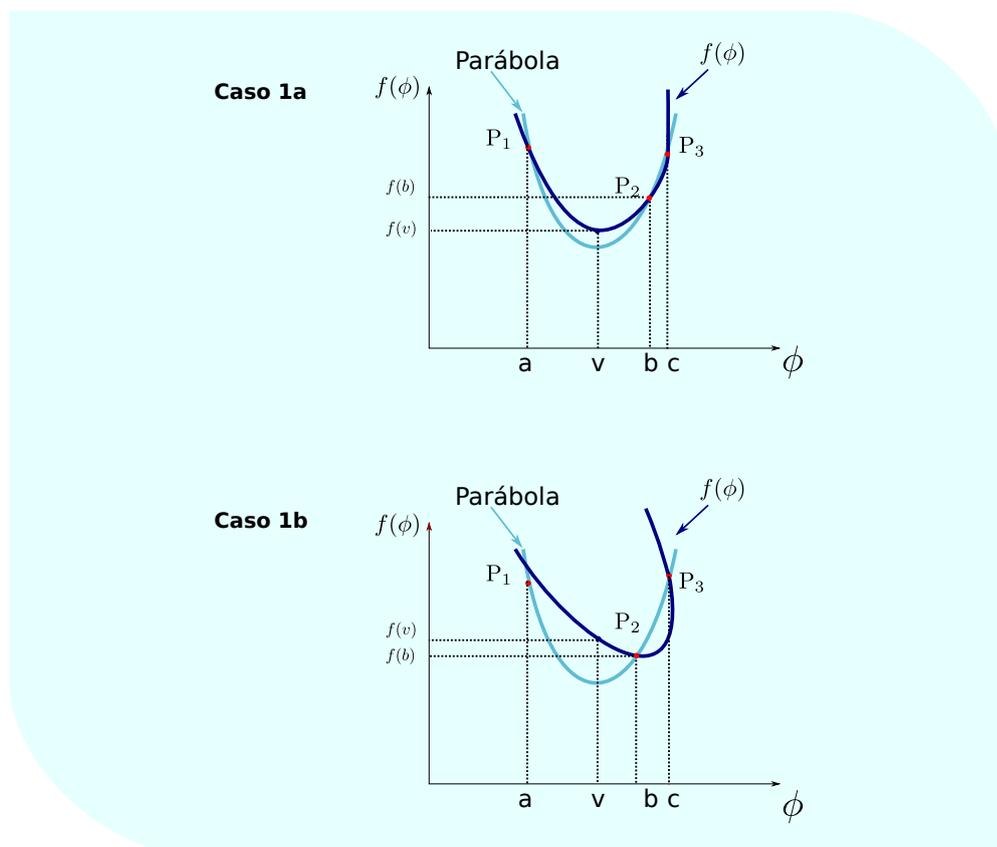


Figura 4.5: Métodos de búsqueda lineal mediante interpolación cuadrática

Caso 2. Si $v > b$, por un argumento similar al caso 1, a) $f(v) \geq f(b)$ de igual forma que antes el mínimo está en el intervalo (a, v) y sus tres puntos elegidos son $\{a, b, v\}$; b) cuando $f(v) < f(b)$ el mínimo está en el intervalo b, c y sus puntos son $\{b, v, c\}$.

Caso 3. Si $v = b$ es imposible definir el intervalo solución. Para solucionar este inconveniente se reemplaza b por $(a + b)/2$ y se repite el proceso, con la garantía de que en este intento se estaría en el caso 1 o 2.

4.2.2 Optimización multidimensional no restringida

En esta sección se describen las técnicas para encontrar el mínimo de una función en varias variables. Como ya se ha comentado, esta categoría se divide dependiendo de si se requiere la evaluación de la derivada. Los procedimientos que no requieren dicha evaluación se llaman métodos sin gradiente o directos. Aquellos que requieren de la derivada se conocen como métodos de gradiente o métodos de descenso o ascenso.

4.2.2.1 Métodos directos

Yendo desde los más simples hasta lo más sofisticados.

Método de la búsqueda aleatoria. El proceso consiste en evaluar en forma repetida la función con los valores seleccionados aleatoriamente de la variable independiente.

Método de búsqueda univariada. Consiste en trabajar sólo con una variable a la vez, para mejorar la aproximación, mientras las otras se mantienen constantes. Debido a que únicamente cambia una variable, el problema se reduce a una secuencia de búsquedas de una dimensión.

Para comprender de mejor forma la búsqueda multidimensional, se debe primero entender cómo se expresan el gradiente, derivada direccional y el hessiano en un contexto multidimensional. Por motivos de simplificación se define tanto el gradiente, derivada direccional y hessiano en dos dimensiones.

Gradiente. El gradiente de una función escalar $f(\phi_1, \phi_2)$ es un campo vectorial que apunta en la dirección de mayor incremento de f y se define como:

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_1}, \frac{\partial f}{\partial \phi_2} \right)^T \quad (4.10)$$

donde ∇ es un operador vectorial, enunciado como nabra y se utiliza para simbolizar la diferenciación parcial en la dirección de cada componente. La magnitud del vector ∇f representa la pendiente local en un punto (ϕ_1, ϕ_2) del campo escalar descrito por f [28].

Derivada direccional. La velocidad de cambio de un campo escalar $f(\phi_1, \phi_2)$ es la derivada de f en una dirección dada por el vector unitario \mathbf{S} y se designa por $\frac{df}{ds}$. Dado que $(\phi_1, \phi_2 = (\phi_1(s), \phi_2(s)))$ mediante la regla de la cadena, la derivada direccional se escribe como:

$$\frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial \phi_1} \frac{d\phi_1}{ds} + \frac{\partial f}{\partial \phi_2} \frac{d\phi_2}{ds} \quad (4.11)$$

Las componentes de \mathbf{s} , tangente a la curva S , están dadas por los cosenos de la dirección de S , es decir:

$$\mathbf{s} = \left(\frac{d\phi_1}{ds}, \frac{d\phi_2}{ds} \right)^T \quad (4.12)$$

Por tanto, la derivada direccional se puede interpretar como la proyección del gradiente del campo \mathbf{S} , es decir,

$$\frac{\partial f}{\partial s} = \mathbf{s} \cdot \nabla f \quad (4.13)$$

El producto escalar (4.13) asume su valor máximo cuando los vectores \mathbf{s} y ∇f son colineales.

Hessiano. Debido a que la primera derivada proporciona la pendiente de la recta tangente en un punto dado a la función escalar $f(\phi_1, \phi_2)$, esto nos da una manera analítica de encontrar valores óptimos de f . Aquella cuya pendiente es cero. La información de si dicho punto es un máximo, mínimo o punto silla, lo proporcionará el hessiano de f .

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_1 \partial \phi_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_2 \partial \phi_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_2^2} \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Suponiendo que las derivadas parciales sean continuas en ϕ_2 cerca del punto que se habrá de evaluar, se puede calcular la siguiente cantidad [100]:

$$|B| = \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_1^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi_2^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi_1 \partial \phi_2} \right)^2 \quad (4.15)$$

presentándose tres casos:

- Si $|B| > 0$ y $\partial^2 f / \partial \phi_1^2 > 0$, entonces $f(\phi_1, \phi_2)$ tiene un mínimo local.
- $|B| > 0$ y $\partial^2 f / \partial \phi_1^2 < 0$, entonces $f(\phi_1, \phi_2)$ tiene un máximo local.
- $|B| < 0$, entonces $f(\phi_1, \phi_2)$ tiene un punto silla.

4.2.2.2 Métodos del gradiente

El problema de minimizar (4.1), se puede resolver mediante los llamados métodos de descenso. La filosofía básica de la mayoría de estos métodos de optimización, es

producir una secuencia de aproximaciones mejoradas al óptimo. La secuencia seguida en este trabajo es:

1. Comenzar con un punto inicial de ϕ^1 (iter=1).
2. Encontrar una dirección adecuada \mathbf{d}^1 que apunte en dirección del óptimo.
3. Encontrar una longitud de paso ϵ para movernos a lo largo de la dirección \mathbf{d}^1 .
4. Obtener una nueva aproximación $\phi^2 = \phi^1 + \epsilon \mathbf{d}^1$ (iter=2).
5. Probar si ϕ^2 es el óptimo. Si se cumple esto, el proceso termina. En caso contrario, hacer $iter = iter + 1$ y regresar al punto 2.
6. Obtener por este procedimiento una nueva aproximación $\phi^{iter+1} = \phi^{iter} + \epsilon \mathbf{d}^{iter}$.
7. Probar si ϕ^{iter+1} es el óptimo. Si se cumple esto, el proceso termina. En caso contrario, hacer $iter = iter + 1$ y regresar al punto 2.

La Figura 4.6 ilustra el proceso iterativo para problemas de optimización multivariable con y sin restricción. La eficiencia del método depende de la elección tanto de la longitud de paso, como de la dirección. Por tanto, del esquema anterior se deducen dos fases fundamentales:

Fase 1. Generación de la dirección de descenso. De un punto inicial ϕ^{iter} , encontramos una dirección \mathbf{d} de modo que un ligero movimiento desde el punto ϕ^{iter} en dicha dirección hace decrecer el valor de la función objetivo. El procedimiento de obtener una dirección de descenso adecuada puede realizarse por diferentes métodos tales como: el método de máxima inclinación, método de gradientes conjugados, método de Newton, o por el método quasi-Newton.

Fase 2. Búsqueda de la longitud de paso. Una vez encontrada la dirección de descenso de f en el punto ϕ^{iter} , se debe decidir cuánto hay que desplazarse en esa dirección. Este avance se denomina longitud de paso (ϵ). El nuevo valor encontrado después de la actualización respectiva será una cantidad menor que el valor en el punto original ϕ^{iter} [6].

1. Método de paso ascendente/descendente. Esta técnica emplea como dirección de descenso en el punto ϕ^{iter} la dirección $\mathbf{d}^{iter} = -\nabla f(\phi^{iter})$. Para mostrar que $\nabla f(\phi^{iter})$ es de descenso recurrimos al siguiente lema:

Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciable en $\phi \in \mathbb{R}^n$. Sea \mathbf{d} un vector de \mathbb{R}^n . Si $\nabla f(\phi)^T \mathbf{d} < 0$, entonces \mathbf{d} es una dirección de descenso de f en ϕ .

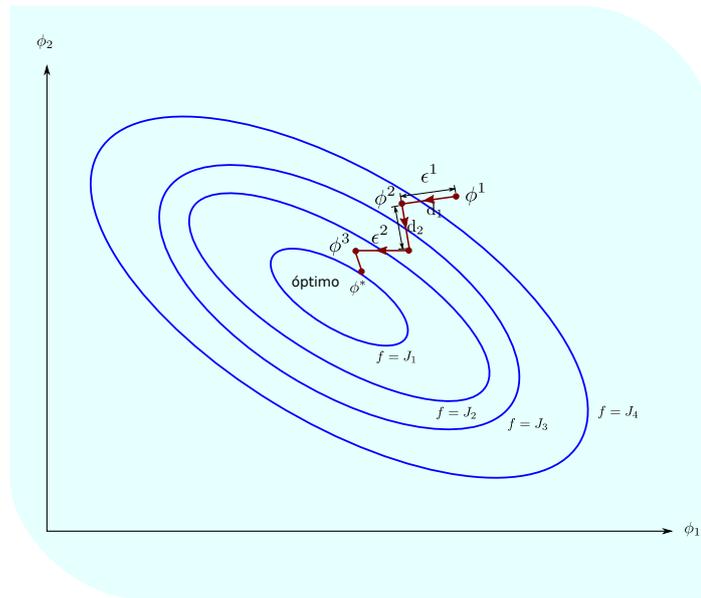


Figura 4.6: Método del proceso de iteración de optimización

En el método del gradiente o máximo descenso la transición de un punto ϕ^{iter} a otro ϕ^{iter+1} viene dado por la expresión:

$$\phi^{iter+1} = \phi^{iter} + \Delta\phi^{iter} = \phi^{iter} + \epsilon^{iter} \mathbf{d}^{iter} = \phi^{iter} - \epsilon^{iter} \nabla f(\phi^{iter}) \quad (4.16)$$

La principal dificultad con la segunda aproximación es que, a menudo, no se sabe a priori qué valor debe tomar la longitud de paso (ϵ). Para este inconveniente existen técnicas (como el método de la sección dorada) que permiten calcular de forma eficiente la longitud de paso.

Con el método descrito se consiguen progresos muy satisfactorios en la reducción de $f(\phi)$ en las primeras iteraciones, mientras que, en las últimas iteraciones tiende a hacerse muy lento, alargando los cálculos. Por otra parte, la dificultad básica del método de máximo descenso es que es muy sensible al escalado de $f(\phi)$, por lo que la convergencia podría ser muy lenta y producirse un número no despreciable de oscilaciones.

2. Método de gradiente conjugado (Fletcher-Reeves). Se puede demostrar que un método de optimización que usa gradientes conjugados para definir la dirección de búsqueda es cuadráticamente convergente. Esto asegurará que el método optimizará una función cuadrática exactamente en un número finito de pasos sin importar el punto de inicio. El algoritmo del gradiente conjugado de Fletcher-Reeves modifica el método de paso ascendente al imponer la condición de que sucesivas direcciones de búsqueda del gradiente sean mutuamente conjugadas. Más detalles del algoritmo se pueden encontrar en [101].

3. Método de Newton. Este método hace uso de la aproximación de segundo orden de la función utilizando las derivadas segundas con respecto a cada una de las variables dependientes. De esta forma se tiene en cuenta la curvatura de la función en el punto y se identifican mejor las direcciones de búsqueda.

Si $f(\phi)$ es una función cuadrática, el mínimo se alcanza en un único paso. Sin embargo, para una función general no lineal, se necesitarán más pasos para alcanzar el óptimo. La expresión de actualización de ϕ^{iter} incluyendo la longitud de paso para este método se expresa como:

$$\phi^{iter} = \phi^{iter} - \epsilon^{iter} [\nabla^2 f(\phi^{iter})]^{-1} \nabla f(\phi^{iter}) \quad (4.17)$$

Es decir, que la dirección \mathbf{d} para esta aproximación viene dada por:

$$\mathbf{d}^{iter} = - [\nabla^2 f(\phi^{iter})]^{-1} \nabla f(\phi^{iter}) \quad (4.18)$$

El método de Newton es el método de minimización más rápido. La ventaja está en la convergencia cuadrática en la vecindad del óptimo, donde la función objetivo puede ser aproximada bien por una función cuadrática. Sus principales desventajas son:

- La aproximación no necesariamente encuentra un óptimo global.
- Requiere la inversión de matrices o la resolución de un sistema de n ecuaciones lineales.
- Necesita de la primera y segunda derivada.
- Tiende a un punto silla si la matriz hessiana no es definida positiva.

4. Métodos quasi-Newton. En este caso la matriz hessiana se aproxima por una matriz hessiana positiva \mathbf{B}^{iter} , que se actualiza sucesivamente convergiendo a la verdadera matriz hessiana. Esta dirección se calcula mediante la expresión:

$$\mathbf{d}^{iter} = - [\mathbf{B}^{iter}]^{-1} \nabla f(\phi^{iter}) \quad (4.19)$$

Se han desarrollado varias fórmulas para actualizar las matrices hessianas. Sin embargo, en la práctica se ha demostrado que existen dos actualizaciones que dan mejores resultados: las actualizaciones de Devidon-Fletcher-Powell (DFP) y la de Broyden-Fletcher-Goldfarb y Shanno (BFGS). Más detalles de estas aproximaciones se pueden consultar en [85].

4.3 Métodos adjuntos

El método adjunto es un método numérico para calcular eficientemente el gradiente de un funcional en un problema de optimización numérica. Los métodos de búsqueda con derivada frecuentemente se basan en la aproximación adjunta, la misma que es capaz de calcular las sensibilidades de la función objetivo con respecto a las variables de diseño. La aproximación adjunta aparece en dos formulaciones diferentes: la continua y la discreta. En la primera aproximación las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) adjuntas se forman a partir de las EDP del flujo correspondiente, posteriormente se discretizan y se resuelven numéricamente para calcular el campo de las variables adjuntas. Por otra parte, en el adjunto discreto, las ecuaciones se obtienen directamente de las EDP del flujo discretizado.

En este estudio se introduce el origen de la ecuación adjunta continua. Sobre esta base, se desarrolla el problema de diseño inverso adjunto para minimizar la función objetivo deseada. Una de las ventajas de este método es que al usar la forma dual del problema de optimización se calcula el gradiente muy rápido. La superioridad con respecto a los algoritmos evolutivos radica en el hecho de que el gradiente apunta hacia una mejor solución. Sin embargo, también existen ventajas de los métodos evolutivos que se salen del alcance de este capítulo [7, 39].

Una vez sentadas las bases de la teoría de control y definido el camino de la metodología a seguir en materia de optimización, el próximo paso es conocer sobre qué ecuación diferencial parcial se requiere establecer el control. Para este caso, relacionando con el objetivo principal de este trabajo (aplicaciones ambientales), la ecuación que permite predecir la concentración de un contaminante es la ya conocida ecuación de transporte. El objetivo será minimizar una función objetivo (constante y variable en el tiempo) con el fin de reconstruir la condición de contorno, una fuente puntual, una condición inicial o un parámetro de la ecuación del balance de la energía. Para este fin, el estudio se inicia derivando la ecuación adjunta de transporte cuando la velocidad del término convectivo se mantiene constante. El desarrollo previo será la base para encontrar un sistema adjunto que relacione un modelo de calidad que permita aproximar los procesos más relevantes que tienen lugar en un sistema físico real.

4.3.1 Ecuación adjunta del transporte con velocidad constante

El interés en el desarrollo de la ecuación adjunta del transporte de solutos se basa en el principio de dualidad entre la ecuación principal y la ecuación adjunta. En este

apartado se describe el procedimiento para encontrar la ecuación adjunta del transporte únicamente con los procesos de convección y reacción a velocidad constante. La primera formulación que se describirá servirá para reconstruir la condición de contorno de una sola variable de estado, seguidamente se explica la reconstrucción de una fuente puntual y finalmente se formula la reconstrucción de la condición inicial.

Formulación adjunta para reconstruir la condición de contorno

El objetivo del método adjunto, definido comúnmente como un problema inverso, consiste en buscar un conjunto de parámetros para que la función objetivo (4.1), que mide los desajustes entre los resultados del modelo directo y los observados, se vuelva mínima. En el escenario actual, la finalidad es conseguir una concentración deseada de un soluto en un tiempo t y en una ubicación objetivo x_M . Por tanto, el funcional se puede re-escribir como:

$$J = f(\phi(x, t)) = \left(\frac{1}{2N_T} \sum_{p=1}^{N_T} (\phi_p - \phi_{op})^2 \right) \quad (4.20)$$

o de forma continua como:

$$J(\phi) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^L [\delta(x - x_M)(\phi_p - \phi_{o,p})^2] dx dt \quad (4.21)$$

donde $\delta(x - x_t)$ es la función delta de Dirac. Para encontrar la sensibilidad de la ecuación (4.20) con respecto a la condición de contorno una opción es resolver la ecuación adjunta. Con el objeto de encontrar la ecuación adjunta del transporte convectivo con velocidad constante, la ecuación física

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = r\phi + S \quad (4.22)$$

se multiplica por alguna función σ que llamaremos función adjunta. Esta función debe ser diferenciable en el tiempo y en el espacio al menos una vez [71]. La expresión resultante integrada en el tiempo y en el espacio queda:

$$I = \int_0^T \int_0^L \sigma \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - r\phi - S \right] dx dt = 0 \quad (4.23)$$

donde T es el tiempo final de simulación y L la longitud del dominio espacial. Haciendo uso de la integración por partes, la expresión (4.23) se expresa como:

$$\begin{aligned}
I = & \int_0^L \sigma \phi \Big|_0^T dx - \int_0^T \int_0^L \phi \frac{\partial \sigma}{\partial t} dx dt + \int_0^T \sigma u \phi \Big|_0^L dt - \int_0^T \int_0^L \phi u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \\
& \int_0^T \int_0^L \sigma r \phi dx dt - \int_0^T \int_0^L \sigma S dx dt = 0
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Con el paso anterior se logra transformar las derivadas espacial y temporal de la variable física a la variable adjunta. Además nos permite redefinir el funcional como $J = J + I$.

El siguiente paso es aplicar el método de aproximación variacional que simbolizamos $\delta J = \delta J + \delta I$. Si deseamos hallar la sensibilidad de J con respecto a la condición de contorno de la variable ϕ se toma variación sobre ϕ de tal forma que (4.24) se puede expresar como:

$$\begin{aligned}
\delta I = & \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \sigma r \right] \delta \phi dx dt \\
& + \int_0^L \sigma \delta \phi \Big|_0^T dx + \int_0^T \sigma u \delta \phi \Big|_0^L dt = 0
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Por otra parte, de la ecuación (4.21) también es posible tomar la variación con respecto a ϕ . La expresión resultante es:

$$\delta J = \int_0^T \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi dx dt \tag{4.26}$$

Vale la pena mencionar que el término S desaparece de la ecuación (4.25) porque no depende de la variable de estado ϕ . Con el fin de eliminar algunas integrales de (4.25) consideramos ciertas condiciones iniciales aceptables dadas por un estado originalmente no perturbado para $\delta \phi$:

$$\begin{aligned}
\delta \phi(x, T) &= 0 \\
\delta \phi(x, 0) &= 0
\end{aligned} \tag{4.27}$$

y una condición de contorno para $\delta \phi$ dada por:

$$\delta \phi(L, t) = 0 \tag{4.28}$$

Además, si hacemos uso de estas restricciones en el problema adjunto, forzamos a desaparecer las sensibilidades de:

$$\sigma(L, t) = 0 \tag{4.29}$$

Si finalmente incluimos (4.25) previamente aplicando las restricciones (4.27), (4.28) y (4.29) en la ecuación (4.26) configuramos la expresión final de la variación del funcional.

$$\begin{aligned} \delta J = \delta J + \delta I = & \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \sigma r \right] \delta \phi dx dt + \int_0^T \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi \\ & + \int_0^T \sigma u \delta \phi \Big|_0^L dt \end{aligned} \quad (4.30)$$

Si se asume que σ satisface la ecuación adjunta:

$$-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \phi} - \sigma r = 0 \quad (4.31)$$

encontramos la sensibilidad de J con respecto a la condición de contorno de la variable de estado en estudio:

$$\nabla J(\phi) = \frac{\delta J}{\delta \phi} \Big|_{(0,t)} = -u\sigma(0, t) \quad (4.32)$$

Del desarrollo anterior, por un lado tenemos la ecuación adjunta (4.31) del transporte de un soluto con reacción cuya resolución numérica permite conocer $\sigma(x, t)$ y por otro la dirección de descenso (4.32) necesaria para el método de optimización que se apoya en $\sigma(0, t)$. Sustituyendo la dirección de descenso en la ecuación (4.16) se tiene que:

$$\phi(0, t)^{iter+1} = \phi(0, t)^{iter} + \epsilon^{iter} u\sigma(0, t)^{iter} \quad (4.33)$$

Con la expresión (4.86) configuramos el método iterativo para recuperar la información de la condición de contorno, en otras palabras repetir (4.86) hasta que converja.

Al comparar la ecuación adjunta (4.31) con la ecuación física (4.22) se observa una similitud formal excepto en la ausencia del término S , la inclusión de un signo negativo en las derivadas y la imposición de una condición de contorno en el lado derecho en lugar del lado izquierdo del dominio. De las diferencias consideradas, las dos últimas, indican la inversión en la dirección del flujo de información en comparación con el problema principal como se mencionó en la sección 2.2.2.1.

Por otra parte, (4.32) representa la sensibilidad del funcional con respecto a las perturbaciones del término $\delta \phi$ (contorno). Algunas otras implicaciones de esta expresión son:

- No es necesario realizar la integración del funcional en el espacio debido a que la información para $\delta \phi(0, t)$ se obtiene desde un único punto (contorno).

- La sensibilidad de J con respecto al contorno se puede extraer directamente del modelo adjunto, y viene dada por el vector solución de la variable adjunta correspondiente.

- Toda la información de la sensibilidad está disponible en todos los tiempos porque las ecuaciones adjuntas se resuelven simultáneamente.

- El gradiente de una función en el punto x_M es la dirección de máxima variación para la función J en ϕ .

Formulación adjunta para reconstruir una fuente

El desarrollo de la formulación adjunta para recuperar la información de una fuente tiene como partida la ecuación (4.24). Si ahora el interés se centra en reconstruir una fuente situada en x_s , se toma la variación con respecto de ϕ y de S , resultando:

$$J = J + I \Rightarrow \delta J = \delta J + \delta I$$

donde

$$\begin{aligned} \delta I = & \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \sigma r \right] \delta \phi dx dt \\ & + \int_0^L \sigma \delta \phi \Big|_0^T dx + \int_0^T \sigma u \delta \phi \Big|_0^L dt - \int_0^T \int_0^L \sigma \delta S dx dt = 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

y

$$\delta J = \int_0^T \int_0^L \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi dx dt$$

Imponiendo las restricciones iniciales (4.27) y unas nuevas en el contorno dadas por:

$$\begin{aligned} \delta \phi(x, 0) &= 0 \\ \delta \sigma(0, t) &= 0 \end{aligned} \quad (4.35)$$

Y aplicando las restricciones establecidas previamente sobre (4.34) resulta:

$$\delta J = \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \sigma r + \frac{\partial f}{\partial \phi} \right] \delta \phi dx dt - \int_0^T \int_0^L \sigma \delta S dx dt = 0 \quad (4.36)$$

Si se verifica la ecuación diferencial adjunta:

$$-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \phi} - \sigma r = 0$$

se obtiene el gradiente necesario para el método de máximo descenso cuando se quiere reconstruir una fuente:

$$\nabla J(S) = \left. \frac{\delta J}{\delta S} \right|_{(x_s, t)} = -\sigma(x_s, t) \quad (4.37)$$

La expresión (4.37) se interpreta como las variaciones que sufre J sobre una perturbación ubicada en cualquier punto del dominio. La configuración del método iterativo para esta nueva formulación se expresa como:

$$S(t)^{iter+1} = S(t)^{iter} + \epsilon^{iter} \sigma(x_s, t) \quad (4.38)$$

Formulación adjunta para reconstruir la condición inicial

Es posible usar la metodología adjunta para reconstruir la condición inicial de un problema físico. Nuevamente, la ecuación (4.24) será el punto de partida.

El primer paso para encontrar las sensibilidades de J con respecto a la condición inicial es tomar variación de la ecuación (4.24) con respecto a ϕ de modo que el resultado será:

$$\delta I = \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \sigma r \right] \delta \phi dx dt + \int_0^L \sigma \delta \phi \Big|_0^T dx + \int_0^T \sigma u \delta \phi \Big|_0^L dt = 0 \quad (4.39)$$

Otra vez, el término S esta ausente en la expresión (4.39) debido a la misma razón comentada en la formulación para reconstruir la condición de contorno de un soluto genérico. El próximo paso en este desarrollo es considerar ciertas restricciones que anulen las condiciones de contorno de (4.39):

$$\begin{aligned} \delta \phi(0, t) &= 0 \\ \delta \phi(L, t) &= 0 \\ \delta \sigma(0, t) &= 0 \\ \delta \sigma(L, t) &= 0 \\ \sigma(x, T) &= 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Aplicando las restricciones (4.40) sobre (4.39) e incluyendo la variación de la función objetivo, la expresión resultante es:

$$\begin{aligned} \delta J = \delta I + \delta J &= \int_0^T \int_0^L \left[-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \sigma r + \frac{\partial f}{\partial \phi} \right] \delta \phi dx dt \\ &\quad - \int_0^L \sigma(x, 0) \delta \phi(x, 0) dx \end{aligned} \quad (4.41)$$

Por tanto el gradiente puede expresarse como:

$$\nabla J = \frac{\delta J}{\delta \phi(x, 0)} = -\sigma(x, 0) \quad (4.42)$$

si se verifica:

$$-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \sigma r + \frac{\partial f}{\partial \phi} = 0 \quad (4.43)$$

De esta forma, la regulación puede ser aplicada por medio de una perturbación en el valor de $\phi(x, 0)$ usando la versión discreta (4.42) para cada tiempo $t \in (0, T)$. Tomando en cuenta esta definición, el valor de la condición inicial se calculará iterativamente mediante la formulación siguiente:

$$\phi(x, 0)^{iter+1} = \phi(x, 0)^{iter} + \epsilon^{iter} \sigma(x, 0)^{iter} \quad (4.44)$$

4.3.2 Ecuación adjunta del transporte con velocidad variable y difusión

La técnica de optimización basada en variables adjuntas puede aplicarse a problemas más complejos en los que el transporte se produce sobre un flujo no uniforme y no estacionario. El proceso de encontrar la formulación adjunta de este caso es similar al propuesto en la sección anterior. La diferencias están, primero, en la presencia del término de difusión que debe ser integrado por partes dos veces, y segundo en la velocidad del flujo que no es constante.

Considerando la ecuación del tipo (2.28):

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + Ar\phi + S$$

Si procedemos igual que antes, la ecuación de transporte debe multiplicarse por una función σ

$$I = \int_0^T \int_0^L \sigma \left[\frac{\partial(A\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi)}{\partial x} - E \frac{\partial}{\partial x} \left(A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - Ar\phi - S \right] dx dt = 0 \quad (4.45)$$

Usando la integración por partes de la expresión (4.45), resulta que

$$\begin{aligned} I = & \int_0^L \sigma A \phi \Big|_0^T dx - \int_0^T \int_0^L A \phi \frac{\partial \sigma}{\partial t} dx dt + \int_0^T \sigma Q \phi \Big|_0^L dt - \int_0^T \int_0^L \phi Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - \\ & \int_0^T \sigma A E \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_0^L dt + \int_0^T A \phi E \frac{\partial \sigma}{\partial x} \Big|_0^L dt - \int_0^T \int_0^L A \phi E \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} \\ & - \int_0^T \int_0^L \sigma A r \phi dx dt - \int_0^T \int_0^L \sigma S dx dt = 0 \end{aligned} \quad (4.46)$$

En este apartado se desarrolla únicamente el caso de reconstruir la condición de contorno aguas arriba. El proceso de reconstruir la condición inicial o una fuente es completamente análogo al explicado en la sección anterior. Realizando, la variación sobre ϕ la expresión resultante es:

$$\begin{aligned} \delta I = & \int_0^T \int_0^L \left[-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - AE \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - A\sigma r \right] \delta \phi dx dt \\ & - \int_0^T \sigma AE \frac{\partial \phi}{\partial x} \delta \phi \Big|_0^L dt + \int_0^T AE \frac{\partial \sigma}{\partial x} \delta \phi \Big|_0^L dt \\ & + \int_0^L \sigma A \delta \phi \Big|_0^T dx + \int_0^T \sigma Q \delta \phi \Big|_0^L dt = 0 \end{aligned} \quad (4.47)$$

Del mismo modo, es necesario imponer condiciones iniciales para $\delta \phi$:

$$\begin{aligned} \delta \phi(x, T) &= 0 \\ \delta \phi(x, 0) &= 0 \end{aligned} \quad (4.48)$$

y de contorno para $\delta \phi$ y E :

$$\begin{aligned} \delta \phi(L, t) &= 0 \\ E(0, t) &= 0 \end{aligned} \quad (4.49)$$

al mismo tiempo que para la variable adjunta:

$$\begin{aligned} \sigma(x, T) &= 0 \\ \sigma(L, t) &= 0 \end{aligned} \quad (4.50)$$

Si ahora relacionamos la ecuación (4.47) aplicando las condiciones (4.48, 4.49 y 4.50) con la función objetivo (4.26), se obtiene la expresión:

$$\begin{aligned} \delta J = \delta J + \delta I = & \int_0^T \int_0^L \left[-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - AE \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - \frac{\partial f}{\partial \phi} - A\sigma r \right] \delta \phi dx dt \\ & + \int_0^T \sigma Q \delta \phi \Big|_0^L dt \end{aligned} \quad (4.51)$$

Por lo tanto, si se cumple la siguiente ecuación diferencial:

$$\underbrace{-A \frac{\partial \sigma}{\partial t}}_{\text{convección}} - \underbrace{Q \frac{\partial \sigma}{\partial x}}_{\text{difusión}} - \underbrace{AE \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}}_{\text{funcional/degradación}} - \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \phi}}_{\text{funcional/degradación}} - A\sigma r = 0 \quad (4.52)$$

las sensibilidades del funcional con respecto a la condición de contorno son:

$$\nabla J(\phi) = \left. \frac{\delta J}{\delta \phi} \right|_{(0,t)} = -Q\sigma(0, t) \quad (4.53)$$

Finalmente, el método iterativo para reconstruir la condición de contorno con los procesos de convección-difusión con $u \neq \text{constate}$ se expresa como:

$$\phi(0, t)^{iter+1} = \phi(0, t)^{iter} + \epsilon^{iter} Q\sigma(0, t)^{iter} \quad (4.54)$$

4.3.3 Discretización de la ecuación adjunta de convección-difusión y reacción con velocidad variable

Para la discretización de la ecuación adjunta de convección-difusión y reacción (4.52) hacemos uso del conocimiento previo adquirido en la sección 2.2.4. En esta metodología, el proceso de convección se puede discretizar mediante un esquema explícito de primer orden, el proceso de difusión mediante un esquema implícito y el término de reacción de manera centrada. Esta misma filosofía se trasladará a la ecuación adjunta.

El término $\frac{\partial f}{\partial \phi}$ actúa de forma similar al término fuente (S) de la ecuación física porque se inyecta una cantidad en un único punto del dominio y en un intervalo de tiempo determinado. El proceso de actualización de la variable adjunta también se realizará en tres fases.

$$-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - \underbrace{Q \frac{\partial \sigma}{\partial x}}_{\text{convección}} - \underbrace{AE \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}}_{\text{difusión}} - \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \phi} - A\sigma r}_{\text{funcional/degradación}} = 0$$

El primer paso en la discretización es desarrollar el proceso de convección. Si la ecuación (4.52) se divide para el área, el resultado es el siguiente:

$$-\frac{\partial \sigma}{\partial t} - u \frac{\partial \sigma}{\partial x} = S_a \quad (4.55)$$

donde $S_a = \frac{1}{A} \frac{\partial f}{\partial \phi} = (\phi_p - \phi_{o,p})/A$. Discretizando de forma explícita la ecuación (4.55) resulta que:

$$\sigma_i^* = \sigma_i^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(u^- \delta \sigma)_{i-1/2}^{n+1} + (u^+ \delta \sigma)_{i+1/2}^{n+1} \right] + (S_a)_i^{n+1} \Delta t \quad (4.56)$$

De la ecuación (4.56) se observa el cambio en el signo de los flujos así como la permutación de la dirección upwind con respecto a la ecuación principal. Esto quiere decir

que la ecuación adjunta debe ser resuelta *hacia atrás en el tiempo* donde el tiempo es actualizado como $t^n = t^{n+1} - \Delta t$ (Figura 4.7).

El término de reacción, se representa por medio de una discretización centrada en la celda definida como:

$$\sigma_i^{**} = \sigma_i^* + (\sigma r)_i^* \Delta t \quad (4.57)$$

Finalmente, si el término de difusión se realiza mediante un esquema implícito, el sistema que resulta después de las operaciones respectivas es:

$$-\sigma_{i+1}^n \frac{E\Delta x}{\Delta x^2} + \sigma_i^n \left(1 + \frac{2E\Delta t}{\Delta x^2}\right) - \sigma_{i-1}^n \frac{E\Delta t}{\Delta x^2} = \sigma_i^{**} \quad (4.58)$$

Con lo desarrollado previamente se verifica que el esquema de la ecuación adjunta es afín al de la ecuación física. La única diferencia entre las ecuaciones (2.93) y (4.58) está en el modo de resolución. La primera se resuelve conociendo la solución en $t = 0$ y averiguando la variable dependiente en un tiempo Δt . En otras palabras, vamos encontrando la evolución tanto temporal como espacial de la variable dependiente resolviendo (2.93) hacia adelante. En cambio, para encontrar la evolución de σ se resuelve el sistema desde el tiempo final de simulación hacia el tiempo inicial, es decir, la integración de la ecuación diferencial adjunta se determina hacia atrás en el tiempo. Una representación de esta discretización se ilustra en la Figura 4.7.

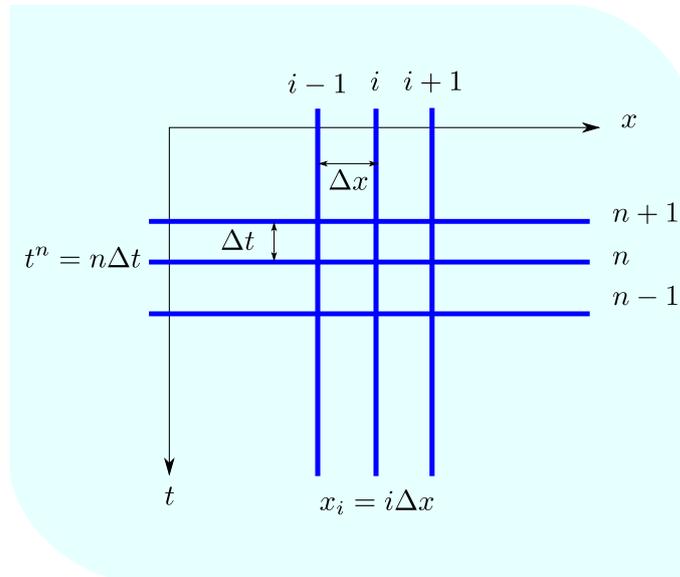


Figura 4.7: Discretización del tiempo y espacio de la ecuación adjunta

La Figura 4.7 muestra el eje x discretizado con N intervalos espaciales constantes (Δx) mientras que el eje del tiempo se subdivide en intervalos de tiempo (Δt) diferente.

Para comprobar las bondades y debilidades del método adjunto será necesario compararlo en situaciones reales con otros algoritmos de optimización disponibles en la literatura. En este caso se usará la biblioteca de código abierto/libre para la optimización no lineal NLOpt.

4.3.4 Optimización no lineal NLOpt

NLOpt proporciona una interfaz común para una serie de rutinas de optimización gratuitas. Entre las características más notables de esta librería se encuentran que:

- Se puede llamar desde C, C++, Matlab u Octave, Python, Julia, Lua, Ocaml y Rust.
- Se pueden probar diferentes algoritmos simplemente cambiando un parámetro.
- Existe un soporte para una optimización a gran escala.
- Cuenta con algoritmos de optimización tanto globales como locales.
- Cuenta con algoritmos que usan solo valores de función (sin derivadas) y también con algoritmos que explotan gradientes proporcionados por el usuario.
- Cuenta con algoritmos para la optimización sin restricción, restricciones generales de desigualdad, etc.
- Es software libre aunque existen licencias más flexibles para algunas subrutinas.

Una descripción general de los problemas de optimización que resuelve NLOpt son:

Optimización global. Encuentra la concentración ϕ que minimiza la función objetivo J en toda la región factible. NLOpt incluye varios algoritmos de optimización global que funcionan bien en problemas de buen comportamiento, sino es demasiado grande el número de puntos discretos de la función a reconstruir d .

Todos los algoritmos de esta clasificación actualmente requieren que se especifique restricciones de límite en todos los parámetros de optimización. Dentro de los algoritmos de optimización global de NLOpt están:

- DIRECT y DIRECL-L.
- Búsqueda aleatoria controlada (BAC) con mutación local.
- Enlace único multinivel (EUM).
- StoGO.
- AGS.

- Estrategias de evolución de clasificación estocástica mejorada (EECEM).
- Algoritmo evolutivo (ESCH).

De estos algoritmos EECEM, AGS Y ORIG-DIREC, admiten restricciones de desigualdad no lineal, mientras que ISRES admite también restricciones de igualdad no lineal.

Optimización local. Como se ha comentado un problema de optimización no-lineal puede contener muchos mínimos locales, determinar estos mínimos depende en gran medida del punto de partida que el usuario proporcione al algoritmo. Dentro de este tipo se clasifican en: optimización local libre de derivadas y optimización local basadas en el gradiente.

Optimización local libre de derivadas. Este algoritmo solo requiere que el usuario proporcione los valores de la función objetivo J para cualquier concentración ϕ . Sin embargo, generalmente requieren mucho esfuerzo computacional.

Optimización local basada en el gradiente. Estos algoritmos generalmente son más eficientes pero requieren que el usuario suministre el gradiente ∇J además del valor de la función objetivo. En principio, el gradiente casi siempre se puede calcular al mismo tiempo que el valor de J usando muy poco esfuerzo computacional adicional. Si la derivada no es obvia, normalmente se encuentra ∇J usando un método adjunto, o posiblemente usando herramientas de diferenciación automática.

4.3.4.1 Comparación de técnicas de método adjunto y NLopt

En este apartado se describe la secuencia que se sigue en este trabajo para recuperar la información tanto de una fuente, condición de contorno como de la condición inicial con el método adjunto. Además se ilustra la secuencia de recuperación de la información solo de la condición de contorno con la librería de optimización NLopt.

Esquema general de optimización basado en el método adjunto

Esta formulación permitirá de forma eficiente detectar las sensibilidades del funcional con respecto a la variable de interés. La Figura 4.8 indica la lógica que sigue el algoritmo de optimización usando la información de la derivada (método adjunto).

Los pasos de la Figura 4.8 son:

1. Leer las condiciones iniciales y de contorno tanto hidrodinámicas como de calidad. Simular hacia adelante y registrar la información de las variables hidrodinámicas (A , Q y h) y el Δt en todos los tiempos y en todos los puntos además de

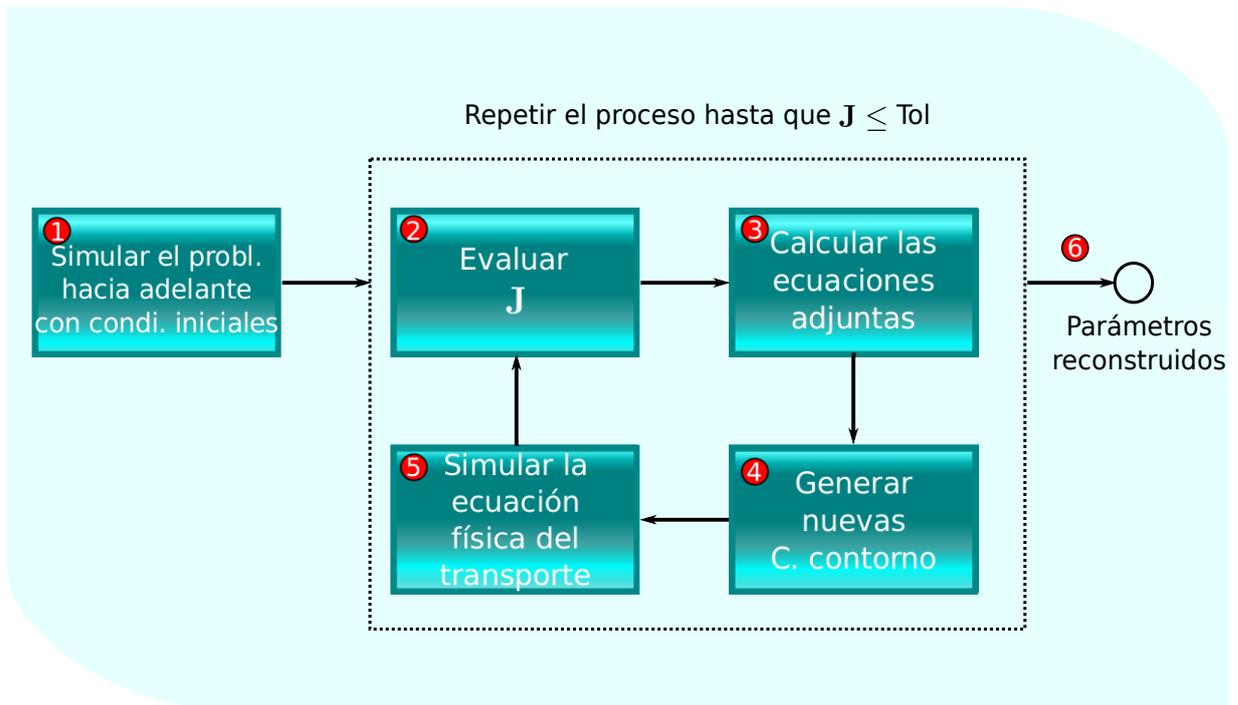


Figura 4.8: Esquema general de optimización basado en el método adjunto para reconstruir la condición de contorno

- la concentración en el punto de medida a los largo del tiempo con las condiciones de contorno propuestas para el soluto.
2. Evaluar el funcional J a partir de los datos temporales ϕ_M mediante la ecuación (4.20).
 3. Resolver la ecuación adjunta. Con la información previamente almacenada en el paso 1 se resuelve la ecuación adjunta hacia atrás en el tiempo con la ecuación (4.58).
 4. Generar el nuevo control. Con la sensibilidad determinada mediante el método adjunto se generan las nuevas condiciones de contorno a través del método del gradiente ecuación (4.54).
 5. Simular la ecuación de transporte hacia adelante. Con la información hidrodinámica de la primera iteración y con las condiciones de contorno generadas en el paso 4, se calcula de nuevo el transporte del soluto.
 6. El último paso consiste en evaluar una vez más el funcional. Si es menor que una tolerancia (Tol) termina el proceso y el algoritmo devuelve los valores

de las variables de estado en el contorno optimizadas (paso 6). En caso contrario, se repite los pasos 3, 4, y 5.

Esquema general de optimización basado con NLOpt

Por otro lado, la librería de optimización no lineal proporciona el mínimo de la función deseada mediante evaluaciones de la función objetivo. La implementación de esta subrutina se ilustra en la Figura 4.9.

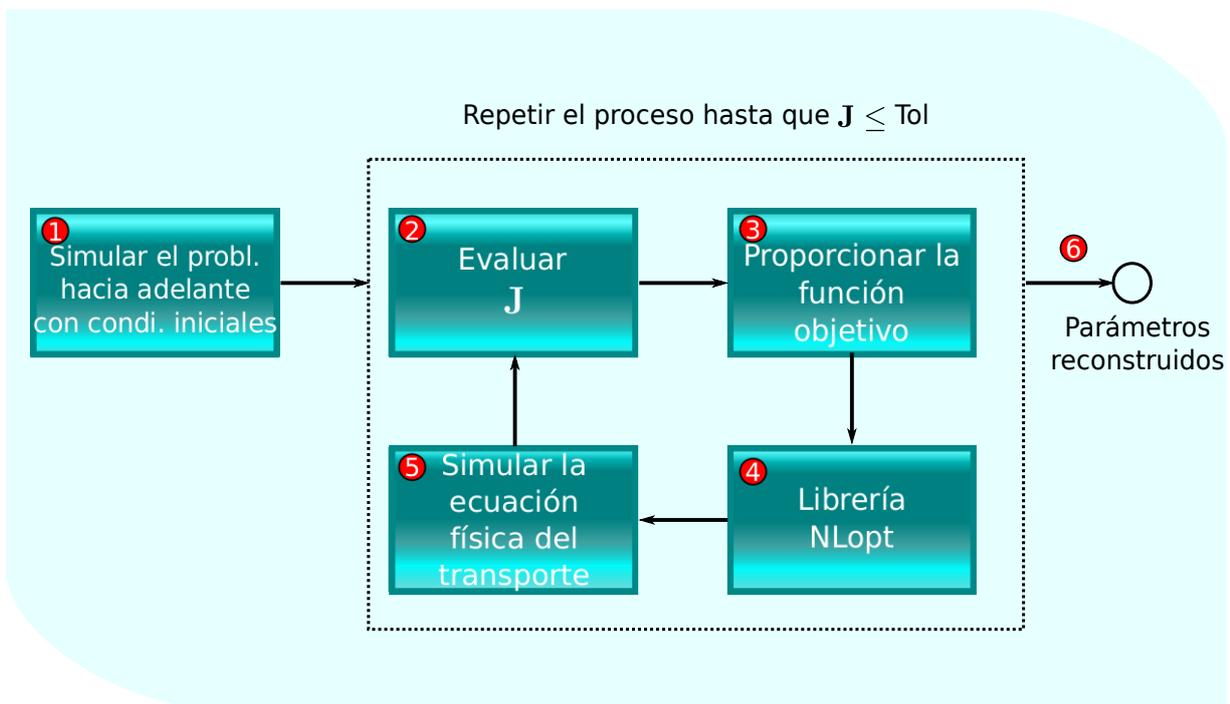


Figura 4.9: Esquema general de optimización basado en la librería NLOpt para reconstruir la condición de contorno de una variable de estado

El algoritmo es similar al visto anteriormente hasta el paso 2, continuando con:

3. Proporcionar la información de la función objetivo.
4. Elegir el algoritmo de la librería de NLOpt. En este trabajo solo se comparó con un algoritmo de optimización local libre de derivadas. Este método construye aproximaciones lineales sucesivas de la función objetivo y obtiene el nuevo conjunto de valores de contorno de la variable de estado.
5. Simular la ecuación de transporte hacia adelante. Nuevamente con la información hidrodinámica y con el conjunto de valores de contorno se calcula el transporte del soluto (paso 5, Figura 4.9).

6. Verificar si el funcional es menor que una tolerancia. Si se cumple termina el proceso devolviendo los valores optimizados (paso 6). En caso contrario continuar al paso 3.

4.4 Casos propuestos

En este apartado se proponen algunos casos test para las diferentes formulaciones adjuntas presentadas. El primer ejemplo mostrado es una comparación de los métodos de optimización adjunto y NLOpt para reconstruir la condición de contorno de un problema en estado estacionario. El segundo caso es análogo pero introduce una dificultad en el contorno con una función gaussiana. El siguiente caso presentado tiene como objeto comparar la reconstrucción de la condición de contorno (función escalón) con la longitud de paso (ϵ) constante y variable. El proceso para la obtención de la longitud de paso variable se realiza apoyado en la búsqueda de la sección dorada. El cuarto ejemplo presentado tiene como finalidad la reconstrucción de una fuente puntual con velocidad constante. El siguiente ejemplo reconstruye una fuente puntual con velocidad variable. Finalmente el último caso ilustrado tiene como objetivo principal la reconstrucción de la condición inicial.

4.4.1 Comparación del método adjunto con un algoritmo libre de NLOpt

De los modelos estudiados en las secciones previas solo el método de reconstrucción de la información de la condición de contorno de una variable con reacción se compara con la librería NLOpt. Para ello, se eligió el algoritmo de optimización local libre de derivadas denominado *COBYLA* [99]. El análisis se realiza tanto para un evento de transporte de soluto en flujo estacionario con condición de contorno constante como en otro con condición de contorno variable. En los dos casos propuestos el transporte de soluto se produce en un canal rectangular ideal a velocidad constante.

Caso 17. Comparación del método adjunto con NLOpt para reconstruir la condición de contorno constante en un flujo estacionario.

Sobre un canal de sección rectangular de longitud $L = 1000\text{m}$ y ancho $B = 5\text{m}$, sin pendiente ni fricción, de modo que el flujo es uniforme con $Q=1.0 \text{ m}^3/\text{s}$ y el transporte se produce sin difusión con velocidad constante $u=1\text{m/s}$. Se supone también una distribución inicial uniforme de soluto $\phi(0, x)=20 \text{ g/m}^3$ que reacciona con una tasa constante $k = 0.0001\text{s}^{-1}$ durante toda la simulación. Resolvemos el problema físico

gobernado por:

$$\frac{\partial(\phi)}{\partial t} + u \frac{\partial(\phi)}{\partial x} = r\phi$$

con la condición de contorno a la entrada de $\phi(0, t) = 20 \text{ g/m}^3$. Estas características se definen con el objeto de registrar un objetivo en $x_M = 500 \text{ m}$ para, en base a esta distribución, reconstruir la condición de contorno teórica del soluto. Es decir, se realiza una simulación hacia adelante, registramos el objetivo en $x_M = 500 \text{ m}$ y después reconstruimos la condición de contorno. La Figura 4.10 ilustra tanto las señales de entrada usadas en este ejemplo y en el siguiente, además de la estación de registro del objetivo.

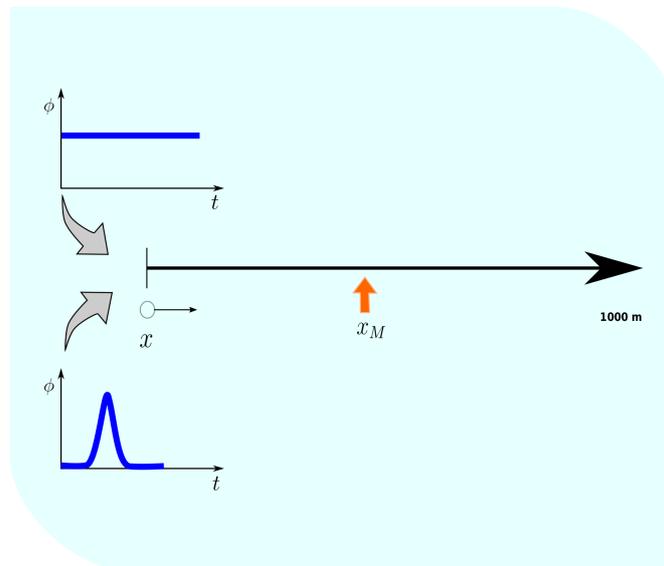
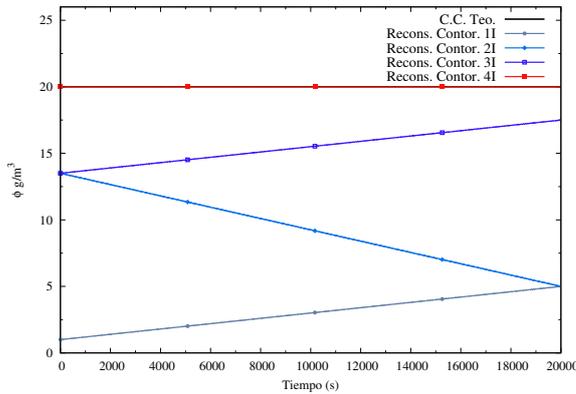


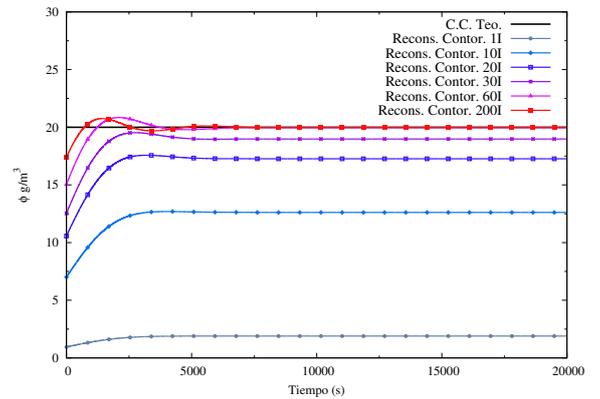
Figura 4.10: Representación unidimensional para reconstruir la condición de contorno

En el método adjunto se requiere de una longitud de paso que en este caso es $\epsilon = 0.1$. Sin embargo, cuando se utilizan las librerías NLopt lo que se requiere es el número de dimensiones del problema. Su valor para este caso fue de $n = 2$.

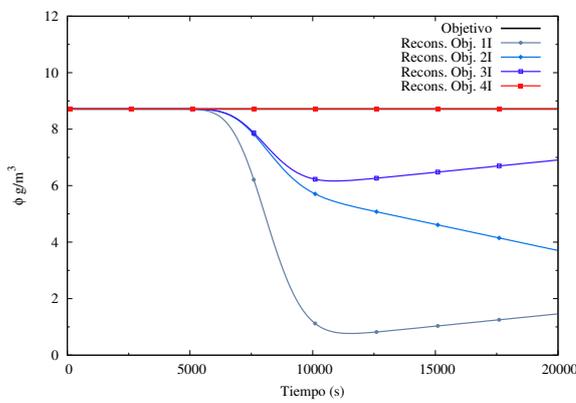
Los resultados de los dos métodos de optimización se presentan en la Figura 4.11. Sin duda es superior el proceso con NLopt (libre de derivada) sobre el método adjunto de los resultados observados. Por un lado, con NLopt la reconstrucción de la condición de contorno y la reproducción del objetivo llega a un estado final más uniforme y en menos iteraciones. Por otro lado, su reconstrucción es aleatoria, es decir, no sigue una reconstrucción uniforme debido al hecho de interpolar la función objetivo en cada iteración. Otro aspecto a destacar es sobre la tasa de disminución del funcional. Se requiere de únicamente cuatro iteraciones para alcanzar un valor de $J = 2.4E - 09$.



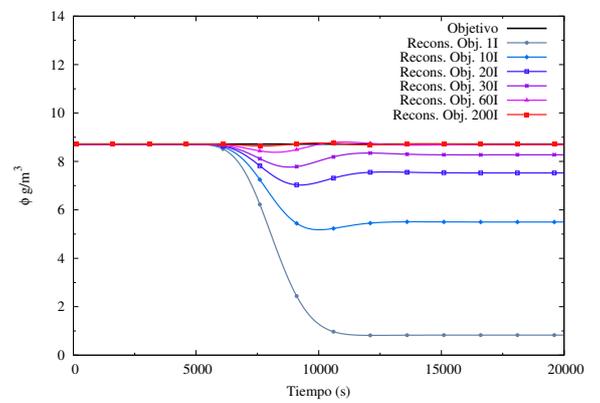
(a) Reconst. c. contorno sin derivadas (NLopt)



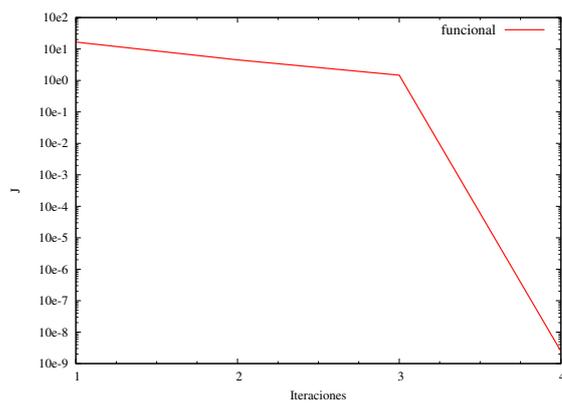
(b) Reconst. c. contorno con derivadas (Adjunto)



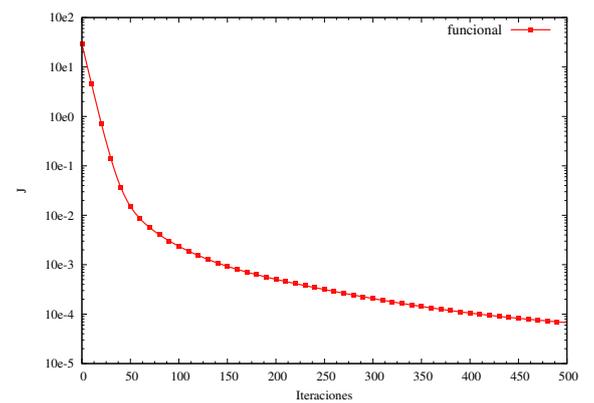
(c) Reconst. objetivo sin derivadas (NLopt)



(d) Reconst. objetivo con derivadas (Adjunto)



(e) Funcional (NLopt)



(f) Funcional (Adjunto)

Figura 4.11: Comparación del método libre de derivadas NLopt (izquierda) con el método adjunto (derecha) en estado estacionario. Reconstrucción de la condición de contorno (arriba), objetivo (medio) y funcional (abajo)

Por otra parte, el proceso de optimización con el método del gradiente basado en información adjunta con información adjunta necesita mayor número de iteraciones para alcanzar una distribución aceptable con respecto a la condición de contorno teórica. En 60 iteraciones se logra recuperar (no en su totalidad) la condición de contorno en el período establecido (véase Figura 4.11b). En los primeros 1000s existen diferencias significativas, por tanto para disminuir esta diferencia se decide elevar a 200 iteraciones de modo que sus comparaciones sean aceptables.

Respecto al objetivo mediante este método las distribuciones calculadas con las medidas tienen a ser muy similares entre sí. Sin embargo el funcional únicamente alcanza un valor de $J = 6.74E - 05$.

Las razones de estas diferencias notables entre algoritmos son:

- El número de dimensiones utilizadas en NLOpt. Esta variable marca considerablemente la convergencia del método; no es lo mismo tener dos puntos medidos en el contorno que un registro continuo de medidas en el tiempo o en el espacio (estado transitorio).
- El proceso simulado. El sistema que sirvió de ejemplo para ilustrar las ventajas y desventajas de los métodos solo consideró una ecuación del tipo (4.22). Es decir, un proceso de biodegradación simplificado que está en relación directa con la concentración.
- Número de parámetros considerados. La eficacia del método NLOpt podría verse afectada cuando se trabaje con un sistema de ecuaciones con varios objetivos a la vez, en lugar de uno solo.

En el siguiente ejemplo se analiza con los mismos métodos un escenario transitorio para verificar el primer apartado del párrafo previo.

Caso 18. Comparación del método adjunto con NLOpt para reconstruir la condición de contorno en estado transitorio.

El canal para este ejemplo tiene una sección rectangular de longitud $L = 2000$ m, ancho $B = 50$ m, sin pendiente ni fricción, con un flujo de caudal constante por la entrada de $Q(0, t) = 10 \text{ m}^3/\text{s}$.

Las propiedades del soluto son: $k = 0.001 \text{ s}^{-1}$, una condición de entrada dada por un pulso de soluto en forma de gaussiana. Esta función se propone discretizar en 4900 puntos, la expresión utilizada para tal efecto es:

$$\phi(0, t) = ae^{-\frac{(t-b)^2}{2c^2}} \quad (4.59)$$

donde a , b , c son constantes reales definidas como el valor del punto más alto de la campana, la posición del centro de la campana y la desviación estándar respectivamente y t el tiempo discreto.

En adelante cuando se hable del registro del objetivo si no se dice lo contrario se entenderá que existió una simulación previa hacia adelante para obtener el objetivo en el punto de medida de interés. Para este caso en particular la estación de medida está localizada en $x_M = 1000\text{m}$.

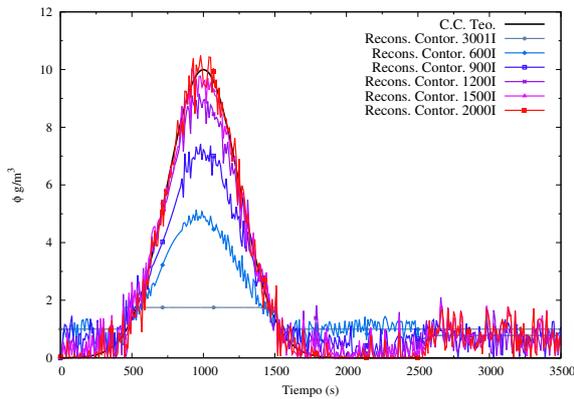
Los resultados de la reconstrucción del contorno, objetivo y funcional tanto con NLopt como con el método del gradiente se observan en la Figura 4.12. En este caso, el número de dimensiones para NLopt es 350. Este número de dimensiones al algoritmo provoca que ralentice el proceso de optimización. Presentando la reconstrucción de la condición de contorno se observa que existe variaciones bruscas al ir aumentando las iteraciones (ver Figura 4.12a). Para alcanzar el resultado mostrado en la Figura 4.12c (objetivo teórico con el reproducido), hizo falta un total de 2000 iteraciones usando NLopt. En lo que respecta al funcional en este escenario se alcanza un valor de $2.65\text{E} - 04$.

Desde el punto de vista del gradiente en un escenario transitorio, los resultados son más satisfactorios. El algoritmo de optimización solo necesita 30 iteraciones para cumplir los dos objetivos: reconstruir la condición de contorno y reproducir la distribución temporal en la estación de monitoreo de la calidad. La velocidad de convergencia es lineal en este caso llegando a un valor de $J = 1.47\text{E} - 09$ en pocas iteraciones.

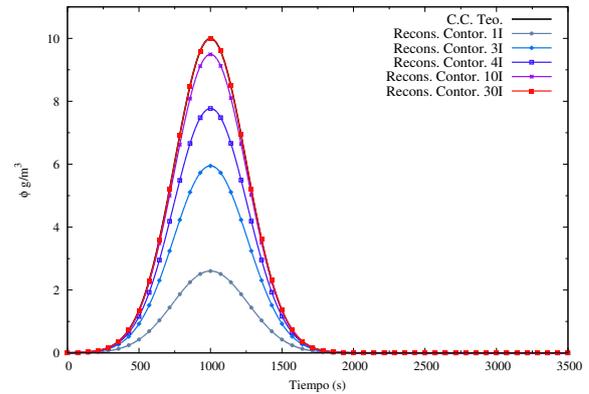
Además, la solución encontrada en cada iteración está libre de oscilaciones, demostrándose la eficiencia del esquema implementado. Producto de este análisis, los casos y desarrollos presentados en las próximas secciones se presentan únicamente para el método del gradiente es decir, utilizando la formulación adjunta con el fin de encontrar de forma eficiente la información de la derivada necesaria en el método de optimización.

Caso 19. | Reconstrucción de la condición de contorno en flujo estacionario incluyendo los procesos de convección-difusión-reacción

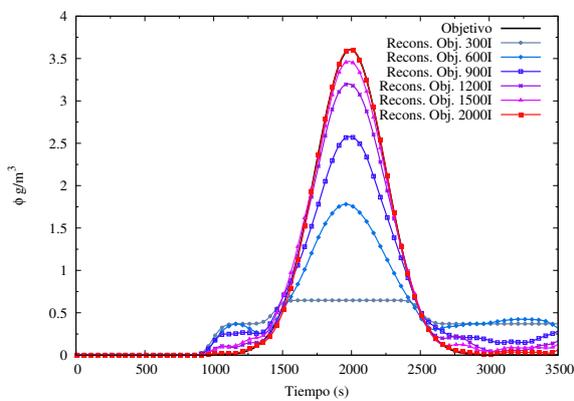
En algunas ocasiones es imprescindible observar el transporte de un soluto con el proceso de difusión sobre todo cuando el vertido es finito en el tiempo. Al incluir este proceso la ecuación física (hacia adelante) debe ser resuelta con el esquema habitual mientras que, para la ecuación adjunta (4.52) se determina por medio del esquema



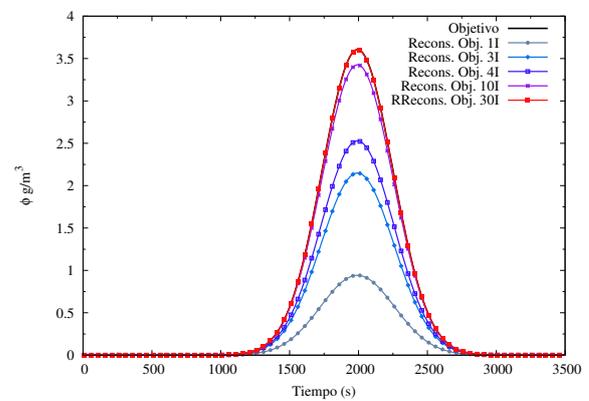
(a) Reconst. c. contorno sin derivadas (NLopt)



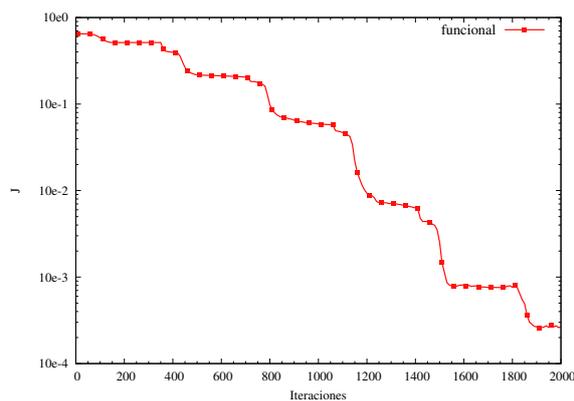
(b) Reconst. c. contorno con derivadas (Adjunto)



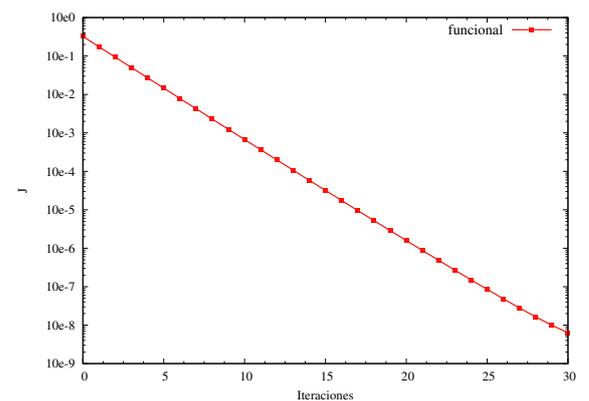
(c) Reconst. objetivo sin derivadas (NLopt)



(d) Reconst. objetivo con derivadas (Adjunto)



(e) Funcional (NLopt)



(f) Funcional (Adjunto)

Figura 4.12: Comparación del método libre de derivadas NLopt (izquierda) con el método adjunto (derecha) con una función gaussiana. Reconstrucción de la condición de contorno (arriba), objetivo (medio) y funcional (abajo)

(4.58). El ejemplo propuesto permitirá además de verificar la eficiencia del método con todos sus procesos (convección, difusión y reacción), la comparación con y sin cálculo inteligente de la longitud de paso. El método utilizado para el caso del cálculo inteligente de la longitud de paso en cada iteración es mediante la búsqueda de la sección dorada. Con este algoritmo se puede encontrar la longitud de paso “óptima” en cada iteración.

El caso de estudio es el mismo que se consideró en el apartado 2.2.4 (Caso 4). El ejemplo consiste en transportar un vertido que ingresa por el contorno mediante una señal en forma de escalón durante un período de tiempo de 1000s sobre un canal rectangular sin fricción ni rozamiento. El flujo es estacionario y uniforme de modo que el transporte incluye parte convectiva con velocidad constante, parte difusiva y parte reactiva. El caso tiene solución analítica, por lo que todos los resultados numéricos se comparan frente a ella.

Longitud de paso constante

Realizando una simulación previa para registrar el objetivo en $x_M=1000\text{m}$ se procede a reconstruir la condición de contorno según el proceso descrito. Esta primera reconstrucción se realizó con un $\epsilon = 0.5$. El resultado se observa en la Figura 4.13.

Verificando la reconstrucción de contorno (ver Figura 4.13a) se perciben pequeñas variaciones sobre todo desde la 5ª iteración en adelante. El origen de estas diferencias se puede atribuir al pulso de soluto que ingresa al dominio. Esta función de tipo escalón tiene una característica especial porque presenta un cambio instantáneo en $t=1000\text{s}$ que, en el momento de la reconstrucción y conforme se aproxima al objetivo, crea las variaciones observadas. De esta forma, se puede decir que el método es más oscilatorio cuando las señales reconstruidas cambian instantáneamente en cortos períodos de tiempo. Sin embargo, cuando la señal es más suave como una función gaussiana (Caso 18) la reconstrucción es perfecta llegando a converger en menos iteraciones.

Otro aspecto importante es que con 10 iteraciones prácticamente se ha cumplido el objetivo observado (Figura 4.13b). El aumento en el número de iteraciones es con el fin de disminuir diferencias entre los perfiles longitudinales numéricos y analíticos. El perfil longitudinal reconstruido después de 20 iteraciones logra una mayor exactitud con respecto a la 10ª iteración.

Prestando atención al funcional (Figura 4.13d), observamos que su mayor descenso se logra dentro de las 10 primeras iteraciones. Después de esta iteración, sigue disminuyendo pero ya de forma mucho más lenta hasta llegar a un valor aproximado de $6.038 \text{ E-}03$.

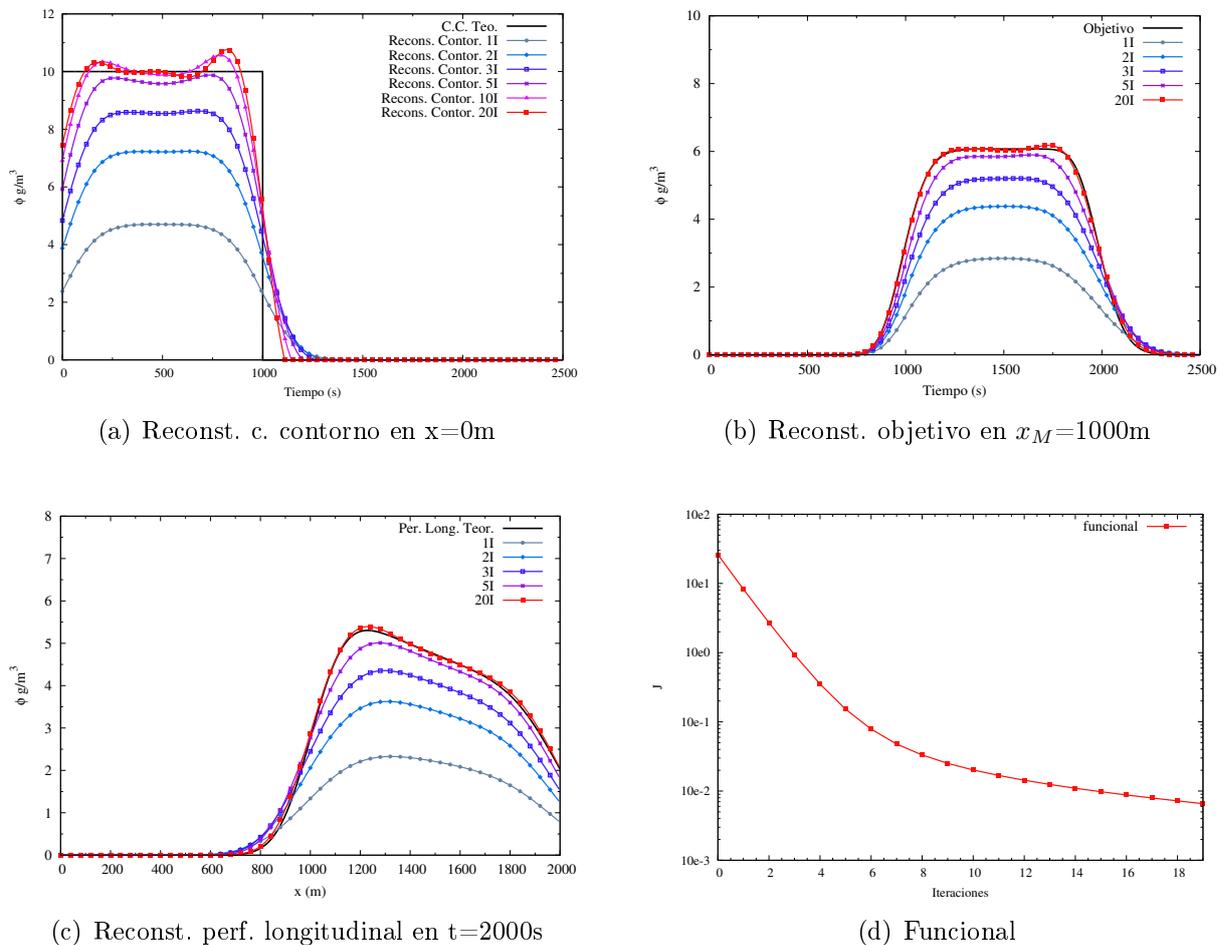


Figura 4.13: Reconstrucción de la c. contorno (a), objetivo (b), perfil longitudinal (c) y funcional (d) con los procesos de convección-difusión y reacción usando $\epsilon = 0.5$

Longitud de paso variable en cada iteración

Si este mismo caso lo evaluamos ahora con una búsqueda de la sección dorada para la longitud de paso comprendido entre $0 \leq \epsilon \leq 1E05$, se producen las siguientes conclusiones:

- El método de la sección dorada busca el valor óptimo de ϵ en el intervalo propuesto (en el sentido de un mayor descenso en el valor del funcional), en cada una de las iteraciones hasta alcanzar el objetivo (ver Figura 4.14c).
- Al ser $\epsilon \neq$ constante la velocidad de convergencia es más rápida.
- Se evita un análisis de prueba y error para encontrar el valor óptimo de ϵ .

Los resultados con la longitud de paso variable se muestra en la Figura 4.14. La reconstrucción, tanto del contorno como del objetivo, se logra prácticamente en la segunda iteración justificando lo citado previamente.

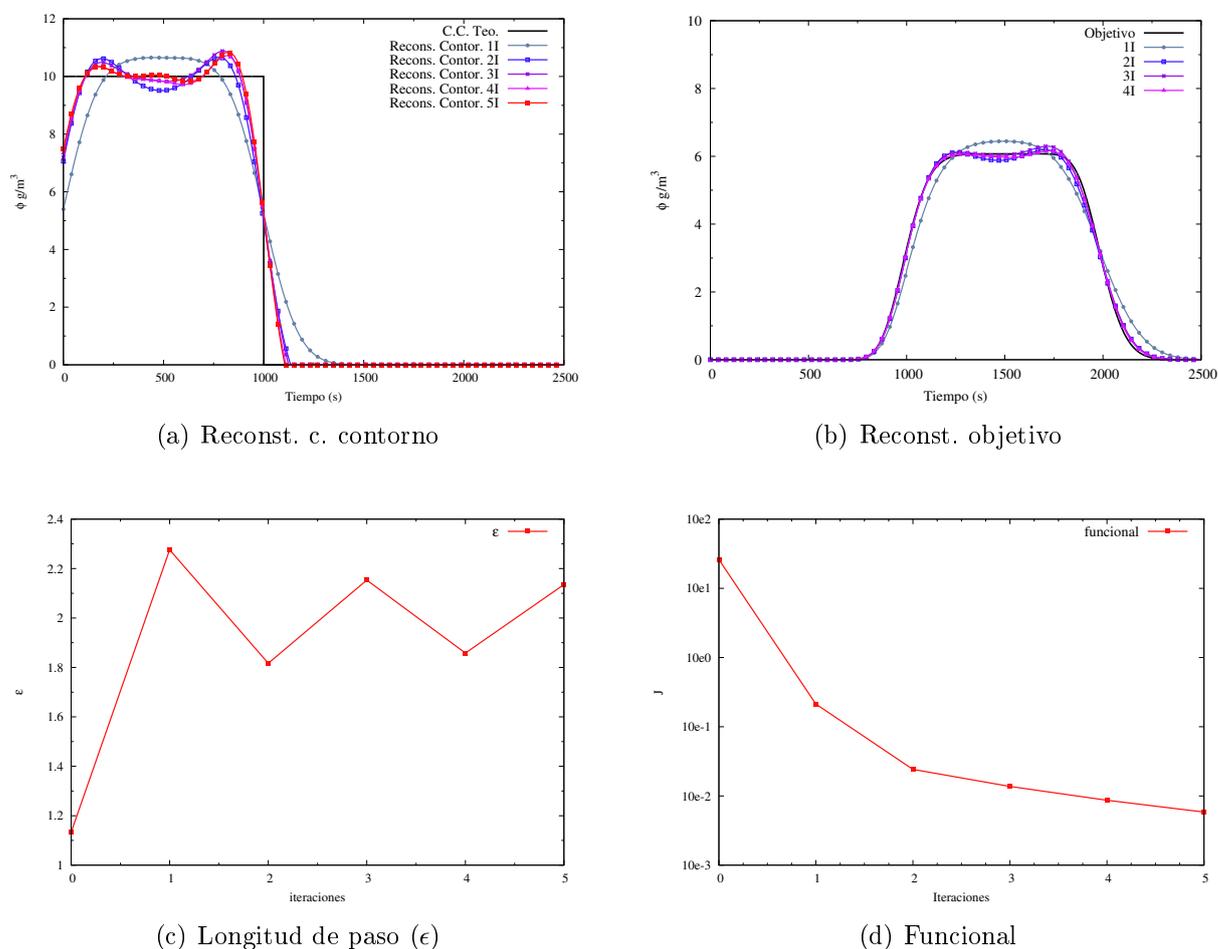


Figura 4.14: Reconstrucciones tanto de la c. contorno (a), y objetivo (b). Longitud de paso (c) y funcional (d) calculadas en cada iteración con el método de búsqueda de la sección dorada

Analizando la evolución del ϵ (figura 4.14c) en las cinco iteraciones encontramos, que la primera selección entre el amplio intervalo propuesto fue de 1.54. Las demás selecciones para este caso siguen valores comprendidos entre los 2.4 y 1.82, logrando un valor de $J = 7.8E - 04$.

Caso 20. | Reconstrucción de un vertido puntual en un flujo estacionario con convección y reacción.

Las descargas puntuales deliberadas producto de la ganadería, agricultura y la in-

dustria pueden llegar a ser perjudiciales sobre un cuerpo de agua no apto para esas condiciones. Por tanto, conocer la procedencia de un vertido puntual puede servir de apoyo en la gestión del recurso hídrico. Con el método adjunto propuesto se puede llegar a conocer el punto y el tiempo en el que se produjo la descarga conociendo la concentración de ese vertido aguas abajo.

En este apartado se proponen dos casos con el fin de observar la precisión y la eficiencia del algoritmo: una situación con velocidad constante y otra con velocidad variable. Esta última se realizó proponiendo un ensanchamiento progresivo de la sección.

El canal propuesto tiene las mismas características del Caso 19. Suponemos un vertido puntual en $x_s=3\text{m}$ con un pulso de soluto dado por:

$$S(x_s, t) = \begin{cases} 0 \text{ g/m}^3 & 0 < t \leq 100\text{s} \\ 5 \text{ g/m}^3 & 100 \leq t \leq 500\text{s} \\ 0 \text{ g/m}^3 & t > 500 \end{cases} \quad (4.60)$$

El proceso del transporte del soluto se lleva a cabo con una velocidad de convección constante ($u=1\text{m/s}$) y una velocidad de descomposición de $k = 1.728 \text{ d}^{-1}$. La condición de contorno para este ejemplo fue de $\phi(0, t) = 0 \text{ g/m}^3$. La estación de monitoreo se ubica en $x_M = 1000\text{m}$. Aguas abajo del punto (ver Figura 4.15). Con estas condiciones se realiza una simulación hacia adelante que permite registrar el objetivo y sucesivas iteraciones para reconstruir la intensidad de la fuente $\epsilon = 0.5$

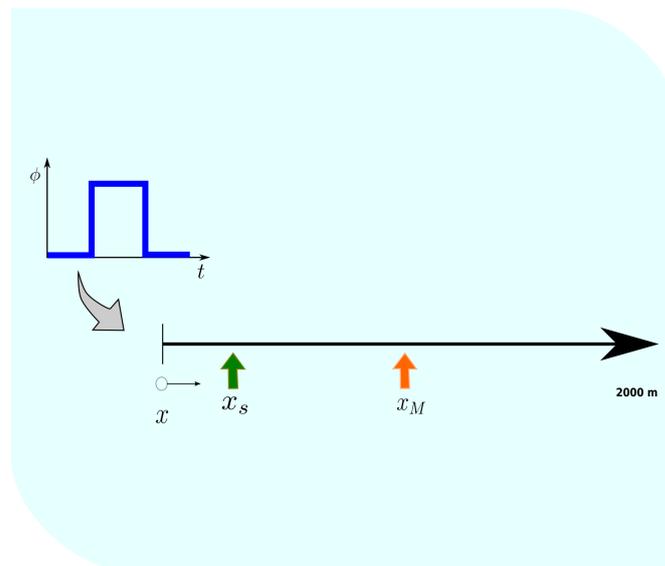


Figura 4.15: Representación unidimensional para reconstruir un vertido puntual

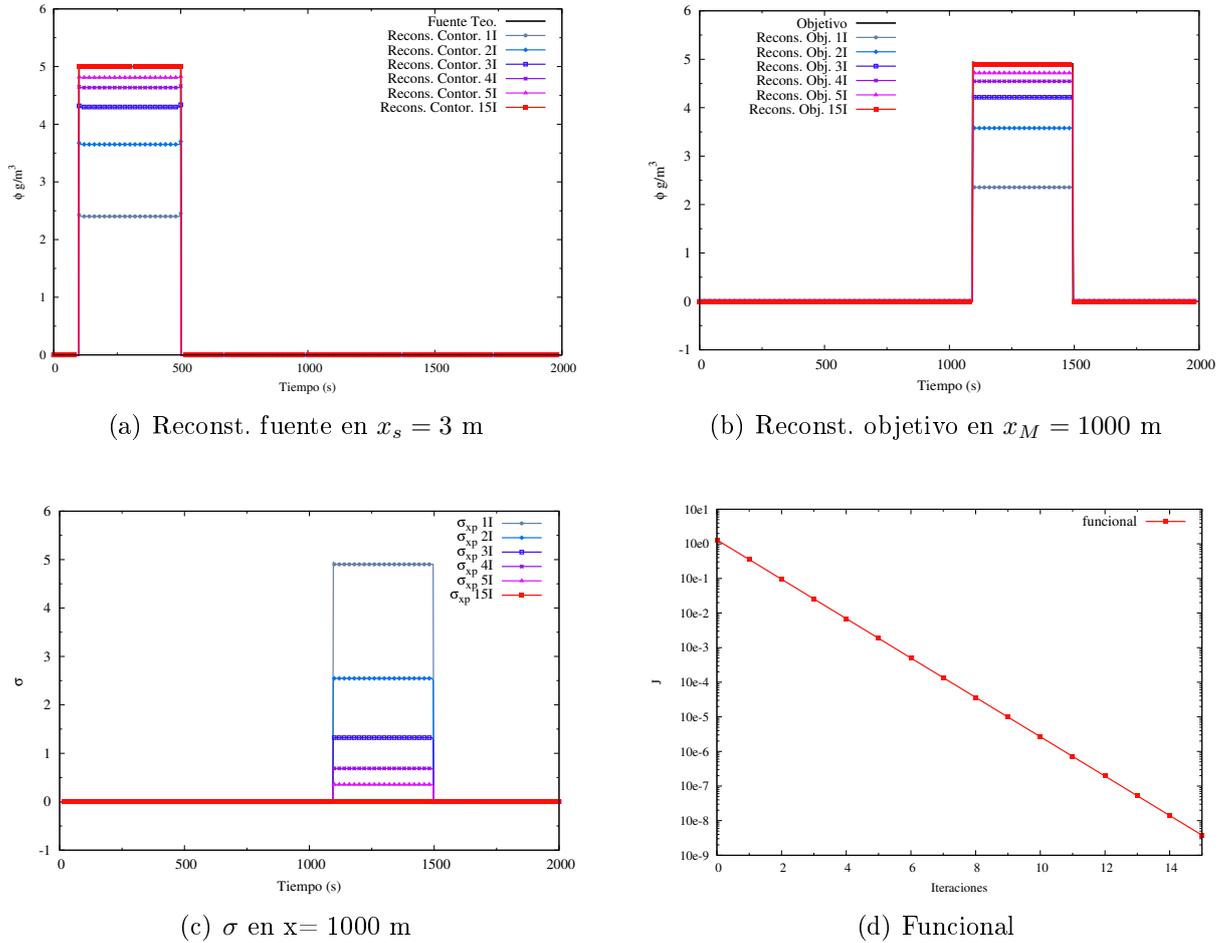


Figura 4.16: Reconstrucción de una fuente (a), objetivo (b), variable adjunta (c) y funcional (d) por el método de máximo descenso

En la Figura 4.16a se observa que el progreso en la reconstrucción de la fuente es rápido, uniforme y sin oscilaciones. Con solo 15 iteraciones el método converge a la solución. De igual forma, el pulso temporal del soluto registrado en $x_M = 1000$ m se logra satisfactoriamente en la última iteración. En la Figura 4.16c, se representa cómo evoluciona σ (variable adjunta) en cada iteración. En la primera iteración el pulso registrado en la posición $x_M = 1000$ m es el máximo error que se incurre al medir la concentración calculada y objetiva. Conforme el método avanza este error es menor con respecto al anterior, llegando a reducirse completamente en la iteración 15. La última variable por analizar es el funcional, que alcanza un valor de $3.805 \text{ E}-09$ con las iteraciones realizadas.

Caso 21. | Reconstrucción de una fuente puntual en un canal de sección variable con el proceso de convección.

Otro caso presentado en este apartado es el ensanchamiento progresivo de la sección para ilustrar la formulación con $u \neq \text{cte}$. La Figura 4.17 ilustra un escenario aproximado a la realidad en donde la velocidad varía a lo largo del dominio.

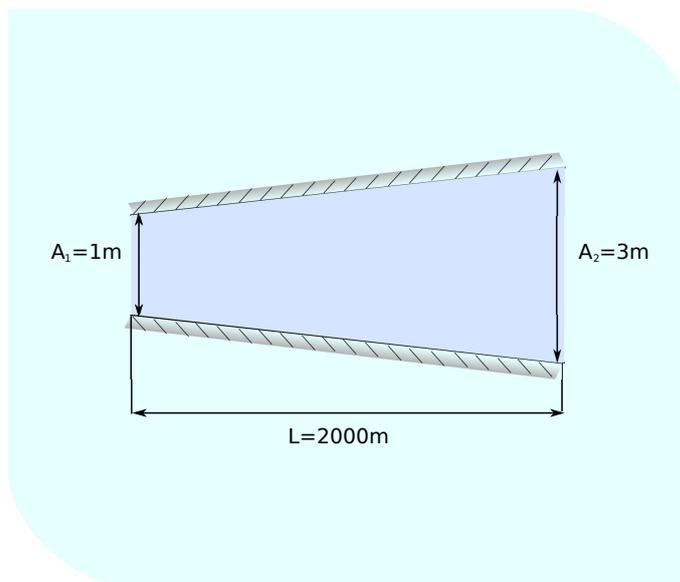


Figura 4.17: Vista en planta de la sección rectangular. Caso 21

El canal propuesto para este caso tiene las siguientes características: Longitud $L=2000\text{m}$, sección variable $A_1 = 1\text{m}$ al inicio del dominio y $A_2 = 3\text{m}$ al final del mismo, sin pendiente ni fricción. La estación de medida de la fuente se localiza en $x_s = 3\text{m}$. Mientras que, el objetivo se localiza en $x_M = 500\text{m}$. El resto de variables para el transporte del soluto son iguales que el Caso 20.

Con estos parámetros establecidos, el proceso de reconstrucción de la fuente se resuelve obteniendo los resultados de la figura 4.18. Las reconstrucciones tanto de la fuente como del objetivo (Figura 4.18a y Figura 4.18b) con velocidad variable presentan aproximaciones razonables de la fuente teórica y del objetivo medido respectivamente..

Por otro lado, se ilustra la sensibilidad (σ) en cada iteración Figura 4.18c. Este vector reúne todas las perturbaciones que se producen a lo largo de las reconstrucciones en $x_m = 500\text{m}$ y su valor llega a anularse cuando se ha cumplido con el objetivo previsto.

La Figura 4.18d, registra los perfiles longitudinales de la variable adjunta σ en la primera iteración. Este perfil aparece únicamente desde la posición 500 m y es transportado aguas arriba con una concentración de 4.95 aproximadamente. Conforme se

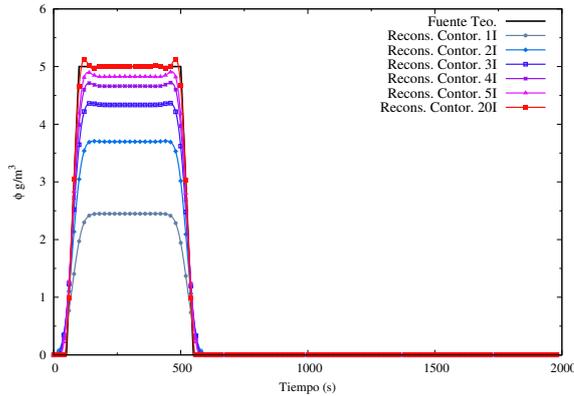
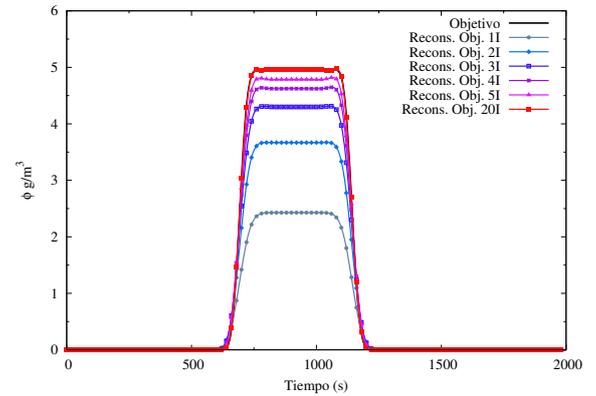
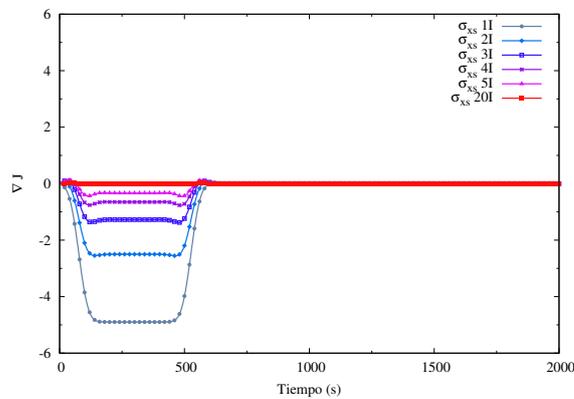
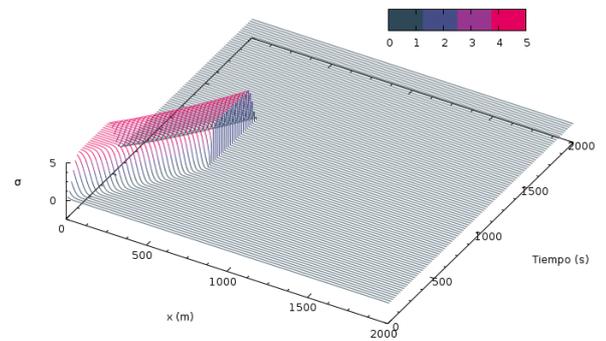
(a) Reconst. fuente en $x_s = 3$ m.(b) Reconst. objetivo en $x_M = 500$ m.(c) σ en $x = 3$ m(d) Evolución temporal y longitudinal de σ

Figura 4.18: Reconstrucción de una fuente (a), del objetivo (b), sensibilidad (c) y evolución de la variable adjunta en la primera iteración (d) por el método de máximo descenso con $u \neq$ constante.

avanza en la optimización, la concentración disminuye porque la concentración medida llega a ser igual al valor registrado.

Caso 22. Reconstrucción de la condición inicial en un flujo estacionario con los procesos de convección y reacción.

Con el método adjunto también es posible reconstruir una condición inicial de un soluto. Con el caso presentado se verificará la formulación adjunta para reconstruir una condición inicial con una distribución gaussiana. El transporte se realiza sobre un canal rectangular con velocidad constante.

El canal de este ejemplo tiene una longitud de $L=100\text{m}$, sin fricción ni rozamiento. El flujo es estacionario con una velocidad del flujo de 1m/s . La condición inicial del soluto se describe mediante la expresión:

$$\phi(x, 0) = e^{-0.01(x-45.0)^2} \quad (4.61)$$

con centro en $x = 45\text{m}$. El soluto se transporta sobre este dominio con una velocidad de descomposición de $k = 0.01\text{d}^{-1}$ sin difusión. Además, no existe ningún vertido adicional ni tampoco una entrada por el contorno aguas arriba. La definición del error para este caso en particular es:

$$J(\phi) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^L [\delta(t - t_M)(\phi_p - \phi_{o,p})^2] dxdt \quad (4.62)$$

La Figura 4.19a la distribución espacial de la condición inicial en algunas iteraciones. Tanto la distribución dada por la ecuación (solución analítica)(4.61) como la reconstrucción espacial en la décima iteración son muy similares entre sí.

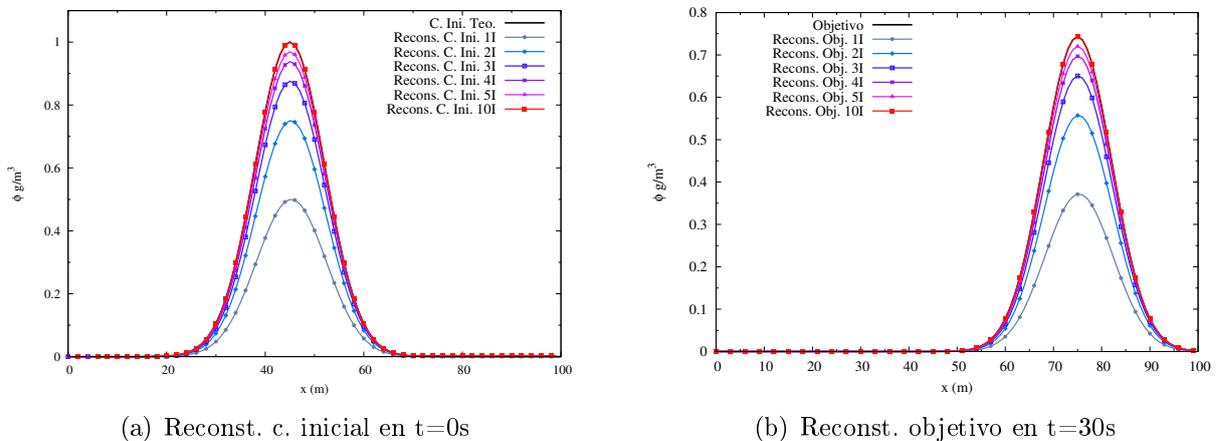


Figura 4.19: Reconstrucción de la condición inicial (a) y objetivo (b).

El resultado de la recuperación del objetivo a los 30s de simulación (ver Figura 4.19b) comparado con el perfil longitudinal del objetivo observado es asimismo satisfactorio.

La evolución del funcional en este caso es linealmente decreciente en todas las iteraciones (Figura 4.20). El valor alcanzado en la última iteración es $8.392 \text{ E-}10$ aproximadamente. Por tanto, se puede concluir que el método del gradiente descendente es fiable, robusto y eficaz.

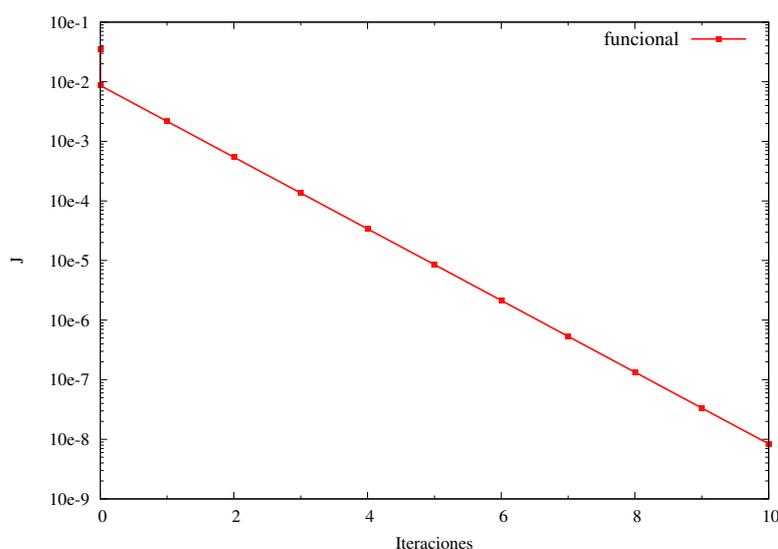


Figura 4.20: Evolución del funcional en cada iteración. Caso 22

4.5 Modelo adjunto de la ecuación del transporte de la temperatura

En esta sección se describe cómo formular la ecuación adjunta de la temperatura con sus términos fuentes. En primer lugar repite la ecuación física:

$$\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[EA \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{AH_n}{\rho C_p h} + S_T$$

donde T es la temperatura del agua, E coeficiente de difusión, H_n es el intercambio de calor neto y S fuente puntual o no puntual. Despreciando el término de difusión, operando con un multiplicador de Lagrange (σ) e integrando en el tiempo y en el espacio resulta la siguiente expresión:

$$I = \int_0^T \int_0^L \sigma \left[\frac{\partial(AT)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} - \frac{AH_n}{\rho C_p h} - S_T \right] dxdt = 0 \quad (4.63)$$

haciendo uso de la integración por partes e incluyendo el funcional J , la expresión (4.63) conduce a:

$$J = J + I = \int_0^T \int_0^L f dxdt + \int_0^L \sigma AT \Big|_0^T dx - \int_0^T \int_0^L AT \frac{\partial \sigma}{\partial t} dxdt + \int_0^T \sigma QT \Big|_0^L dt - \int_0^T \int_0^L QT \frac{\partial \sigma}{\partial x} dxdt - \int_0^T \int_0^L \sigma \frac{AH_n}{\rho C_p h} - \int_0^T \int_0^L \sigma S_T dxdt \quad (4.64)$$

El próximo paso es definir sobre qué parámetro se quiere aplicar la regulación. En este apartado, el interés se centra sobre la condición de contorno aguas arriba de la temperatura.

Teniendo en cuenta lo anterior se toma la primera variación con respecto a T en (4.64), y se aplican las restricciones:

$$\begin{aligned}\delta\phi(x, T) &= 0 \\ \delta\phi(x, 0) &= 0\end{aligned}$$

y de contorno para $\delta\phi$:

$$\delta\phi(L, t) = 0$$

Este desarrollo conduce a la expresión:

$$\begin{aligned}\delta J &= \int_0^T \int_0^L \left[\frac{\partial f}{\partial T} - A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - A \frac{\partial P_{R1}}{\partial T} \right] \delta T dx dt \\ &\quad - \int_0^T \sigma(0, t) Q(0, t) T(0, t) dt\end{aligned}\tag{4.65}$$

con $P_{R1} = \frac{H_n}{\rho C_p h}$. Si se cumple la ecuación diferencial adjunta:

$$-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - A \frac{\partial P_{R1}}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial T} = 0\tag{4.66}$$

donde haciendo uso de la regla de la cadena:

$$\begin{aligned}\frac{\partial P_{R1}}{\partial T} &= \frac{\partial K_h}{\partial T} (T_e - T) + K_h \left(\frac{\partial T_e}{\partial T} - 1 \right) \\ \frac{\partial K_h}{\partial T} &= 0.05 + f_w(u_w) \left[\frac{0.0151}{2} (T + T_d) + \frac{3}{400} \right] \\ \frac{\partial T_e}{\partial T} &= -\frac{R}{K_h^2} \frac{\partial K_h}{\partial T}\end{aligned}\tag{4.67}$$

la sensibilidad del funcional a cambios de la temperatura en el contorno puede expresarse como:

$$\nabla J = \frac{\delta J}{\delta T(0, t)} = -\sigma(0, t) Q(0, t)\tag{4.68}$$

El método iterativo para reconstruir la condición de contorno de la temperatura se define como:

$$T(0, t)^{iter+1} = T(0, t)^{iter} + \epsilon^{iter} u \sigma(0, t)^{iter}$$

En la ecuación (4.66), se observa que el proceso de convección no se altera al derivar la ecuación adjunta, característica que no ocurre con el término de reacción. Esto implica que, en posteriores desarrollos, el proceso de aumento o disminución de la variable dependiente será un proceso a caracterizar.

Una vez definido el gradiente de la ecuación de balance de calor se propone un ejemplo para validar la formulación desarrollada.

Caso 23. | Reconstrucción de la condición de contorno de la temperatura del agua en un flujo estacionario con múltiples fuentes.

Las características hidráulicas y las temperaturas en cada una de los vertidos de este caso son iguales a las descritas en el Caso 9. Se plantea reconstruir la condición de contorno aguas arriba de la temperatura. En este proceso de regulación es necesario definir una estación de medida para registrar la variabilidad temporal de la temperatura del agua, y con esta información, proceder a recuperar la condición de contorno. La localización de la estación está en $x = 60\text{km}$ aguas abajo (ver Figura 4.21).

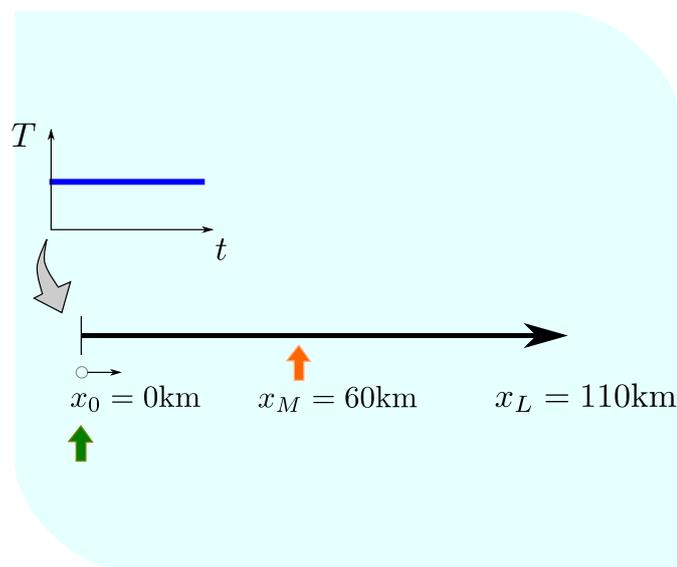


Figura 4.21: Representación unidimensional para reconstruir la temperatura del agua

Los resultados tanto de la condición de contorno, objetivo, perfil longitudinal y funcional se muestran en las Figuras 4.22 a, b, c, d respectivamente.

El proceso para reconstruir la condición de contorno constante en el tiempo, se propone en 80 iteraciones. Sin embargo, el valor de 20°C teórico que entra al dominio

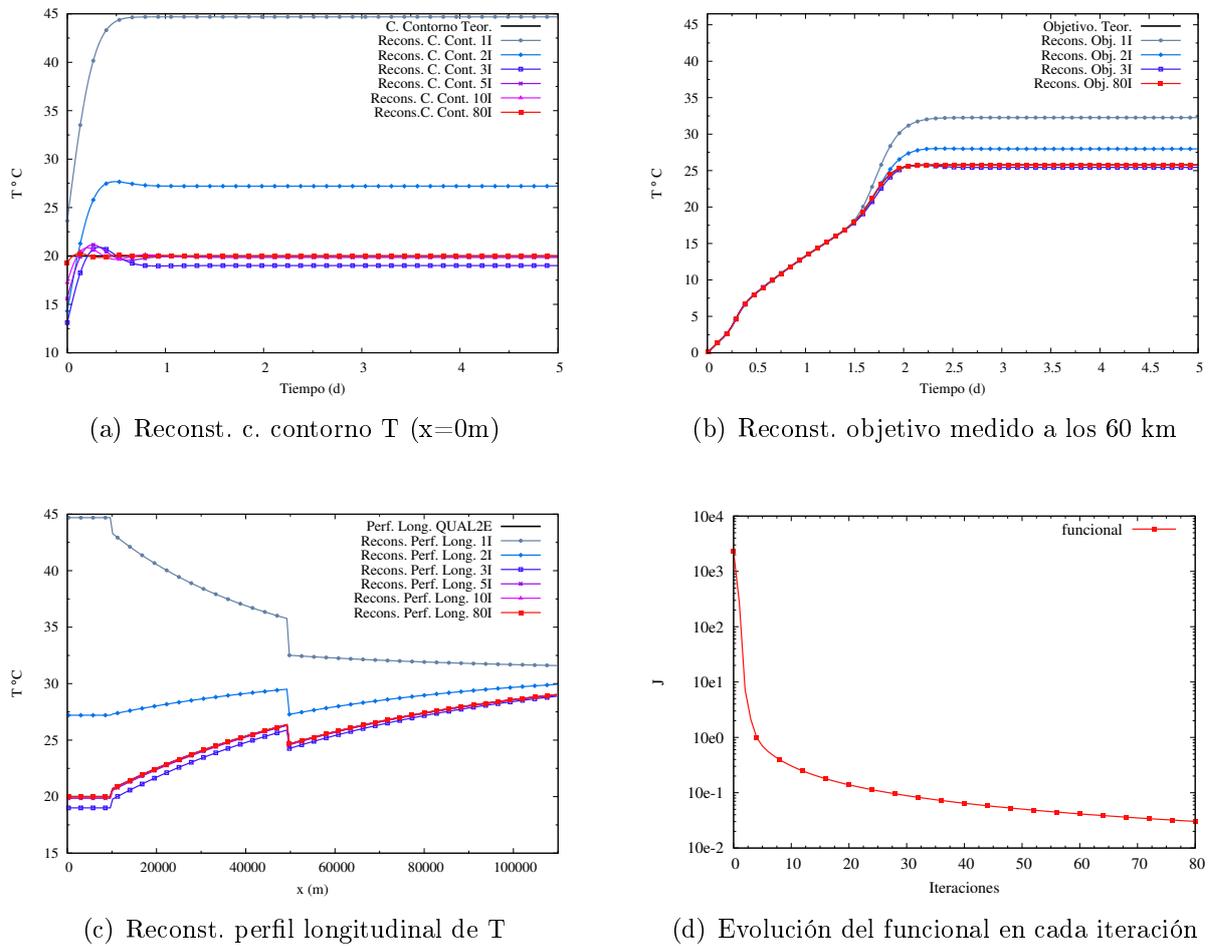


Figura 4.22: Método de optimización para la reconstrucción de la condición de contorno para la temperatura, con múltiples fuentes

se consigue en la 10^a iteración en casi todo el intervalo de tiempo. Las iteraciones a partir de ésta se deben al hecho de afinar las pequeñas variaciones que se producen al principio.

Si se analiza la reconstrucción del objetivo, por un lado tenemos que la distribución temporal es variable en el tiempo, producto de la condición inicial propuesta para la temperatura del agua (0°C), por los efectos de las variables meteorológicas y por los vertidos presentes en el dominio. Estas condiciones generan que la temperatura aumente hasta los 1.5 días aproximadamente. Finalmente esta variación cesa después de que han transcurrido dos días alcanzando un estacionario de allí en adelante.

Como se observa el algoritmo tiende a converger en tan solo 10 iteraciones aún en presencia de distribuciones variables en el tiempo y en presencia de vertidos continuos

laterales con diferentes valores de entrada.

La robustez del método también se verifica en la reconstrucción del perfil longitudinal de la temperatura del agua (ver Figura 4.22c). Esto quiere decir que, al mismo tiempo que se minimizan las diferencias entre los datos calculados y los medidos en un punto del dominio, se consigue recuperar las medidas en cualquier otro punto. Analizando más en concreto la evolución espacial se observa que, a medida que el método iterativo avanza, las reconstrucciones del perfil longitudinal van reproduciendo la misma distribución creada por el modelo QUAL2E. Es decir, el método es capaz de reconstruir el valor estable de 20°C durante los 10 primeros km, tiene en cuenta el aumento producido por el primer vertido (x=10 km), hasta los 50km y considera por último el ingreso del segundo vertido más frío (T=15 °C).

Respecto al funcional (Figura 4.22d) se alcanza un valor de 3.0320 E-02 con 80 iteraciones transcurridas, valor suficiente para reconstruir las distintas condiciones del problema en estudio.

4.6 Modelo adjunto de Streeter-Phelps modificado

La formulación que se desarrollará en esta sección representa una nueva complejidad que involucra dos variables de estado: DBO-C (ϕ_2) y OD (ϕ_6). Adicionalmente a la integración de estas variables, está la modificación del funcional, ya que el cambio debe contemplar que J sea función de las dos variables $J = f(\phi_1, \phi_2)$.

Para iniciar la metodología adjunta se define el sistema de la caída del oxígeno en un cauce de agua superficial:

$$\frac{\partial(A\phi_2)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_2)}{\partial x} = A(-P_{R3} - P_{R4}) + S_2$$

$$\frac{\partial(A\phi_6)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_6)}{\partial x} = A(P_{R2} - P_{R3} - P_{R5}) + S_6$$

donde por motivos de claridad se ha introducido una notación corta para los procesos cinéticos definidos como:

$$\begin{aligned}
P_{R2} &= k_a \theta_2^{T20} (\phi_{sat} - \phi_6) \\
P_{R3} &= -k_d \theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{BOD} + \phi_6} \right) \phi_2 \\
P_{R4} &= -\frac{v_{s8} (1 - f_{d2})}{h} \phi_2 \\
P_{R5} &= -\frac{D_{OS}}{h} \theta_5^{T20}
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Posteriormente si generalizamos el funcional para varios solutos, la ecuación (4.20) puede reescribirse como:

$$J = \int_0^T \int_0^L \varphi_k f(\phi_k; x, t) dx dt \tag{4.70}$$

donde φ_k es un factor de ponderación. Para este caso en particular f puede expresarse como:

$$f_k = \left[\frac{1}{2N_t} \varphi_k \sum_{N_T=1}^{N_T} (\phi_{k,m} - \phi_{k,obj})^2 \right]_m^n \tag{4.71}$$

Adicionalmente, la ecuación (4.71) puede ser normalizada cuando los solutos tengan diferente composición. En estas condiciones el funcional se expresa como:

$$f_{k,N} = \left[\frac{1}{2N_t} \varphi_k \sum_{N_T=1}^{N_T} \frac{(\phi_{k,m} - \phi_{k,obj})^2}{(\phi_{k,obj(MAX)})^2} \right]_m^n \tag{4.72}$$

donde $\phi_{k,obj(MAX)}$ es el valor medido máximo de la variable k . Definido los nuevos cambios, el próximo paso es multiplicar e integrar tanto la materia orgánica (ϕ_2) como el oxígeno disuelto (ϕ_6) por dos funciones adjuntas σ_2 y σ_6 respectivamente:

$$\begin{aligned}
I = \int_0^T \int_0^L \left\{ \sigma_6 \left[\frac{\partial(A\phi_6)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_6)}{\partial x} - AP_{R2} + AP_{R3} + AP_{R5} + S \right] \right. \\
\left. + \sigma_2 \left[\frac{\partial(A\phi_2)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_2)}{\partial x} + AP_{R3} + AP_{R4} + S \right] \right\} dx dt = 0
\end{aligned} \tag{4.73}$$

Formulado de nuevo como $J = J + I$ y, a partir de allí $\delta J = \delta J + \delta I$ tomando variaciones en las concentraciones de ϕ_2 y ϕ_6 la sensibilidad del funcional tanto a la concentración de DBO-C como a la de OD en el contorno aguas arriba es:

$$(\nabla J)_k = \frac{\delta J_k}{\delta \phi_k(0, t)} = -\sigma_k(0, t)Q(0, t) \quad (4.74)$$

La expresión (4.74), permite regular las perturbaciones ocasionadas en el contorno en cualquier nivel de tiempo, siempre y cuando se cumpla que:

$$-A \frac{\partial \sigma_2}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma_2}{\partial x} + A \left[(\sigma_2 + \sigma_6) \frac{\partial(P_{R3})}{\partial \phi_2} + \sigma_2 + \frac{\partial(P_{R4})}{\partial \phi_2} \right] + \frac{\partial f}{\partial \phi_2} = 0 \quad (4.75)$$

$$-A \frac{\partial \sigma_6}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma_6}{\partial x} + A \left[\sigma_6 \frac{\partial(P_{R2})}{\partial \phi_6} + (\sigma_2 + \sigma_6) \frac{\partial(P_{R3})}{\partial \phi_6} \right] + \frac{\partial f}{\partial \phi_6} = 0 \quad (4.76)$$

con:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{R2}}{\partial \phi_6} &= -k_a \theta_2^{T20} \\ \frac{\partial P_{R3}}{\partial \phi_2} &= -k_d \theta_D^{T20} \left(\frac{\phi_6}{k_{BOD} + \phi_6} \right) \\ \frac{\partial P_{R3}}{\partial \phi_6} &= k_a \theta_D^{T20} \frac{k_{BOD}}{(k_{BOD} + \phi_6)^2} \phi_2 \\ \frac{\partial P_{R4}}{\partial \phi_2} &= -\frac{V_{s3} (1 - f_{d5})}{h} \end{aligned} \quad (4.77)$$

De las ecuaciones adjuntas (4.75, 4.76) dos aspectos son importantes señalar: a) Tanto el parámetro P_{R5} como S desaparecen de la formulación adjunta por no depender de ninguna variable de estado ϕ_2 ni ϕ_6 . b) las ecuaciones obtenidas son muy similares en apariencia a las del problema directo, excepto sus términos de reacción, que cambian considerablemente en su composición para cada especie. Esta cualidad permite resolver las ecuaciones adjuntas sobre la misma malla numérica que el problema directo, utilizando el mismo conjunto de variables de estado hidrodinámico. La única diferencia está en alimentar las variables de estado en orden inverso, ya que el tiempo adjunto inicia en el tiempo final del problema físico.

Caso 24. | Reconstrucción de la condición de contorno de las variables presentes en el modelo de Streeter-Phelps con múltiples fuentes en flujo estacionario.

La nueva complejidad desarrollada se evaluó con el ejemplo de la sección 3.3 (Caso 11). Este caso involucraba tres variables de estado: la temperatura (T ó ϕ_1), materia orgánica (ϕ_2) y el oxígeno disuelto (ϕ_6). Por tanto, el objeto de este proceso de optimización es, por un lado, reconstruir las condiciones de contorno tanto del DBO-C como del OD y, por el otro, observar el comportamiento del funcional normalizado.

El efecto de la temperatura en este escenario también fue incluido con todos sus intercambios de calor presentes. La reconstrucción de esta variable no se representa cuando se usa el funcional sin normalizar porque ya fue motivo de estudio en el apartado anterior.

La única diferencia con el Caso 11 está en la condición inicial. Esta condición para las variables de estado fue de $\phi_1(x, 0) = 0.0^\circ\text{C}$, $\phi_2(x, 0) = 0.0\text{ g/m}^3$ y $\phi_6(x, 0) = 0.0\text{ g/m}^3$. Se establece una estación de medida ubicada en $x = 60\text{ km}$ y se procede con el método de optimización. La Figura 4.23 muestra las diferentes reconstrucciones de los solutos incluidos en este caso teórico.

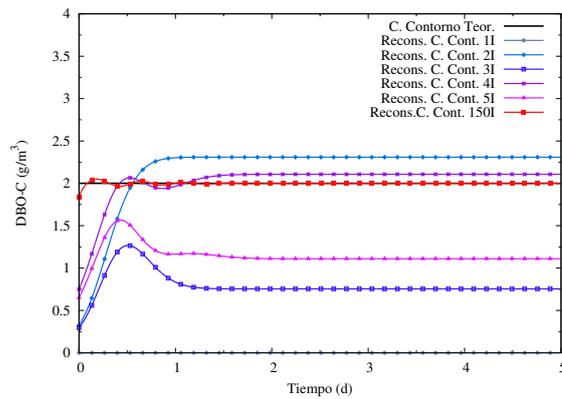
En la Figura 4.23a, se observa que en la 2.^a iteración se sobrestima la concentración. Este hecho podría deberse a los aportes laterales presentes en este escenario. Al notar que el aporte por la entrada genera un reparto mayor que el observado, el método regula de forma acertada los valores de entrada (iteración 3.^a y en adelante), de manera que se acaba alcanzando el valor teórico con la suficiente aproximación.

Si analizamos la reconstrucción homóloga, para el OD (Figura 4.23b), la situación difiere de la anterior. Las consecutivas iteraciones avanzan más uniformes siempre por debajo del valor teórico. Esto es debido a que la ecuación adjunta está estrechamente relacionada tanto con las velocidades de descomposición de la DBO-C como consigo misma, ocasionando que el método tarde más en alcanzar el valor teórico.

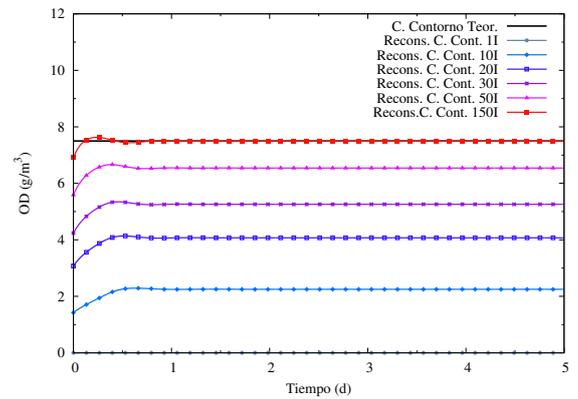
Las señales del objetivo tanto para DBO-C como para el OD, llegan a estar muy cerca de la distribución observada (Figura 4.23c y Figura 4.23d) en tan solo cinco iteraciones. Las dos distribuciones son variables en el tiempo durante los dos primeros días. Posteriormente a este tiempo las señales son constantes debido a que los procesos encuentran una estabilidad por los aportes continuos que ingresan al dominio. Estas variaciones temporales de los dos solutos logran ser ajustada satisfactoriamente con la herramienta implementada.

Como estos procesos ya fueron resueltos hacia adelante y comprobados con la salida del modelo de calidad de agua QUAL2E, es oportuno comprobar cómo el método de máximo descenso con longitud de paso constante reconstruye los perfiles de DBO-C y OD. La Figura 4.23e, presenta las reconstrucciones del perfil longitudinal espacial de la DBO-C. Sus variaciones a lo largo del dominio se consiguen representar por el método de optimización sin producir inestabilidades en cada una de las iteraciones.

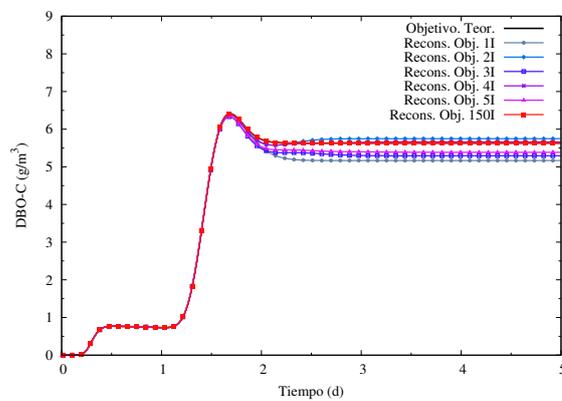
Respecto al perfil longitudinal de la variable OD su convergencia en cada iteración es menos eficiente si lo comparamos con la variable de estado DBO-C. No obstante, el resultado en términos generales es adecuado porque con pocas iteraciones se alcanza



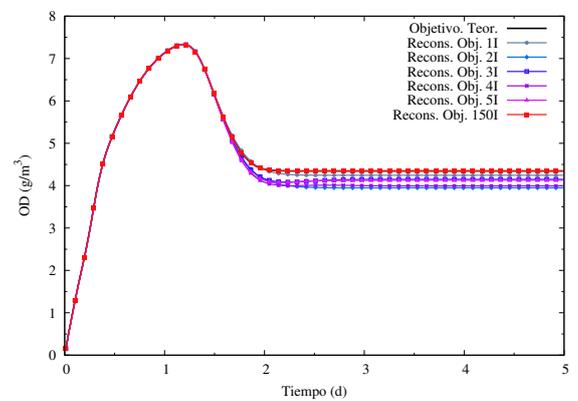
(a) Reconst. c. contorno DBO-C



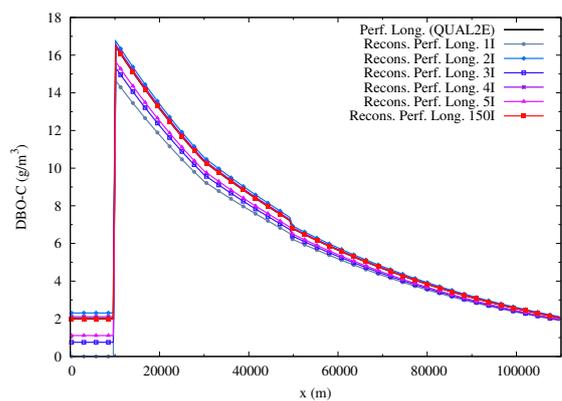
(b) Reconst. c. contorno DO



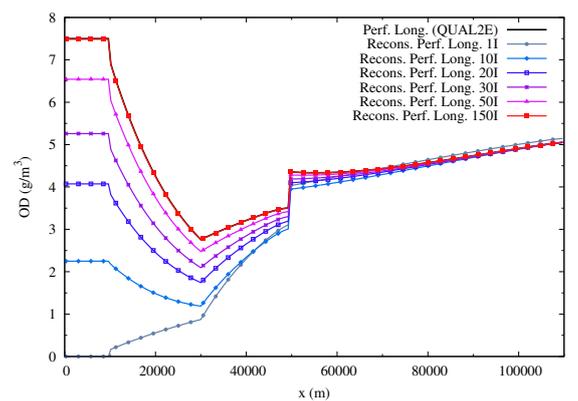
(c) Reconst. objetivo medido a los 60 km DBO-C



(d) Reconst. objetivo medido a los 60 km DO



(e) Reconst. perfil longitudinal de DBO-C



(f) Reconst. perfil longitudinal de DO

Figura 4.23: Reconstrucción de las variables de estado presentes en el modelo de Streeter-Phelps

la distribución espacial.

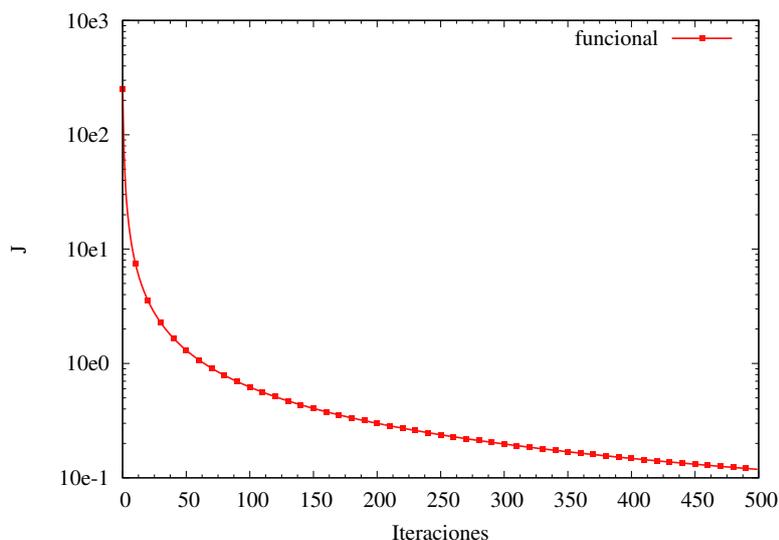


Figura 4.24: Evolución del funcional en cada iteración en el modelo de Streeter-Phepls

El último resultado por presentar es el funcional (ver Figura 4.24). El número de iteraciones mostradas en este caso supera las 150, valor suficiente para conseguir los objetivos perseguidos. Se ha creído conveniente mostrar mayor número de iteraciones con el fin de verificar que el mayor decremento del funcional se localiza durante las 150 primeras iteraciones. Después, la disminución continúa de manera poco significativa con respecto a la anterior.

Si el mismo escenario se realiza utilizando la formulación del funcional normalizado (ecuación 4.72) los resultados son diferentes, sin embargo llegan al mismo objetivo. La Figura 4.25 muestra únicamente las reconstrucciones de las condiciones de contorno de las variables ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_6 y el funcional. Comparando con las reconstrucciones calculadas con el funcional sin normalizar se tiene que: a) el número de iteraciones son 500 en lugar de las 150. No obstante como se observa las convergencias de las reconstrucciones son más rápidas dentro de las 150 iteraciones, esta velocidad tiende a decaer de allí en adelante como se representa en el funcional (Figura 4.25d). b) Las reconstrucciones son más uniformes y progresivas conforme avanza la iteraciones. c) La forma del funcional y su valor son diferentes. Un valor de $J=9.183 \text{ E-}04$ se obtiene con el funcional normalizado, mientras que sin normalizar un valor de $J=1.187 \text{ E-}01$ se alcanza con el mismo número de iteraciones.

Con este escenario se pone de manifiesto que:

- Además de reconstruir la condición de contorno aguas arriba es posible garantizar crecimiento o disminución de las concentraciones fuera de ciertos valores de seguridad.

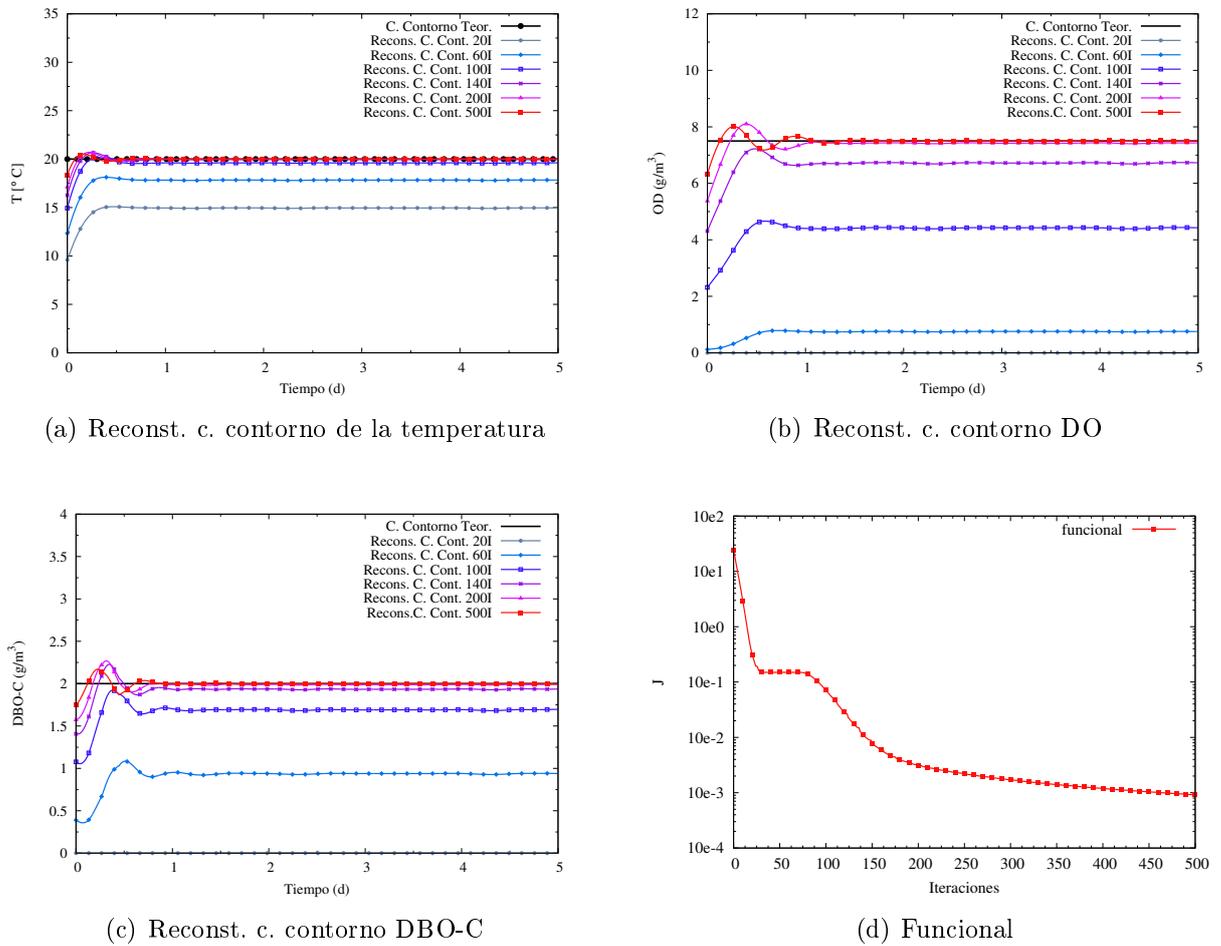


Figura 4.25: Reconstrucción de la condición de contorno de las variables de estado presentes en el modelo de Streeter-Phepls y funcional normalizado

- Esto a su vez mantendría el buen estado de las aguas dentro de los límites permitidos y la posibilidad de una ubicación correcta de las estaciones de medida a lo largo de un dominio establecido, traduciendo todo ello en una gestión apropiada de una cuenca.

4.7 Modelo adjunto del proceso de nitrificación

Una nueva y última complejidad para reconstruir las condiciones de contorno es la implementación adjunta del modelo de nitrificación. El primer paso consiste en introducir una notación más compacta de los diferentes procesos que intervienen en este ciclo:

$$\begin{aligned}\frac{\partial(A\phi_3)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_3)}{\partial x} &= A(-P_{R6} - P_{R7}) + S \\ \frac{\partial(A\phi_4)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_4)}{\partial x} &= A(P_{R6} - P_{R8}) + S \\ \frac{\partial(A\phi_5)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_5)}{\partial x} &= A(P_{R8} - P_{R9}) + S \\ \frac{\partial(A\phi_6)}{\partial t} + \frac{\partial(Q\phi_6)}{\partial x} &= A(P_{R2} - P_{R3} - P_{R5} - P_{R8}) + S\end{aligned}$$

siendo:

$$\begin{aligned}P_{R6} &= K_{34}\theta_{34}^{T20}\phi_3 \\ P_{R7} &= \frac{v_{s8}(1 - f_{D3})}{h}\phi_3 \\ P_{R8} &= K_{45}\theta_{45}^{T20}\phi_4 \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) \\ P_{R9} &= K_{5D}\theta_{5D}^{T20}\phi_5 \left(\frac{k_{NO3}}{k_{NO3} + \phi_6} \right)\end{aligned}\tag{4.78}$$

Se omite el desarrollo del proceso de búsqueda de la formulación adjunta al ser análogo a los ya mostrados anteriormente. Por lo tanto solamente se incluye la formulación encontrada. Este modelo adjunto toma en cuenta las cinco variables de estado más la ecuación adjunta del balance de calor:

$$\begin{aligned}-A\frac{\partial\sigma_1}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_1}{\partial x} - A\frac{\partial(P_{R1})}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial T} &= 0 \\ -A\frac{\partial\sigma_2}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_2}{\partial x} + A\left[(\sigma_2 + \sigma_6)\frac{\partial P_{R3}}{\partial\phi_2} + \sigma_2\frac{\partial P_{R4}}{\partial\phi_2}\right] + \frac{\partial f}{\partial\phi_2} &= 0 \\ -A\frac{\partial\sigma_3}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_3}{\partial x} + A\left[(\sigma_3 - \sigma_4)\frac{\partial P_{R6}}{\partial\phi_3} + \sigma_3\frac{\partial P_{R7}}{\partial\phi_3}\right] + \frac{\partial f}{\partial\phi_3} &= 0 \\ -A\frac{\partial\sigma_4}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_4}{\partial x} + A\left[(\sigma_4 - \sigma_3)\frac{\partial P_{R8}}{\partial\phi_4} + \sigma_6\frac{64}{12}\frac{\partial P_{R8}}{\partial\phi_4}\right] + \frac{\partial f}{\partial\phi_4} &= 0 \\ -A\frac{\partial\sigma_5}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_5}{\partial x} + A\left[\left(\sigma_5 + \sigma_2\frac{5}{4}\frac{32}{14}\right)\frac{\partial P_{R9}}{\partial\phi_5}\right] + \frac{\partial f}{\partial\phi_5} &= 0 \\ -A\frac{\partial\sigma_6}{\partial t} - Q\frac{\partial\sigma_6}{\partial x} - A\left[\sigma_6\frac{\partial P_{R2}}{\partial\phi_6} + (\sigma_6 + \sigma_2)\frac{\partial P_{R3}}{\partial\phi_6} + \left(\frac{64}{12}\sigma_6 + \sigma_4 - \sigma_5\right)\frac{\partial P_{R8}}{\partial\phi_6}\right. \\ \left. + \left(\sigma_5 + \sigma_2\frac{5}{4}\frac{32}{14}\right)\frac{\partial P_{R9}}{\partial\phi_6}\right] + \frac{\partial f}{\partial\phi_6} &= 0\end{aligned}\tag{4.79}$$

con

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_{R6}}{\partial \phi_3} &= K_{34} \theta_{34}^{T20} \\
\frac{\partial P_{R7}}{\partial \phi_3} &= \frac{v_{s8}(1 - f_{D3})}{h} \\
\frac{\partial P_{R8}}{\partial \phi_4} &= K_{45} \theta_{45}^{T20} \left(\frac{\phi_6}{K_{NIT} + \phi_6} \right) \\
\frac{\partial P_{R8}}{\partial \phi_6} &= K_{45} \theta_{45}^{T20} \left(\frac{K_{NIT}}{(K_{NIT} + \phi_6)^2} \right) \\
\frac{\partial P_{R9}}{\partial \phi_5} &= K_{5D} \theta_{5D}^{T20} \left(\frac{k_{NO3}}{k_{NO3} + \phi_6} \right) \\
\frac{\partial P_{R9}}{\partial \phi_6} &= -K_{5D} \theta_{5D}^{T20} \left(\frac{k_{NO3}}{(k_{NO3} + \phi_6)^2} \right)
\end{aligned} \tag{4.80}$$

Del nuevo sistema adjunto (4.79) se destaca la interacción completa de todos sus procesos. Aun así, el proceso que sobresale de entre todos estos es la vinculación de la temperatura con todos sus aportes externos relacionados con las variables meteorológicas. Esto permite representar de una forma más cercana los procesos físicos que se dan en ecosistemas reales y, al mismo tiempo, conseguir todas las reconstrucciones de las variables en un solo algoritmo.

Otra característica de esta formulación es el carácter no lineal de las expresiones obtenidas, que podría generar un mayor coste computacional. Conociendo esta naturaleza de las expresiones adjuntas es necesario considerar algoritmos con suficiente potencia que permite resolver este tipo de escenarios en el menor tiempo posible.

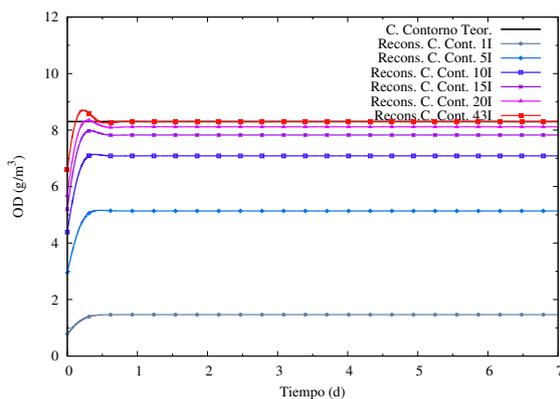
El funcional es el mismo que ya se definió en la ecuación (4.74) o en su defecto ecuación (4.72), con la salvedad de que se incluyen las seis variables adjuntas σ en lugar de tres consideradas anteriormente.

Caso 25. | Reconstrucción de la condición de contorno en el ciclo del nitrógeno con un flujo estacionario.

Con el objetivo de validar las nuevas ecuaciones propuestas se utiliza el Caso 12 definido en la sección 3.4. Como en casos anteriores para el proceso de regulación, se requiere establecer, además de las características hidráulicas y químicas, una estación de monitoreo de calidad. Para esta ocasión la estación está en $x = 10$ km (aguas abajo). Ayudados de los registros de las distintas variables de estado en este punto de control se intenta reconstruir las condiciones de contorno en el intervalo de tiempo propuesto.

Por una parte, analizando las evoluciones en distintas iteraciones de las condiciones

de contorno (véase Figura 4.26), observamos que las señales constantes en el tiempo difieren de las soluciones teóricas en los primeros 21600 s. Tal efecto, es porque en $t = 0$ se impone el valor calculado. Excluyendo esas mínimas diferencias, el método reconstruye las condiciones de contorno de manera satisfactoria. Únicamente 43 iteraciones son suficientes para conseguir la reconstrucción del caso propuesto.



(a) Reconst. c. contorno OD

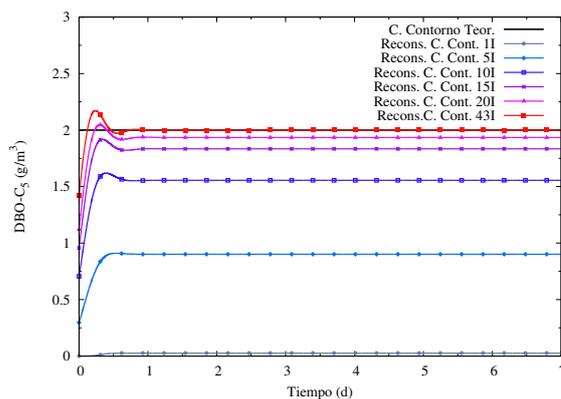
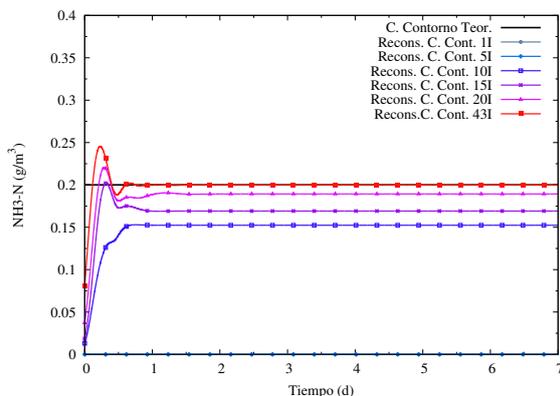
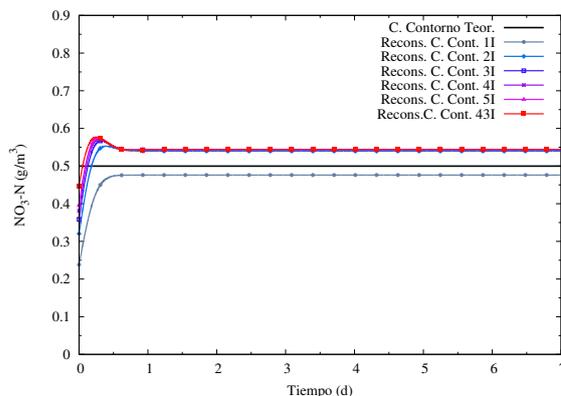
(b) Reconst. c. contorno DBO - C₅(c) Reconst. c. contorno NH₃ - N(d) Reconst. c. contorno NO₃ - N

Figura 4.26: Reconstrucciones de las condiciones de contorno para el modelo de nitrificación adjunto

Con respecto a las variaciones temporales del objetivo en $x = 10$ km, las variables de calidad convergen a las soluciones observadas y están libres de oscilaciones. En 20 iteraciones se llega a la evolución temporal teórica en casi todas las variables en estudio.

Enfocándonos en los perfiles longitudinales reconstruidos del oxígeno disuelto, materia orgánica, nitrógeno amoniacal y nitrato (Figura 4.28 a, b, c, d) respectivamente, se observa que se reconstruye perfectamente en todo el dominio al final del proceso de

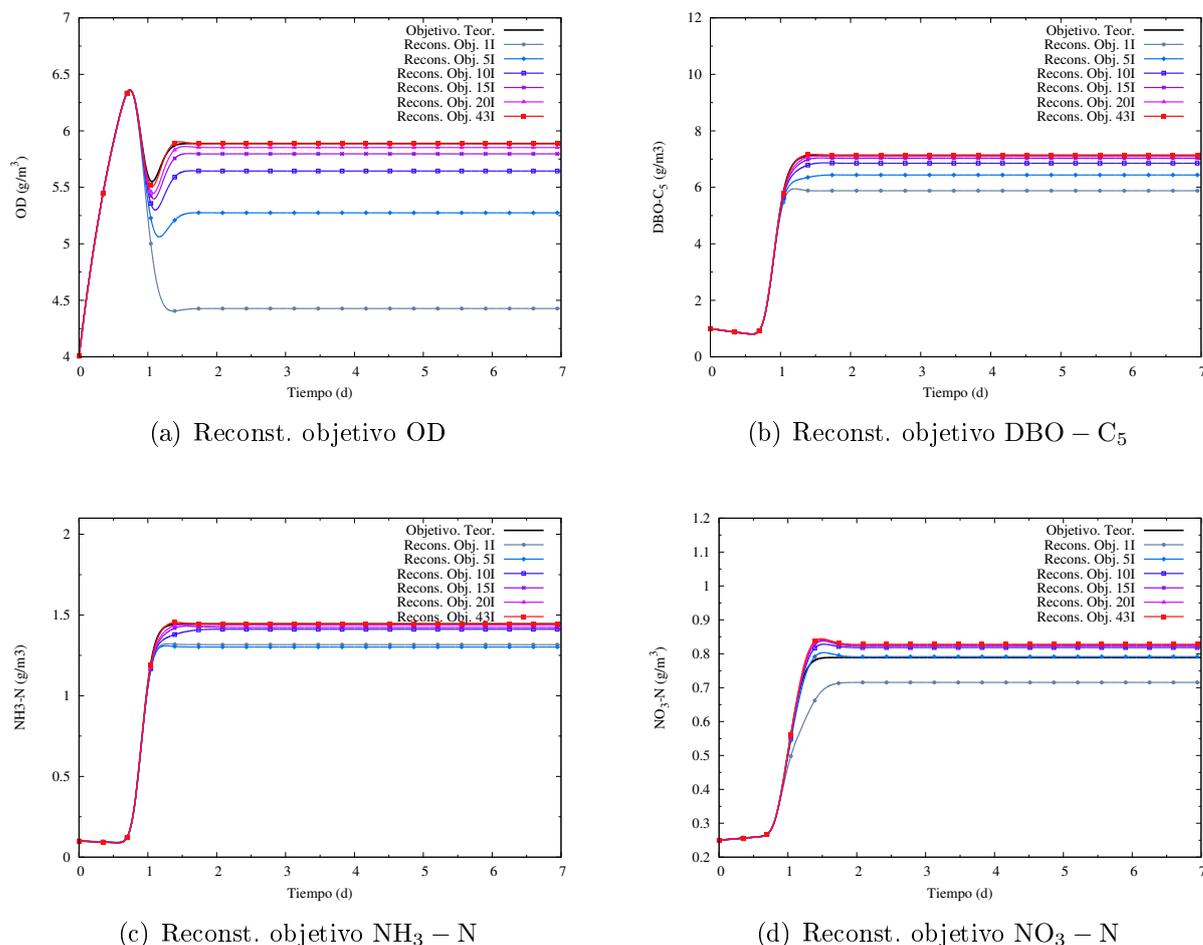
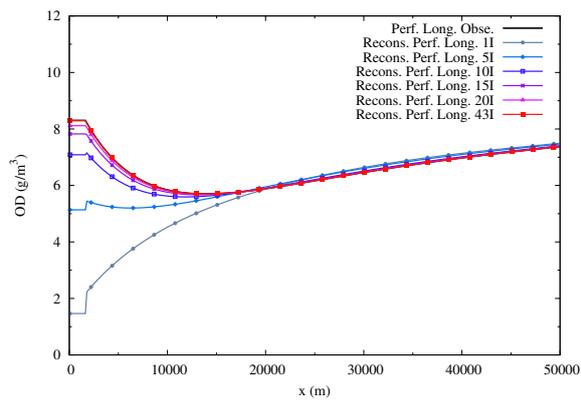


Figura 4.27: Reconstrucciones de los objetivos para el modelo de nitrificación adjunto

optimización.

Evaluando este escenario con la función de error normalizado (4.72) los resultados de las variables del modelo calidad convergen de igual forma a la solución teórica con un mayor número de iteraciones. La Figura 4.29 muestra únicamente las reconstrucciones del contorno tanto de OD, CBOD₅, NH₃ – N y NO₃ – N.

Merece la pena destacar que si el ejemplo actual lo resolviésemos con un proceso de prueba y error con el fin de conseguir estas disposiciones espaciales para cada una de las variables y lograr el valor de entrada con una aproximación aceptable, el número de evaluaciones sería más alto de las 43 iteraciones necesarias en este proceso. Por tanto, una vez más se justifica el proceso empleado en un modelo de calidad de agua.



(a) Reconst. per. long. OD

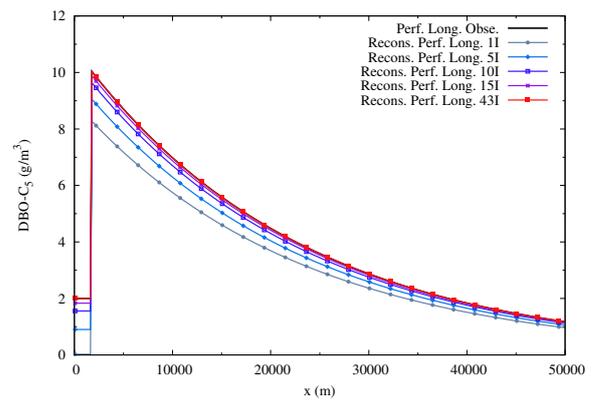
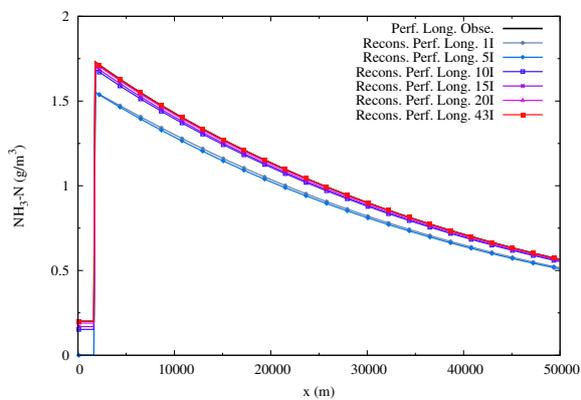
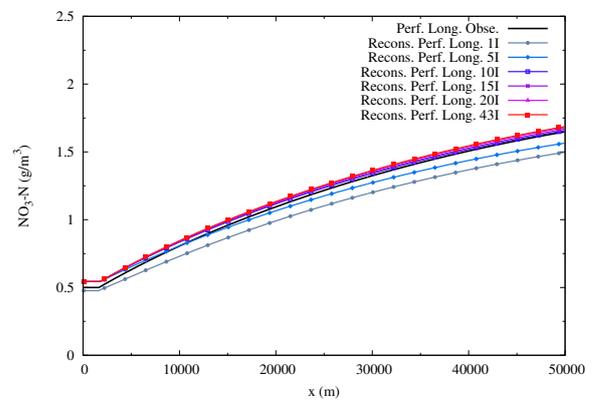
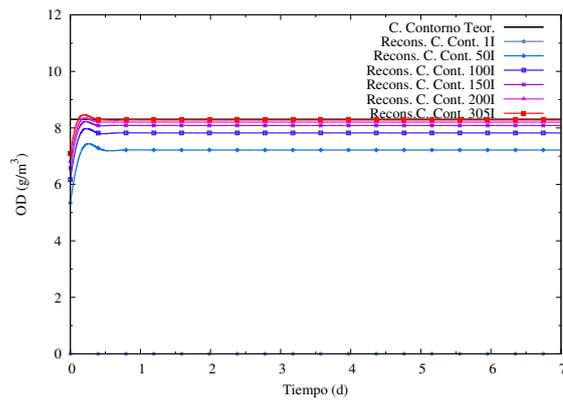
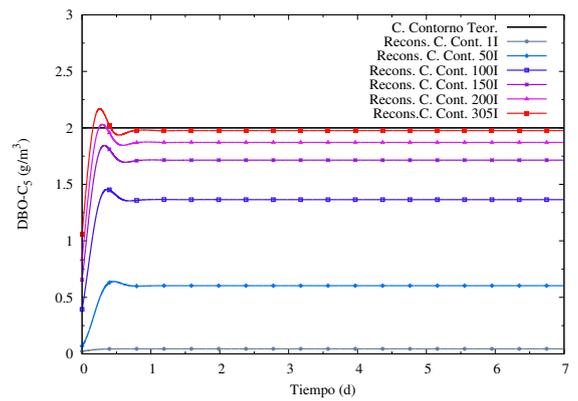
(b) Reconst. per. long. DBO-C_5 (c) Reconst. per. long. $\text{NH}_3\text{-N}$ (d) Reconst. per. long. $\text{NO}_3\text{-N}$

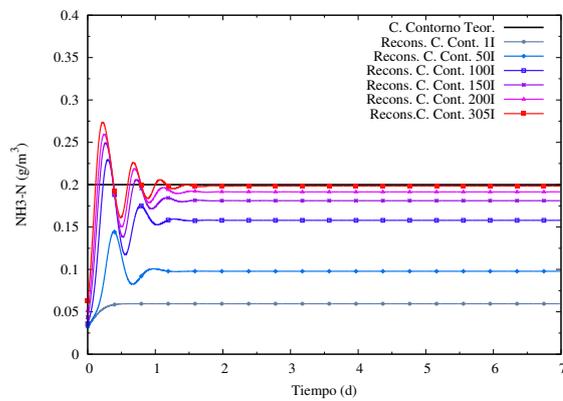
Figura 4.28: Reconstrucciones de los perfiles longitudinales para el modelo de nitrificación adjunto



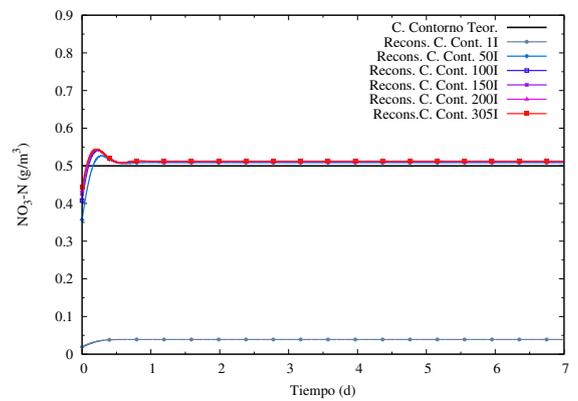
(a) Reconst. c. contorno OD



(b) Reconst. c. contorno DBO – C₅



(c) Reconst. c. contorno NH₃ – N



(d) Reconst. c. contorno NO₃ – N

Figura 4.29: Reconstrucciones de las condiciones de contorno para el modelo de nitrificación adjunto evaluado con el funcional normalizado

4.8 Aplicación del método adjunto a la reconstrucción de variables en un caso fluvial en régimen transitorio

Caso 26. Recuperación de la condición de contorno en la entrada del río Ebro.

La potencia de la herramienta de optimización se pone a prueba en un caso real. Se considera el mismo tramo del río Ebro descrito en la sección 3.7. Para tal efecto, mediante el registro en continuo de las variables de estado de la temperatura, oxígeno disuelto y amonio en la estación de medida 657 (punto 2 de la Figura 3.13) se reconstruirá la información de tales variables a la entrada del dominio (punto 1).

El período de simulación completamente transitorio tanto en la hidrodinámica como en los procesos químicos está comprendido entre los días 15-02-13 al 25-02-13. Los registros de las variables se han extraído de fuentes gubernamentales encargadas de la gestión de la cuenca del río Ebro. La CHE y Sociedad Aragonesa de Gestión Agroambiental (SARGA), esta última al servicio de las políticas agrarias y medioambientales del Departamento de Desarrollo Rural y Sostenibilidad de la Comunidad Autónoma de Aragón, fueron las fuentes principales de información tanto de las variables independientes como de las variables meteorológicas.

Por otra parte, los parámetros (e.g. velocidades de descomposición DBO-C, NO, etc) necesarios para el proceso de nitrificación se tomaron de la Tabla 3.12. Este conjunto de valores se obtuvieron en el proceso de calibración cuando se resolvió el problema hacia adelante del transporte del flujo y solutos presentes en el agua.

La longitud total del tramo en este caso fue dividida en 600 celdas ($\Delta x = 62.916$ m). El coeficiente de Manning utilizado en este evento particular fue de $n = 0.025 \text{ sm}^{-1/3}$. El estado inicial para el flujo y solutos son:

$$Q(x, 0) = 1280 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\phi_1(x, 0) = 7.6^\circ\text{C}$$

$$\phi_3(x, 0) = 0.11 \text{ g}/\text{m}^3$$

$$\phi_6(x, 0) = 11.1 \text{ g}/\text{m}^3$$

Los valores iniciales para las condiciones de contorno de las variables químicas citadas se establecieron a 0.

La Figura 4.30 muestra el hidrograma calculado frente al observado. Las diferencias que aparecen sobre todo en los días 4 y 5 podrían ser producto de una extracción no

controlada para el riego a lo largo del tramo, excluyendo estas diferencias se puede que en general el modelo logra predecir apropiadamente las distribuciones medidas.

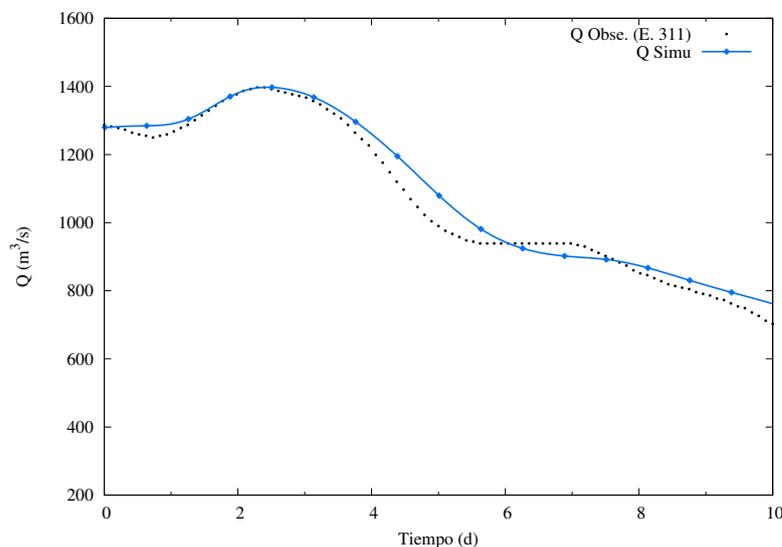
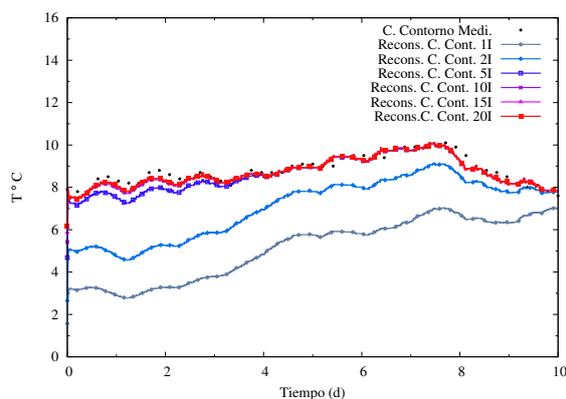


Figura 4.30: Distribución temporal de la variable Q. Caso 26

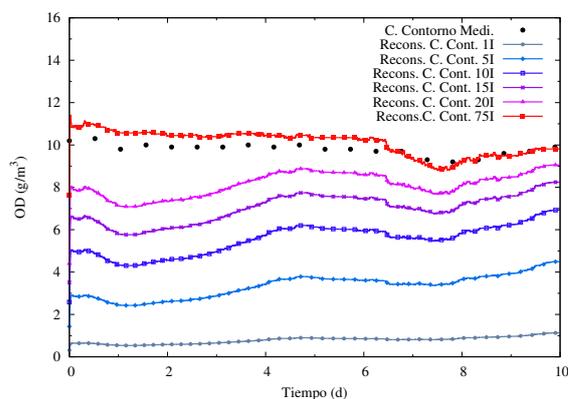
Por otro lado, centrando la atención en las reconstrucciones de las variables, se realiza un primer análisis en las condiciones de contorno. Las soluciones para las reconstrucciones del contorno de la temperatura, OD y $\text{NH}_3 - \text{N}$ se presentan en la Figura 4.31. Estas indican las evoluciones en algunas iteraciones durante el proceso de optimización. En la Figura 4.31a, es destacable la rápida convergencia de la temperatura con respecto a las otras dos reconstrucciones. Con solo 20 iteraciones el método logra aproximarse adecuadamente a la distribución medida aguas arriba (punto 1).

Las reconstrucciones de la variable OD se representan en la Figura 4.31b. El progresivo avance de su distribución temporal desde una condición cercana al cero en la primera iteración consigue una solución final adecuada al cabo de 75 iteraciones.

Por otra parte, la Figura 4.31c, muestra algunas reconstrucciones de la condición de contorno de la variable $\text{NH}_3 - \text{N}$. Como se observa durante los dos primeros días aproximadamente, no existe el registro de los valores medidos de esta variable en la estación (E 930). Esta intermitencia también se produce a lo largo del período simulado. La continua falta de información justifica nuevamente el objetivo de este trabajo, porque el método puede proporcionar ésta información deficiente, conociendo con exactitud una señal medida en cualquier punto del dominio aguas abajo. Debido a la distribución muy variable se representa una figura adicional donde se muestra únicamente la reconstrucción final (Figura 4.31d). En esta se verifica que el algoritmo de regulación permite seguir aceptablemente las distribuciones temporales aún en rangos muy bajos



(a) Reconst. c. contorno T



(b) Reconst. c. contorno DO

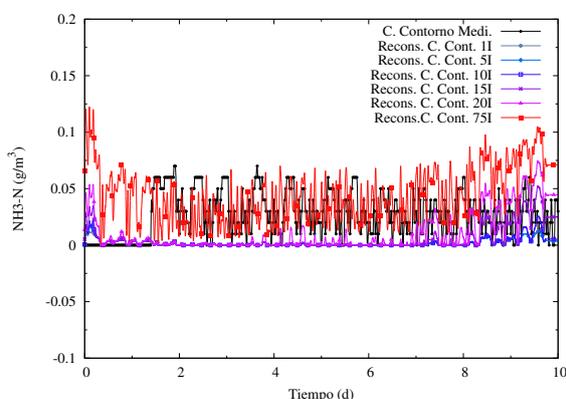
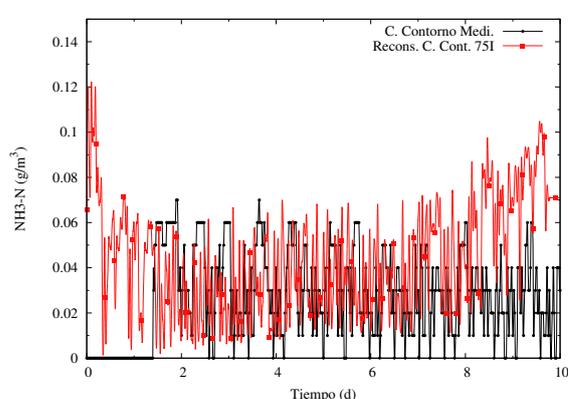
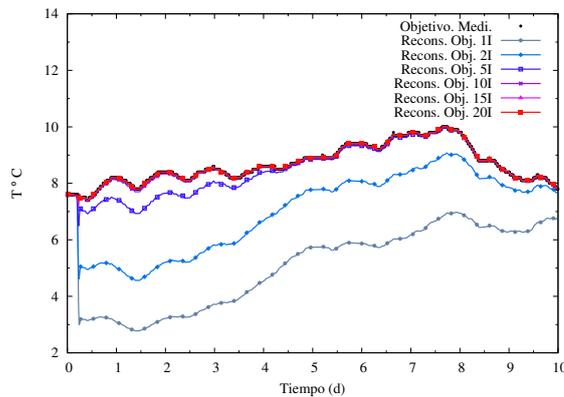
(c) Reconst. c. contorno NH₃ - N(d) Reconst. c. contorno NH₃ - N en la última iteración

Figura 4.31: Reconstrucciones de la condición de contorno de las variables químicas en la estación ubicado en Alagón. Caso 26

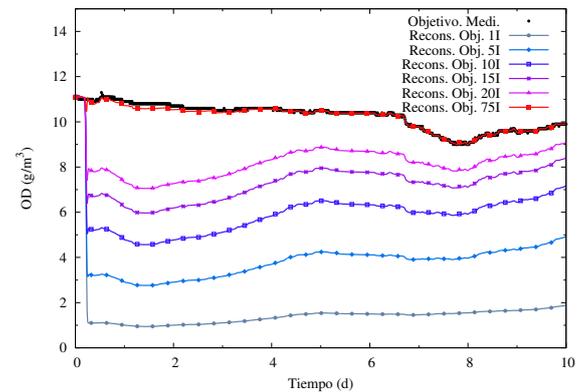
de concentración además de señales con mucho ruido.

La Figura 4.32 ilustra las medidas de las distintas variables de calidad en la estación 656. La señal recuperada en 20 iteraciones para la temperatura (véase Figura 4.32a) es muy similar a la registrada por parte de CHE. El método consigue seguir con exactitud las pronunciadas variaciones de la temperatura a lo largo del período de simulación. En otras palabras, tanto las formulaciones de los aportes externos debidos a los cambios meteorológicos como la formulación adjunta de la ecuación del balance de calor no representa un obstáculo para el método adjunto y de optimización.

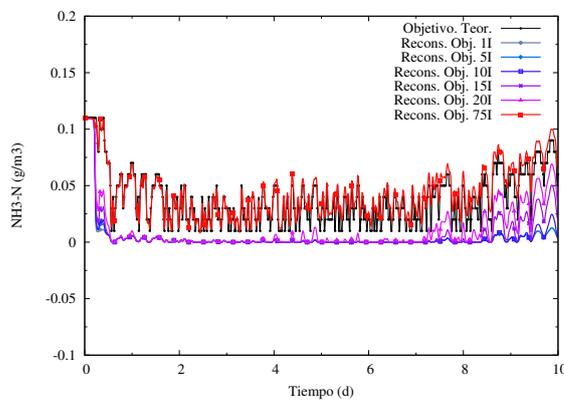
Con el mismo acierto pero con 75 iteraciones la herramienta de cálculo logra reconstruir el objetivo del OD (Figura 4.32b). Con igual número de iteraciones el método



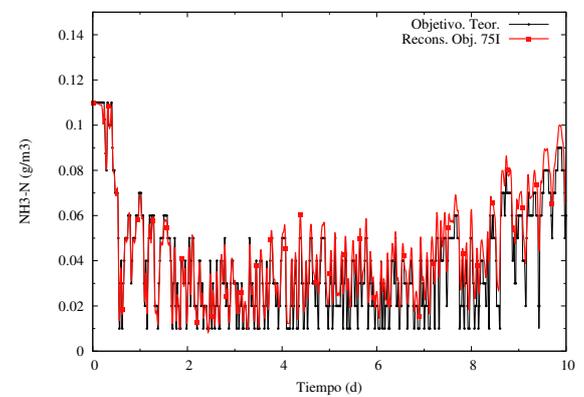
(a) Reconst. objetivo T



(b) Reconst. objetivo DO



(c) Reconst. objetivo NH₃ – N

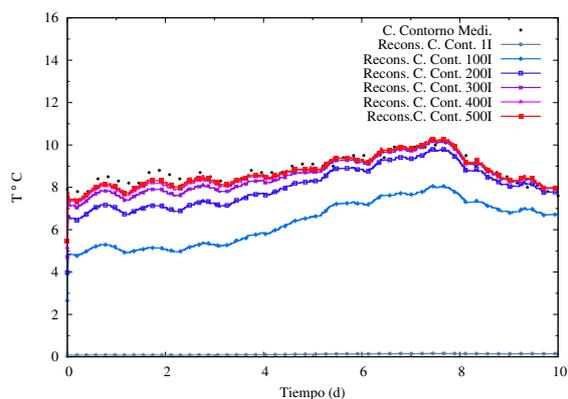


(d) Reconst. objetivo del NH₃ – N en la última iteración

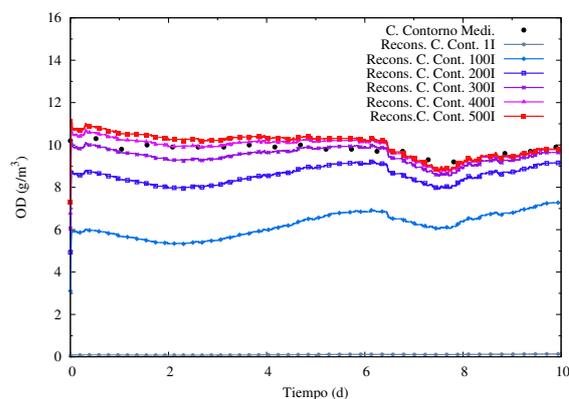
Figura 4.32: Reconstrucciones de los objetivos de las variables químicas en la estación de medida ubicada en Zaragoza. Caso 26

consigue una aproximación satisfactoria de la variable NH₃ – N (Figura 4.32,c,d) demostrando la disminución en el tiempo de calibración de un modelo de calidad de agua en escenarios muy transitorios y con carencia de información.

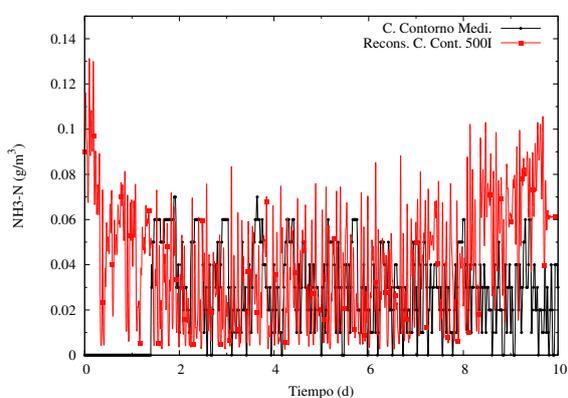
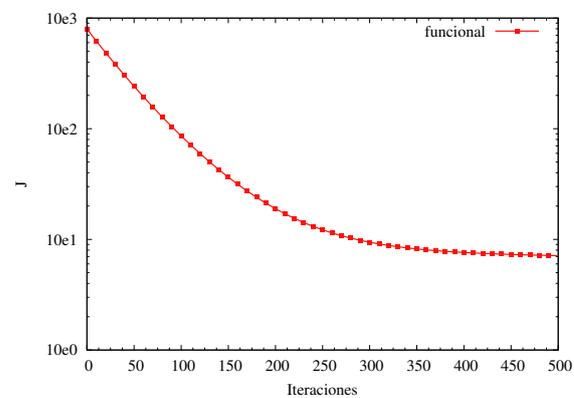
Nuevamente, si este caso se evalúa con el funcional normalizado, los resultados tiende a ser alcanzados pero con mayor número de iteraciones. En este caso concreto la recuperación de la condición de contorno (entrada del dominio) se cumple en 500 iteraciones. Comparando el funcional tanto normalizado como sin normalizar se observa que con 75 o 500 iteraciones la reducción del error es del 99 % aproximadamente.



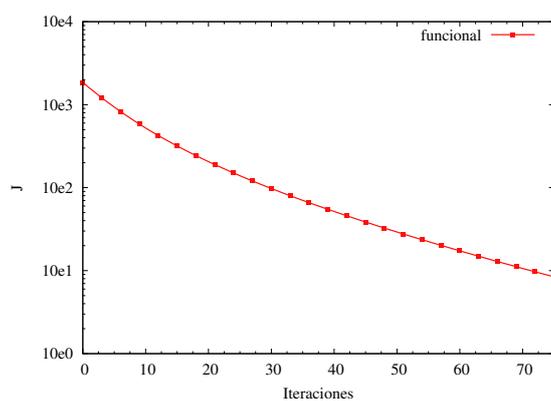
(a) Reconst. c. contorno T



(b) Reconst. c. contorno DO

(c) Reconst. c. contorno NH₃ - N

(d) Evolución del funcional normalizado



(e) Evolución del funcional sin normalizar

Figura 4.33: Reconstrucciones de la condición de contorno de las variables químicas en la estación ubicado en Alagón y evolución del funcional normalizado y sin normalizar. Caso 26

4.9 Método adjunto para reconstruir la señal de la temperatura del aire

La caracterización de los procesos de reacción en el contexto de la calidad del agua es fundamental. Estos a su vez incorporan un número considerable de coeficientes que dependen de la complejidad elegida y que tienen impacto directo sobre los resultados calculados en un período establecido. Sin embargo, estos coeficientes carecen de protocolos normados en materia de medición, obligándonos a utilizar valores pre-establecidos de un estudio tal vez muy distinto a nuestro entorno.

Para hacer frente a esta problemática la técnica de los estado adjuntos surge una vez más como una alternativa. El interés en este apartado se enfoca en la ecuación del balance de calor. Esta expresión vincula parámetros relacionados como la temperatura del aire, velocidad del viento, humedad relativa, entre otras. Estos parámetros se proporcionan al inicio de la simulación durante un tiempo establecido con el fin representar los aportes externos que se dan en situaciones reales.

4.9.1 Modelo adjunto para reconstruir la temperatura del aire

El proceso para reconstruir la variación de la temperatura del aire consta de los mismos pasos que se llevaron a cabo cuando se reconstruyó la condición de contorno de la temperatura del agua. Es decir, se multiplica la ecuación (2.32) por una función σ , conduciendo a una expresión del tipo (4.64), y se toma la primera variación. En este caso es importante destacar que las variaciones se toman tanto para la temperatura del agua (ϕ_1) como respecto a la temperatura del aire (T_a). Si posteriormente a esta fase le incluimos por un lado la función de error y agrupamos términos semejantes se llega a:

$$\begin{aligned} \delta J = \delta I + \delta J = & \int_0^T \int_0^L \left[-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - A\sigma \frac{\partial(P_{R1})}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial T} \right] \delta T dx dt \\ & \int_0^T \int_0^L A\sigma \left[-\frac{\partial(P_{R1})}{\partial T_a} \right] \delta T_a dx dt \\ & + \int_0^L \sigma \delta T \Big|_0^T dx + \int_0^T \sigma Q \delta T \Big|_0^L dt = 0 \end{aligned} \quad (4.81)$$

siendo $P_{R1} = \frac{H_n}{\rho C_p h}$

Si ahora consideramos condiciones de contorno e iniciales adecuadas llegamos a la

expresión:

$$\begin{aligned} \delta J &= \int_0^T \int_0^L \left[-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - A\sigma \frac{\partial(P_{R1})}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial T} \right] \delta T dx dt \\ &\int_0^T \int_0^L A\sigma \left[-\frac{\partial(P_{R1})}{\partial T_a} \right] \delta T_a dx dt = 0 \end{aligned} \quad (4.82)$$

Por tanto, la sensibilidad del funcional a variaciones a la temperatura del aire puede expresarse como:

$$\nabla J = \frac{\delta J}{\delta T_a} \Big|_{(x,t)} = \int_0^L - \sum (A\sigma F)_j^n \Delta x \quad (4.83)$$

encontramos la sensibilidad de J con respecto a las variaciones en la temperatura del aire.

$$\begin{aligned} \text{con}F &= \frac{\partial(P_{R1})}{\partial T_a} = \frac{\partial K_h}{\partial T_a} (T_d - \phi) + K_h \frac{\partial T_e}{\partial T_a} \\ \frac{\partial K_h}{\partial T_a} &= \frac{\partial K_h}{\partial T_d} \frac{\partial T_d}{\partial T_a^*} \frac{\partial T_a^*}{\partial T_a} \\ \frac{\partial T_e}{\partial T_a} &= \frac{\partial T_d}{\partial T_a} - \frac{H_s}{K_h^2} \frac{\partial K_h}{\partial T_a} \\ \frac{\partial T_d}{\partial T_a} &= \frac{\partial T_d}{\partial T_a^*} \frac{\partial T_a^*}{\partial T_a} \\ \frac{\partial T_a^*}{\partial T_a} &= \frac{17.27(237.3 + T_a) - 17.27T_a}{(237.3 + T_a)^2} = \frac{4098}{(237.3 + T_a)^2} \\ \frac{\partial T_d}{\partial T_a^*} &= \frac{237.3(T_a^* + \ln(r_h))}{(T_a^* + \ln(r_h) - 17.27)^2} - \frac{237.3}{T_a^* + \ln(r_h) - 17.27} = \frac{4098}{(17.27 - \ln(r_h) - T_a^*)^2} \\ \frac{\partial K_h}{\partial T_d} &= \left(\frac{3(T_d + T)}{5000} + \frac{3}{400} \right) f_v(u_w) = f_v(u_w) \left[\frac{0.015}{2} + \frac{0.0012}{2}(T + T_d) \right] \\ \frac{\partial(P_{R1})}{\partial T} &= \frac{\partial K_h}{\partial T} (T_e - T) + K_h \left[\frac{\partial T_e}{\partial T} - 1 \right] \\ \frac{\partial K_h}{\partial T} &= \left(\frac{3(T_d + T)}{5000} + \frac{3}{400} \right) f(u_w) + 0.05 \\ \frac{\partial T_e}{\partial T} &= -\frac{H_s}{K_h^2} \frac{\partial K_h}{\partial T} \end{aligned} \quad (4.84)$$

Siempre y cuando se cumpla que:

$$-A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - Q \frac{\partial \sigma}{\partial x} - A\sigma \frac{\partial(P_{R1})}{\partial T} + \frac{\partial f}{\partial T} = 0 \quad (4.85)$$

El método iterativo para reconstruir la temperatura del aire para este caso se define como:

$$T_a(x, t)^{iter+1} = T_a(x, t)^{iter} + \epsilon^{iter} u \sigma(x, t)^{iter} \quad (4.86)$$

4.9.2 Casos test

El Caso 9 descrito en la sección 3.2.3, servirá como caso de partida para generar nuevos escenarios.

Caso 27. | **Recuperación de la información de la variable temperatura del aire con una señal constante de las variables meteorológicas.**

En el Caso 9 la geometría del canal, los aportes laterales y las variables meteorológicas constantes en la configuración del caso permitieron establecer los efectos sobre la temperatura del agua, verificándose como esta variable iba cambiando a lo largo del dominio. Para este caso, sin embargo, el objetivo es reconstruir la temperatura del aire presente en la ecuación de balance de la energía. La señal a reconstruir está definida como una condición constante. Las demás variables meteorológicas como la radiación solar, velocidad del viento y humedad relativa al igual que antes, son constantes y están definidas en la Tabla 3.2.

El resultado de las reconstrucciones se presenta en la Figura 4.34. La Figura 4.34 a, muestra el progreso en cada iteración de la temperatura del aire. La diferencia más notable comparada con la señal propuesta (25 °C) en la última iteración se encuentra en los primeros instantes de tiempo. Después de este tiempo la reconstrucción se asemeja bastante a la solución buscada.

El objetivo calculado y registrado en la estación de medida ubicado 80 km aguas abajo (ver Figura 4.34 b) también converge a la solución de forma apropiada en 50 iteraciones.

Caso 28. | **Recuperación de la información de la temperatura del aire con una función gaussiana tanto para T_a , como para H_s .**

El caso que se presenta incluye las características descritas para el Caso 27, pero con una señal transitoria tanto para la temperatura del aire como para la radiación.

La señal considerada para tal efecto es una función gaussiana definida por la expre-

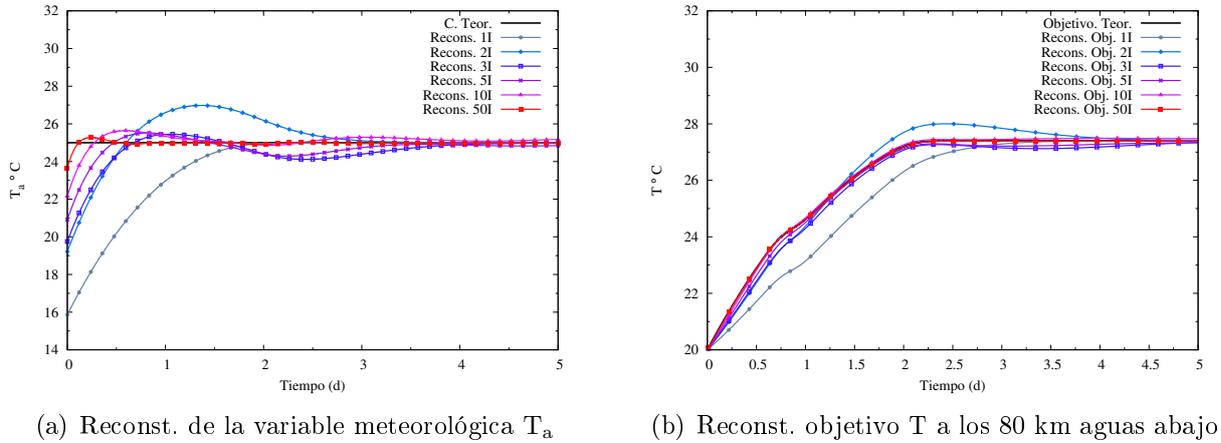


Figura 4.34: Evoluciones temporales de la temperatura del aire y temperatura del agua. Caso 27

sión:

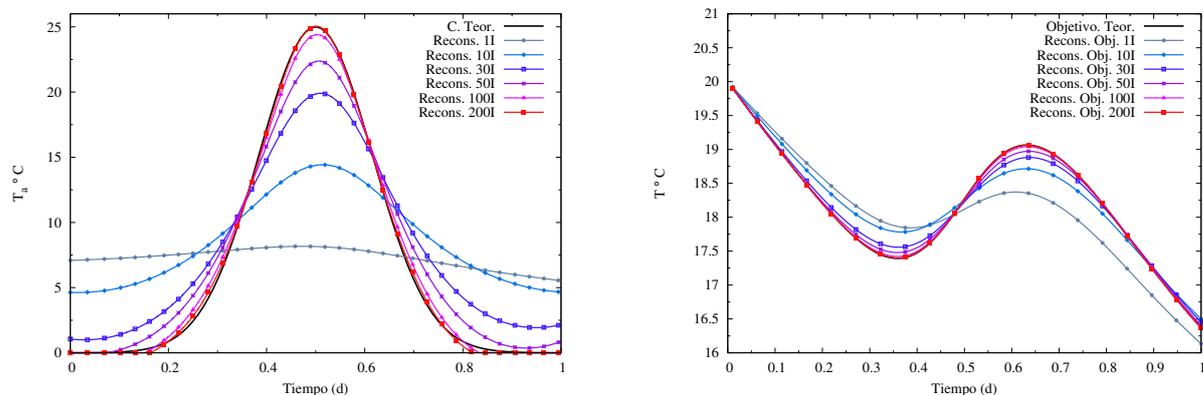
$$T_a = ae^{-\frac{(t-b)^2}{2c^2}} \quad (4.87)$$

El efecto de cambiar las condiciones de la temperatura del aire así como la radiación solar sobre el Caso 27 con un tiempo de simulación de un día se observa en la Figura 4.35.

La reconstrucción de la temperatura de aire con su máximo valor al mediodía se representa en la Figura 4.35a. Tanto la distribución temporal optimizada como la teórica llegan a ser similares tras 200 iteraciones. El efecto de considerar una señal más real se ve reflejado en la estación de medida ubicada a los 80 km (Figura 4.35b). En la primera mitad de la representación se observan las consecuencias de los aportes laterales de la variación de la temperatura del aire y la radiación solar, mientras que en la segunda mitad se verifica como el valor máximo de la temperatura del aire y la radiación influye sobre la temperatura del agua incrementando su valor hasta los 19 °C. Esta variación es totalmente capturada por el método de optimización, que la reconstruye de forma apropiada tras 200 iteraciones.

Caso 29. Recuperación de la información de la temperatura del aire con caudal variable y funciones sinusoidales para T_a y H_s .

Las nuevas condiciones para este escenario son: un pulso de Q dado por la forma (4.88).



(a) Reconst. de la variable meteorológica T_a con una función gaussiana

(b) Reconst. objetivo T a los 80 km aguas abajo

Figura 4.35: Evoluciones temporales de la temperatura del aire y temperatura del agua. Caso 28

$$Q(0, t) = \begin{cases} 5 \text{ m}^3/\text{s} & 0 < t \leq 2d \\ 35 \text{ m}^3/\text{s} & 2d \leq t \leq 4d \\ 5 \text{ m}^3/\text{s} & t > 4d \end{cases} \quad (4.88)$$

y una función sinusoidal para las dos variables meteorológicas temperatura del aire y la radiación solar dada por:

$$T_a(t) = A_p \text{sen}(\omega t + \varphi) \quad (4.89)$$

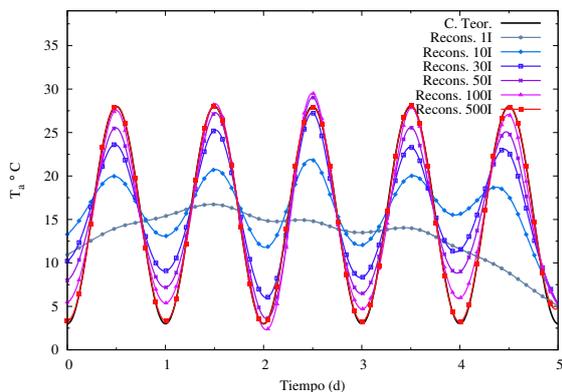
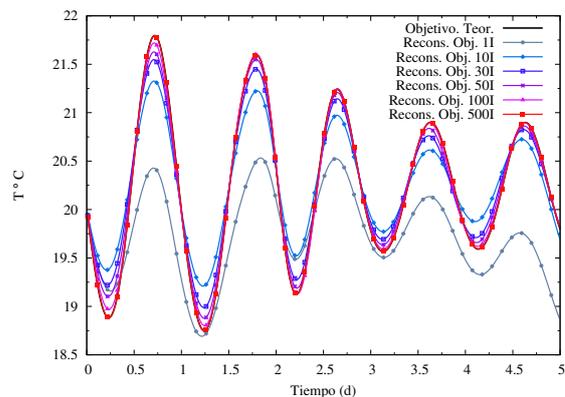
siendo A_p = la amplitud de oscilación

ω = la velocidad angular; $\omega = 2\pi f_e$

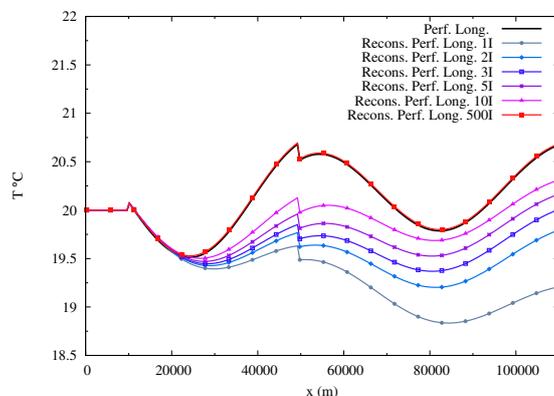
f_e = frecuencia de oscilación

φ = la fase inicial

El resultado de este ejemplo transitorio se ilustra en la Figura 4.36. Un primer análisis del ejemplo planteado podría ser con respecto a las variaciones del T_a y H_s en el período simulado. Estas distribuciones causan fuertes variaciones en torno a 3°C (ver Figura 4.36b). Si el caudal es de $35\text{m}^3/\text{s}$ las variables meteorológicas no tienen mayor impacto. Por el contrario, cuando el caudal transportado es de $5 \text{ m}^3/\text{s}$ el impacto de la T_a y H_s influye considerablemente sobre la temperatura del agua. Concluyendo que para este caso, grandes variaciones de caudal pueden afectar la temperatura aguas abajo.

(a) Reconst. T_a con función sinusoidal

(b) Reconst. objetivo T



(c) Reconst. perf. long. T a los 5 d

Figura 4.36: Reconstrucción de las señales T_a , T y perfil long. de T en estado transitorio. Caso 29

De nuevo, el algoritmo planteado puede reconstruir cualquier distribución variable en el tiempo en un número aceptable de iteraciones. Las reconstrucciones tanto de la temperatura de aire, de la temperatura del agua y su perfil longitudinal llegan a ser muy similares a las registradas después de 500 iteraciones.

4.9.3 Caso fluvial

Caso 30. Recuperación de la información de la variable temperatura del aire en un tramo del río Ebro

Finalmente se presenta un escenario real, donde las condiciones hidrodinámicas y meteorológicas varían drásticamente a lo largo del día, en especial la temperatura ambiente y la velocidad del viento. Se considera un tramo del río Ebro entre Alagón y

Zaragoza (Figura 3.13). El período de simulación fue desde el 01-05-12 al 10-05-12. Los datos necesarios en este intervalo de tiempo fueron extraídos de los organismos públicos CHE y SARGA. La información tanto de la velocidad del viento como de la radiación solar medida en la estación Montañana se muestra en la Figura 4.37.

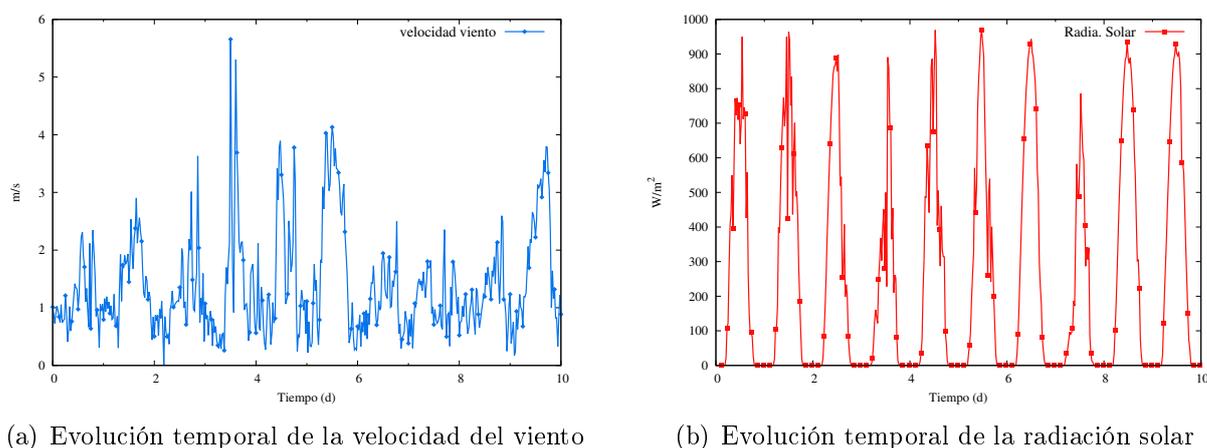


Figura 4.37: Variables meteorológicas del viento (a) y radiación solar (b) en la estación ubicada en Zaragoza (Estación Montañana)

Con la información disponible en la estación de medida ubicada en Zaragoza se plantea a reconstruir la temperatura del aire medida en la estación denominada Montañana ubicada a 9.3 km de Zaragoza (punto 2 de la Figura 3.13) usando la metodología adjunta.

Se realizó una simulación hidráulica usando un hidrograma aguas arriba (Alagón) como el que se muestra en la Figura 4.38.

Los resultados de este evento completamente transitorio de las variables hidrodinámicas caudal y nivel superficial del cauce se observa en la Figura 4.39. Las representaciones tanto de caudal como de calado se aproximan satisfactoriamente a los medidos por la CHE.

Por otro lado, las variables reconstruidas tanto de la temperatura del agua como de la temperatura del aire medidas en la estación de Zaragoza y estación de Montañana respectivamente son detalladas en la Figura 4.40.

Dos aspectos importantes son destacables a la vista de los resultados: por un lado, está el impacto sobre la calidad del agua y por otra parte, está el método de optimización.

El método implementado consigue capturar de forma acertada la distribución tem-

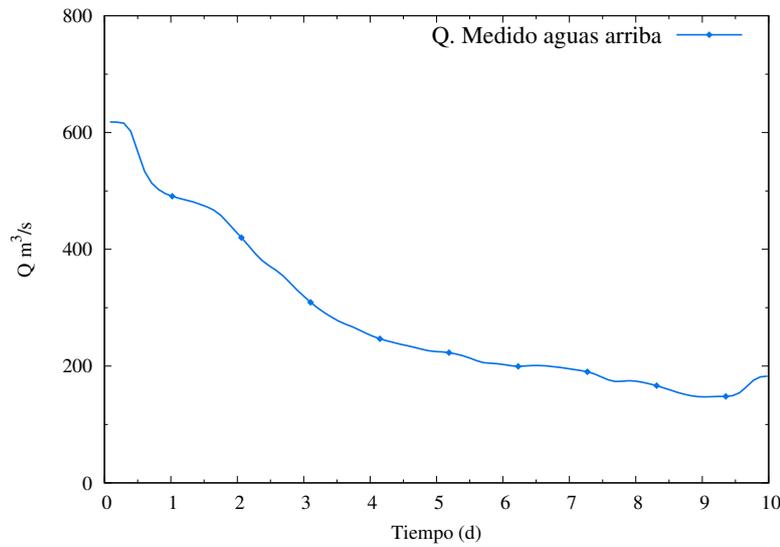
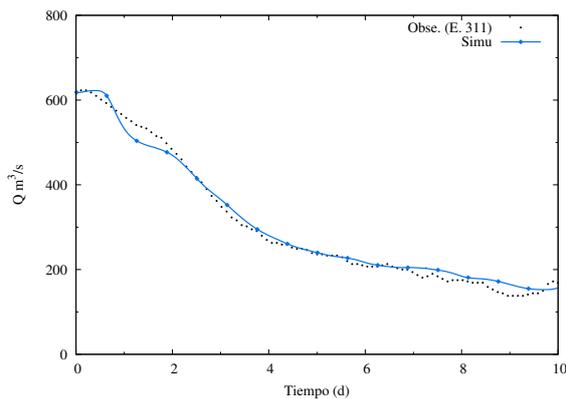
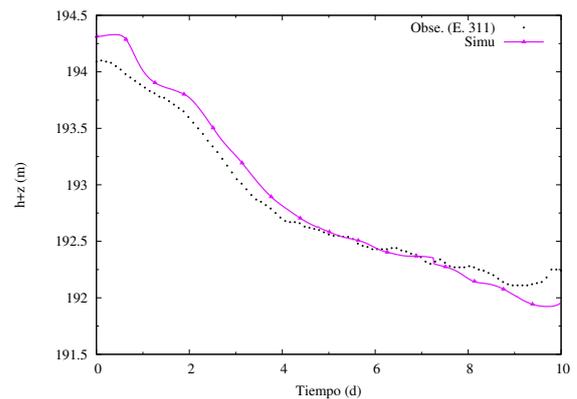


Figura 4.38: Hidrograma de caudal impuesto a la entrada del dominio (Alagón)



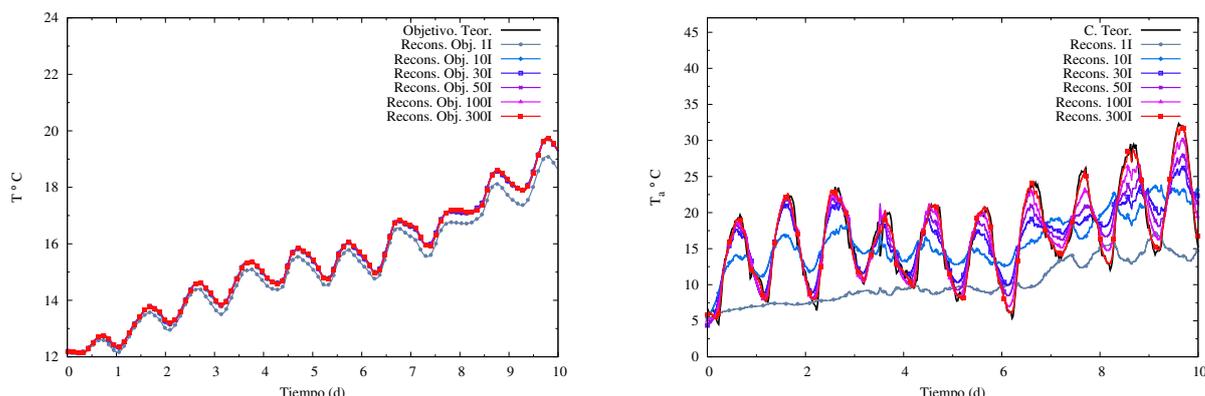
(a) Comparación de las evoluciones temporales de Q observado y simulado



(b) Comparación de las evoluciones temporales del nivel superficial observado y simulado

Figura 4.39: Variables hidrodinámicas de caudal (a) y nivel superficial (b) en la estación ubicada en Zaragoza. Caso 30

poral de temperatura del agua. El progreso de cada iteración para alcanzar la señal medida se observa en la Figura 4.40a, donde no se aprecia ninguna inestabilidad ni oscilación. Asimismo, la herramienta de simulación reconstruye la señal medida de la temperatura del aire (Figura 4.40b) en la estación de monitoreo con variaciones muy pronunciadas a lo largo del tiempo de los parámetros meteorológicos, principalmente en la velocidad del aire cuyos valores registrados están comprendidos entre los 0.5 y 6 m/s (Figura 4.37). Conocer la distribución temporal de la temperatura del agua en un



(a) Comparación de las evoluciones temporales de T observado y simulado

(b) Comparación de las evoluciones temporales de la T_a observada y simulada

Figura 4.40: Variables químicas reconstruidas en la estación de Zaragoza. Caso 30

punto específico permite tomar acciones con el fin de mitigar algún efecto perjudicial sobre la vida acuática presente en la cuenca del río Ebro.

4.10 Tiempos de cálculo

Finalmente, el análisis del método numérico implementado se centra en la cantidad de tiempo que se requiere para procesar las distintas instrucciones del modelo. Esto permite tener una noción general del costo computacional utilizando el método adjunto como técnica alternativa para encontrar la sensibilidad de una función error. El tiempo necesario para alcanzar valores aceptables de los parámetros de calidad se distribuye en función del cálculo. Se distinguen tres bloques:

- Hidrodinámico más el transporte de solutos de la primera vez.
- El modelo adjunto (simulación hacia atrás) de la fase iterativa.
- El modelo del transporte (simulación hacia adelante) en la fase iterativa.

El primer bloque de operaciones (cómputo hidrodinámico más transporte de solutos) consiste en resolver las variables hidráulicas y químicas, al mismo tiempo que se va almacenando la información de cada una de ellas en cada intervalo de tiempo y nodo computacional. Cuando la reconstrucción de una variable pertenece a un modelo de calidad también es necesario el almacenamiento de las variables de estado debido a la presencia de estas en las formulaciones adjuntas. El tiempo requerido por este bloque incluye además la escritura de ficheros tanto espacial como temporal de las variables.

Este bloque definido como punto 1 en la Figura 4.8 es indispensable para conocer el flujo necesario y caracterizar el transporte. Este cálculo solo se realiza una vez en cada proceso de optimización. Con las variables hidrodinámicas resueltas es posible entrar en el proceso iterativo tanto del sistema adjunto como del sistema físico. El siguiente bloque (Figura 4.8) permite determinar las variables adjuntas desde el tiempo final hacia el tiempo inicial. Dentro de estas instrucciones se encuentra de igual manera la escritura de ficheros relacionados con la información de los puntos estratégicos de la reconstrucción de la condición de contorno ($x = 0$) y la reconstrucción de la estación medida ($x = x_M$). El último bloque (5) de instrucciones hace referencia al cálculo de las ecuaciones físicas de transporte. La solución se consigue con la información almacenada de las variables hidráulicas y las variables químicas. De la misma manera que antes, dentro de este conjunto de operaciones se encuentra la escritura de las soluciones óptimas de los parámetros reconstruidos tanto en puntos fijos a lo largo del temporal como en instantes fijos a lo largo del cauce.

En la Tabla 4.1 se muestran los tiempos de cálculo de cada uno de los tres bloques para algunos test propuestos en la validación de las formulaciones adjuntas. Estos tiempos se normalizaron con el número de celdas de la malla, es decir, dividiendo el tiempo requerido de la simulación para el número de celdas de cada escenario. Los casos seleccionados fueron elegidos en base al proceso físico, parámetros reconstruidos y escenario simulado. El primer caso considerado (Caso 19) incluye los procesos de convección-difusión-reacción de un soluto en estado estacionario para el flujo, mientras que el tipo de señal reconstruido tanto para la condición de contorno como el objetivo varía en función del tiempo. El Caso 19 requiere de 9.864 ms. cuando se ejecutan por primera vez hacia adelante los algoritmos de resolución de las ecuaciones del flujo y la de transporte. El tiempo de simulación utilizado en calcular la ecuación adjunta de convección-difusión y reacción es de 0.519 ms. Por el contrario, el tiempo que necesita el modelo para encontrar la solución de la ecuación física es de 0.8568 ms. Según estos resultados, el mayor tiempo se encuentra en el primer bloque de operaciones seguido de la resolución de la ecuación física y la solución de la ecuación adjunta. Es importante mencionar que el tiempo empleado en el primer bloque se realiza una sola vez, mientras que, los tiempos de los bloques 2 y 3 son por iteración. Por tanto, estos tiempos se deben multiplicar por el número de iteraciones hasta alcanzar la solución final y depende de la convergencia del caso de estudio. En los escenarios propuestos, un máximo de 500 iteraciones se consideraron necesarias.

El Caso 24 elegido en el análisis de ejecución de operaciones contempla tres parámetros a reconstruir (temperatura, oxígeno disuelto y materia orgánica), con los procesos de convección-reacción dentro de un evento estacionario. En este caso llama

Caso	CPU		
	Cálculo hidro.+trans.	Cálculo ec. adjunta	Cálculo ec. física
Caso 19	98.4	0.519	0.852
Caso 24	111.6	3.762	3.276
Caso 26	1830	78	70.8
Caso 30	1632	27	27

Tabla 4.1: Tiempos de cálculo en ms (normalizado con el número de celdas e iteración) del método implementado en diferentes casos test

la atención el tiempo requerido para resolver el sistema adjunto, no muy distante del utilizado para resolver el sistema físico. Esto es debido a la resolución extra del proceso de degradación de la materia orgánica, producto de la derivada parcial con respecto al oxígeno disuelto. No obstante, el tiempo total requerido para encontrar los valores óptimos de las variables de estado es de 1164 ms lo que permite reafirmar la adecuación del método adjunto cuando reconstruye varios parámetros a la vez.

El Caso 26 constituye un escenario real, con varias variables a reconstruir (temperatura, oxígeno disuelto y amonio) sobre un estado completamente transitorio. En este caso, el mayor coste computacional claramente se encuentra en el proceso iterativo ya que el tiempo aproximado para resolver las 75 iteraciones es de 11160 ms. Aún así este valor es aceptable en comparación con la complejidad del caso. Si este mismo caso se resolviera con un proceso de prueba y error el tiempo empleado para encontrar una solución correcta podría ser notablemente más alto. Por ejemplo, no existen valores de referencia para las variables de estado en el contorno (como sí que pasa con las velocidades de descomposición) que puedan aproximarse de forma idónea a la solución final. Por lo tanto, es poco probable que con únicamente 75 iteraciones se llegase a determinar los valores óptimos de las variables de estado, sabiendo que es mucho más difícil estimar un juego de valores iniciales que estén dentro de estos valores aceptables para que la solución llegue a converger lo más pronto posible.

El Caso 30 representa un tramo del río Ebro donde se quiere reconstruir un parámetro de la ecuación de la temperatura (temperatura del aire). Un aspecto a remarcar es la coincidencia que existe entre los tiempos de simulación hacia atrás y los de la simulación adelante aún en presencia de operaciones adicionales. El término que contempla los aportes de salida y entrada de calor del sistema tiene operaciones adicionales producto de las derivadas parciales del coeficiente de intercambio neto y la tempera-

tura de equilibrio. Estas derivadas parciales están presentes en el término fuente de la ecuación adjunta, adicionando operaciones extras en el esquema adjunto. Todos los tiempos encontrados se obtuvieron con un procesador AMD A10-9700 RADEON R7, 10 cores 4C+4G.

Por último, es importante mencionar que los tiempos mostrados en la Tabla 4.1 se pueden disminuir considerando algún tipo de aceleradores de código. La implementación de técnicas de paralelización como OpenMP, OpenACC o GPU ayudan a disminuir el costo computacional significativamente, dando como resultado una solución con la misma precisión pero con menos tiempo de ejecución.

Conclusiones

Para la cuantificación detallada del grado de contaminación de el agua de un río se requiere de una herramienta computacional que permita obtener resultados confiables en un determinado problema. En este aspecto, la innovación de las técnicas numéricas para predecir de forma apropiada las interacciones hidráulicas y químicas resulta relevante en la actualidad. Con la contaminación cuantificada de un río se pueden tomar acciones sobre:

- La reutilización de las aguas residuales para recuperar agua, nutrientes o energía.
- La disponibilidad de agua dulce para las necesidades básicas.
- La conservación y utilización de manera sostenible un tramo de río.

En este trabajo, se propuso diseñar, programar y verificar una herramienta de simulación unidimensional combinando el transporte de solutos en aguas poco profundas (o modelo de onda dinámica) con un modelo de calidad de agua y con un sistema de control. El módulo de control permite recuperar información de las variables de estado de los solutos tanto en regímenes estacionarios como transitorios. Los tres modelos (hidrodinámico, calidad y control) han sido discretizados empleando un esquema explícito-implícito de volúmenes finitos. Resulta evidente que solo la coincidencia de los resultados numéricos con las medidas de campo o analíticas pueden apoyar la aplicabilidad de un modelo; las similitudes entre ellas nos aportan una buena referencia del comportamiento del esquema propuesto. Se presentan a continuación las conclusiones derivadas del trabajo divididas por apartados.

5.1 Módulo hidrodinámico

Todos los resultados numéricos generados tras la discretización de las ecuaciones del flujo y transporte con el esquema upwind explícito de primer orden muestran concordancia con los escenarios planteados. En este sentido las principales conclusiones del modelo hidrodinámico son:

- La discretización del flujo de agua de las ecuaciones de continuidad y de momento con sus respectivos términos fuentes, permitiendo calcular las variables del flujo en los nodos computacionales y dotando a la herramienta de un carácter predictivo.
- El modelo unidimensional aproxima satisfactoriamente los perfiles de calado y caudal frente a las soluciones analíticas. Los casos test propuestos sobre canales prismáticos en estado estacionario y transitorio, incluso en presencia de términos fuente de fondo y de fricción convergen a una solución estable libre de oscilaciones durante todo el período de simulación.
- Cuando la evaluación se realiza sobre casos reales donde la forma de la sección transversal es arbitraria el método es de igual forma eficiente, robusto y conservativo.
- Las extracciones de agua del río para el riego no son despreciables cuando el periodo estacional es de estiaje. Por tanto, es imprescindible el control de este uso para disminuir las diferencias significativas entre la dinámica de las distribuciones medidas y simuladas. Sin embargo, cuando el caudal transportado está comprendido entre los 140 y 1400 m³/s las posibles extracciones en el río Ebro son menos relevantes al momento de validar el modelo hidrodinámico.

5.2 Módulo de calidad de agua

Los modelos de calidad necesitan de una representación acertada del flujo hidrodinámico para describir apropiadamente la distribución y el impacto de las sustancias presentes en una masa de agua. Por tanto, el acoplamiento entre el modelo hidráulico y químico es de vital importancia en la predicción de un evento real. Desde este punto de vista, el trabajo realizado permite extraer las siguientes conclusiones:

- El acoplamiento numérico entre las ecuaciones de aguas poco profundas en 1D y el transporte de solutos presenta propiedades satisfactorias de conservación, estabilidad y exactitud en los test formulados.
- Los procesos de convección-difusión y reacción simulados son acordes con los casos analíticos analizados. Las distribuciones tanto espaciales como temporales son muy

semejantes a las soluciones analíticas de los procesos presentes en el transporte de los solutos. Merece la pena destacar que cuando el proceso de difusión se realiza mediante un esquema explícito la condición de estabilidad resulta más restrictiva, dando como consecuencia pasos de tiempo más pequeños e influyendo en el tiempo de cálculo.

- Las formulaciones utilizadas abstraen satisfactoriamente las interdependencias e interacciones entre las variables de estado. El nivel de detalle de las formulaciones presentadas está en función del escenario planteado y de la información disponible. En particular, la estructura presentada en base al nivel de complejidad puede suponer una ventaja para la planificación y gestión de los recursos hídricos. Sobre este tema los organismos encargados de la gestión pueden tomar decisiones acertadas en función de sus necesidades y ante una situación en particular.

- El tiempo de cálculo depende directamente del tipo de complejidad utilizada. No es lo mismo resolver una única ecuación de transporte con sus proceso de convección-difusión y reacción que un sistema de ecuaciones no lineales que representan todos los procesos físico-químico de cada variable de estado.

- Las fuentes (puntuales y no-puntuales) se integran correctamente en el tramo de río y/o canal y en el punto específico de descarga. El modelo permite incluir sin restricción alguna el número de fuentes arbitrarias requeridas por el usuario.

- La formulación de temperatura utilizada permite describir adecuadamente el proceso físico real. Utilizando esta formulación simplificada se consigue buena aproximación de las variaciones de las distribuciones tanto temporales como espaciales de los casos test propuestos siempre que la información este disponible en cantidad y calidad. Una ventaja importante radica en el hecho de evitar un modelo muy complejo que requiere de múltiples parámetros que, en algunos de los casos, son difíciles de medir con la frecuencia y calidad necesaria.

- La sensibilidad de los aportes meteorológicos se incrementa cuando los caudales están el rango 20-50 m³/s. Estudios previos han demostrado que la prelación de esta sensibilidad es, en este orden, al caudal que fluye por la sección, la temperatura del agua, la temperatura del aire, seguidos de la humedad relativa, la radiación solar y el ancho de la sección. Este hecho fue verificado en la sección 3.7 y sub-sección 4.9.3, donde se observó una influencia muy pequeña de la temperatura del aire cuando el caudal transportado estuvo en torno a los 180 y 620 m³/s, siendo más determinante la condición de contorno de la temperatura del agua.

- La formulación de los procesos físico-químicos de los constituyentes contempla una extensa lista de parámetros. La principal consecuencia de aproximar los procesos

acorde a la realidad es que los grados de libertad aumentan, se necesitan diversos parámetros los cuales en muchos de los casos no se miden (por ejemplo velocidades de sedimentación de DBO-C) y, en otros, las medidas distan mucho entre sí. Para solventar el inconveniente se utilizan valores de parámetros que han sido medidos en otras cuencas hidrográficas que son propias del entorno estudiado. Esta utilización repercute de forma directa en la calibración del modelo, dando como consecuencia un proceso de prueba y error bastante tedioso, sobre todo cuando el escenario es transitorio. El tiempo requerido para el proceso de calibración depende en gran medida de la experiencia y el conocimiento del modelador a cargo.

- Si, además de la falta de medida de parámetros, la información de la condición de contorno de las variables de estado es deficiente o discontinua el modelo predictivo pierde credibilidad. Para evitar este inconveniente se proponen valores aleatorios de contorno de las variables de estado como se realizó en la sección 3.7. Este juego de valores fue mejorado en base a un ensayo de prueba y error, llegando a finalizar el proceso cuando la distribución alcanzó resultados muy próximos a los medidos. Otra posibilidad es la interpolación lineal de la información ausente con la información disponible, pero que a su vez genera grandes diferencias al momento de validar el modelo.

- En el caso real del tramo del río Ebro, el OD se reproduce de manera satisfactoria con el modelo propuesto. El patrón temporal numérico de la variable de estado OD en el período invernal sigue la tendencia de la distribución medida en la estación de Zaragoza. Sin embargo, se aprecian diferencias significativas en algunos picos de concentración. Esta circunstancia puede deberse a que no se consideró el proceso de florecimiento y muerte de las plantas (por falta de medidas en la cuenca del Ebro). Otra posible causa puede ser la incertidumbre que existe en la medición. Uno de los aspectos más importantes que minimizan esta incertidumbre es el mantenimiento periódico de las estaciones de medida. Pero, si hay déficit de medidas de algunas variables de estado, es muy probable que no haya programas de mantenimiento (y si los hay no con la frecuencia idónea) en la cuenca que ayuden a contrarrestar estos inconvenientes.

5.3 Módulo de control

La tercera parte de este trabajo presentó una aproximación adjunta para determinar la sensibilidad del error en la predicción de una concentración o temperatura con respecto a un parámetro del sistema como una fuente, la condición inicial, la condición de contorno o un parámetro del modelo de balance de energía. Se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- En el método adjunto, la sensibilidad se obtiene resolviendo el sistema adjunto de las ecuaciones de transporte físicas. El procedimiento para encontrar la ecuación adjunta de una variable de estado extensible a un sistema de ecuaciones. Si el modelo físico es un sistema de ecuaciones no-lineales, el desarrollo de la formulación adjunta para cada variable adjunta sigue los mismos pasos que para una variable.

- Siempre que se determine una nueva sensibilidad del modelo frente a un parámetro del sistema, se debe desarrollar todo el proceso matemático. Sin embargo, se ha encontrado que en la ecuación de transporte adjunta se mantienen invariantes los procesos de convección y difusión independientemente del parámetro a reconstruir. Por el contrario, el proceso de reacción requiere notable atención ya que el nuevo término encontrado en la ecuación adjunta es muy diferente del término original de la ecuación física, sobre todo cuando el proceso físico-químico es complejo.

- Una de las ventajas del método adjunto es que con solo dos simulaciones del modelo (un modelo directo y un modelo hacia atrás) se puede obtener la sensibilidad para todos los parámetros del sistema. Cuando la sensibilidad crece de acuerdo al número de parámetros del sistema, se necesitan menos simulaciones para alcanzar el objetivo planteado. Esta característica hace que el método sea atractivo frente a los métodos directos tradicionales.

- La eficiencia de la técnica radica en que la resolución del sistema adjunto se calcula sobre la misma malla, produciendo la misma exactitud en los resultados que en el problema físico. Es decir, se utiliza el mismo esquema numérico para resolver el problema directo y el sistema adjunto, suponiendo que las características hidráulicas se conocen con antelación producto, de una simulación directa. Esta cualidad permite integrar el módulo de control mediante pocos cambios en la estructura del código, evitando incluir módulos externos que en algunas ocasiones pueden ralentizar el proceso o que, por ejemplo, no contemplen la misma capacidad de cálculo cuando el escenario cambia de un estado estacionario a transitorio.

- La técnica adjunta requiere pocas iteraciones tanto en el estado estacionario como en transitorio para conseguir una convergencia aceptable. No obstante, el grado de

exactitud de esta convergencia viene determinado por la función a reconstruir y la tolerancia deseada. Funciones discontinuas tienden a presentar variaciones significativas conforme se aproximan al objetivo (sirva como ejemplo la reconstrucción de la condición de contorno con los procesos de convección-difusión y reacción (sub-sección 4.4)). Para funciones más suaves (gaussianas), la reconstrucción resulta menos oscilatoria y más rápida.

- La velocidad de convergencia se acelera cuando la longitud de paso se calcula mediante un algoritmo de búsqueda inteligente con respecto a un algoritmo de paso fijo. Este proceso permitió especificar correctamente la longitud de paso en cada iteración dentro de un amplio intervalo definido.

- La recuperación de la información de las variables de estado en el contorno presenta una ventaja adicional porque podría ayudar en la monitorización en continuo de ciertos indicadores de calidad. En particular, cuando el caudal del río es inferior a $50 \text{ m}^3/\text{s}$ existen problemas de medición de parámetros en continuo de algunas de las estaciones de control, atribuidos a la deposición de sedimentos. Esto provoca que el agua quede estancada impidiendo la representación real de la calidad que circula por el río. Por tanto, en estas circunstancias no se bombea el agua para su respectivo análisis lo que imposibilita conocer el estado de salud de la cuenca en ciertos períodos de tiempo.

- Otra ventaja del método adjunto es que, una vez conseguido el objetivo en un punto de medida establecido, se logra recuperar la distribución espacial de la variable deseada. Una aplicación directa se centraría en evitar concentraciones muy bajas o muy altas en puntos específicos de la red. De esta manera, el análisis será más eficaz puesto que se puede conocer las variaciones temporales de concentración y las dinámicas de cada sustancia y sus interdependencias a lo largo del tramo elegido.

- Tanto las reconstrucciones temporales como las espaciales de los casos test y de los casos reales están libres de oscilaciones. Es de vital importancia que el método logre mantener la estabilidad numérica independientemente del proceso (convección, difusión o reacción), del tipo (estacionario-transitorio) y del parámetro del sistema reconstruido (condición inicial, de contorno o fuente).

- Una desventaja del método es la cantidad de recursos computacionales (memoria en particular) requerida, ya que las concentraciones y la hidrodinámica calculadas hacia adelante deben almacenarse en todos los nodos computacionales y en todo momento. Otro inconveniente del método adjunto es la dificultad de implementar el proceso en un código pre-existente que no fue diseñado para integrar un solucionador adjunto.

Otra desventaja es la ubicación del objetivo. De acuerdo a esta posición, la recons-

trucción de la variable es menos precisa cuanto más alejado este el objetivo con respecto al punto de reconstrucción. El método requiere de un objetivo claro y continuo para lograr la reconstrucción deseada.

- Si se analizan los tiempos de cálculos se comprueba que en escenarios muy complejos y transitorios el tiempo requerido para encontrar soluciones aceptables puede ser del orden de minutos. Como ejemplo, la reconstrucción de las variables del modelo de la nitrificación en una cuenca real con una longitud aproximada de 44 km costo 0.186 min en un ordenador de escritorio convencional. Este tiempo está dividido en tres bloques de instrucciones: una simulación directa que comprende el cálculo del flujo y transporte más el respectivo almacenamiento de información de las variables dependientes, una simulación hacia atrás donde se resuelve las ecuaciones adjuntas y una simulación hacia adelante donde solo se resuelve la ecuación física del transporte de solutos. Los dos últimos bloques de instrucciones se calculan repetidas veces hasta encontrar un resultado acorde con el medido. En general, el orden de estos tiempos por cada iteración en función de su malla está de acuerdo al siguiente orden: bloque hidrodinámico, bloque adjunto y bloque físico.

En general, el modelo presentado en este trabajo es capaz de resolver tanto el flujo hidrodinámico como el transporte de solutos de forma precisa y eficiente en eventos transitorios muy marcados. Este hecho es análogo cuando la información de las variables de estado químicas es insuficiente. En este ámbito la herramienta podría caracterizarse como *útil* en la predicción, control y recuperación de la información en varios escenarios.

Bibliografía

- [1] Ambrose R, Barnwell T, McCutcheon S, Williams J (1996) Computer models for water quality analysis. *Water Resources Handbook* pp 14–1
- [2] Ambrose RB (1988) WASP4, a hydrodynamic and water quality model: model theory, user's manual and programmer's guide. US Environmental Protection Agency
- [3] Ambrose RB, Wool TA, Martin JL, et al. (1993) The water quality analysis simulation program, wasp5, part a: Model documentation. Environmental Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, Athens, GA
- [4] Anderson W, Venkatakrisnan V (1997) Aerodynamic design optimization on unstructured grids with a continuous adjoint formulation. Tech. rep., Institute for computer applications in science and engineering hamton VA
- [5] Anderson WK, Venkatakrisnan V (1999) Aerodynamic design optimization on unstructured grids with a continuous adjoint formulation. *Computers & Fluids* 28(4-5):443–480
- [6] Arora RK (2015) Optimization: algorithms and applications. Chapman and Hall/CRC
- [7] Back T (1996) Evolutionary algorithms in theory and practice: evolution strategies, evolutionary programming, genetic algorithms. Oxford University Press
- [8] Begnudelli L, Sanders BF (2006) Unstructured grid finite-volume algorithm for shallow-water flow and scalar transport with wetting and drying. *Journal of Hydraulic Engineering* 132(4):371–384
- [9] Benedini M, Tsakiris G (2013) Water quality modelling for rivers and streams. Springer Science & Business Media
- [10] Bird RB (2002) Transport phenomena. *Applied Mechanics Reviews* 55(1):R1–R4

-
- [11] Bird RB, Stewart WE, Lightfoot EN (1992) Fenómenos de transporte: un estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento. TP156 B5321
- [12] Bowden K, Brown S (1984) Relating effluent control parameters to river quality objectives using a generalised catchment simulation model. *Water Science and Technology* 16(5-7):197–206
- [13] Bowie GL, Mills WB, Porcella DB, Campbell CL, Pagenkopf JR, Rupp GL, Johnson KM, Chan P, Gherini SA, Chamberlin CE, et al. (1985) Rates, constants, and kinetics formulations in surface water quality modeling. EPA 600:3–85
- [14] Bras RL (1990) *Hydrology: An introduction to hydrologic science*. Addison Wesley Publishing Company
- [15] Bravo HR, Krajewski WF, Holly FM (1993) State space model for river temperature prediction. *Water Resources Research* 29(5):1457–1466
- [16] Brown LC, Barnwell TO (1987) The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and user manual. US Environmental Protection Agency. Office of Research and Development. Environmental Research Laboratory
- [17] Burguete J, García-Navarro P (2001) Efficient construction of high-resolution TVD conservative schemes for equations with source terms: application to shallow water flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 37(2):209–248
- [18] Camp T (1963) First expanded bod-do model
- [19] Casas JLO (2002) La Directiva Marco del Agua (2000/60/ce): aspectos relevantes para el proyecto guadalmed. *Limnetica* 21(3-4):5–12
- [20] Chapra S, Pelletier G, Tao H (2003) *Qual2k: a modeling framework for simulating river and stream water quality*. Documentation and user manual
- [21] Chapra S, Pelletier G, Tao H (2008) *Qual2k: a modeling framework for simulating river and stream water quality, version 2.11: documentation and users manual*. Civil and Environmental Engineering Dept, Tufts University, Medford, MA pp 1–109
- [22] Chapra SC (2003) Engineering water quality models and tmdls. *Journal of water resources planning and management* 129(4):247–256

- [23] Chapra SC (2008) Surface water-quality modeling. Waveland press
- [24] Chen CW, Orlob GT (1975) Ecologic simulation for aquatic environments. Systems analysis and simulation in ecology 3:475–588
- [25] Chow VT, Maidment DR, Mays LW, Saldarriaga JG, et al. (1994) Hidrología aplicada. 551.48 C4H5
- [26] Churchill M, Elmore H, Buckingham R (1962) The prediction of stream reaeration rates. International Journal of Air and Water Pollution 6:467–504, DOI 10.1016/B978-1-4832-8391-3.50015-4
- [27] Cox B (2003) A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers. Science of the Total Environment 314:335–377
- [28] Davis HF, Snider AD, Davis CT (1961) Introduction to vector analysis. Allyn and Bacon Boston, Mass
- [29] Di Toro DM, O'Connor DJ, Thomann RV (1971) A Dynamic Model of the Phytoplankton Population in the Sacramento—San Joaquin Delta, Environmental Engineering and Science Program, N.Y., chap 5, pp 131–180. DOI 10.1021/ba-1971-0106.ch005
- [30] Di Toro DM, Fitzpatrick JJ, Thomann RV, et al. (1983) Documentation for water quality analysis simulation program (wasp) and model verification program (MVP). Hydroscience, Inc, Westwood, NJ 07675
- [31] Ding Y, Wang SS (2006) Optimal control of open-channel flow using adjoint sensitivity analysis. Journal of Hydraulic Engineering 132(11):1215–1228
- [32] Ding Y, Jia Y, Wang SS (2004) Identification of manning's roughness coefficients in shallow water flows. Journal of Hydraulic Engineering 130(6):501–510
- [33] Dobbins WE (1964) Bod and oxygen relationship in streams. Journal of the Sanitary Engineering Division 90(3):53–78
- [34] Dortch M, Schneider T, Martin J, Zimmerman M, Griffin D (1990) Ce-qual-riv1: A dynamic, one-dimensional (longitudinal) water quality model for streams. user's manual. Tech. rep., Army Engineer Waterways Experiment Station Vicksburg Ms Enviromental LAB

-
- [35] Edinger JE (1974) Heat exchange and transport in the environment, rep. Electr Power Res Inst 14:125
- [36] Edinger JE, Geyer J (1965) Heat exchange in the environment. Electr Power Res Inst
- [37] Fair GM (1939) The dissolved oxygen sag: An analysis. Sewage Works Journal pp 445–461
- [38] Genuchten MT, Leij FJ, Skaggs TH, Toride N, Bradford SA, Pontedeiro EM, et al. (2013) Exact analytical solutions for contaminant transport in rivers 1. the equilibrium advection-dispersion equation. *Journal of Hydrology and Hydromechanics* 61(2):146–160
- [39] Giannakoglou K (2002) Design of optimal aerodynamic shapes using stochastic optimization methods and computational intelligence. *Progress in Aerospace Sciences* 38:43–76
- [40] Giles M, Pierce N, Giles M, Pierce N (1997) Adjoint equations in cfd-duality, boundary conditions and solution behaviour. In: 13th Computational Fluid Dynamics Conference, p 1850
- [41] Giles MB, Pierce NA (1998) On the properties of solutions of the adjoint euler equations. *Numerical Methods for Fluid Dynamics VI ICFD* pp 1–16
- [42] Giles MB, Pierce NA (2000) An introduction to the adjoint approach to design. *Flow, turbulence and combustion* 65(3-4):393–415
- [43] Giles MB, Duta MC, Muller JD, Pierce NA (2003) Algorithm developments for discrete adjoint methods. *AIAA journal* 41(2):198–205
- [44] Hirsch C (2007) *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*. Elsevier
- [45] Horritt M (2005) *Parameterisation, validation and uncertainty analysis of cfd models of fluvial and flood hydraulics in the natural environment*. Computational Fluid Dynamics: Applications in Environmental Hydraulics John Wiley and Sons
- [46] Howland W, Thomas Jr H (1949) Pollution load capacity of streams. *Water & sewage works* 96(7):264
- [47] Huang J, Yin H, Chapra SC, Zhou Q (2017) Modelling dissolved oxygen depression in an urban river in china. *Water* 9(7):520

-
- [48] Jameson A (1988) Aerodynamic design via control theory. *Journal of Scientific Computing* 3(3):233–260
- [49] Jameson A (1995) Optimum aerodynamic design using cfd and control theory. In: 12th Computational Fluid Dynamics Conference, p 1729
- [50] Jameson A, Alonso J (1996) Automatic aerodynamic optimization on distributed memory architectures. In: 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, p 409
- [51] Jameson A, Reuther J (1994) Control theory based airfoil design using the euler equations. In: 5th Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, p 4272
- [52] Jameson A, Martinelli L, Pierce N (1998) Optimum aerodynamic design using the navier–stokes equations. *Theoretical and computational fluid dynamics* 10(1-4):213–237
- [53] Ji ZG (2017) *Hydrodynamics and water quality: modeling rivers, lakes, and estuaries*. John Wiley & Sons
- [54] Jian L, Zhongwu J, Wenjun Y (2014) Numerical modeling of the Xiangxi River algal bloom and sediment-related process in china. *Ecological Informatics* 22:23–35
- [55] Jobson HE, Schoellhamer DH (1993) Users manual for a branched lagrangian transport model. Tech. rep., US Geological Survey; Books and Open-File Reports
- [56] Katopodes ND, Piasecki M (1996) Site and size optimization of contaminant sources in surface water systems. *Journal of environmental engineering* 122(10):917–923
- [57] Kelley CT (1999) *Iterative methods for optimization*, vol 16. SIAM
- [58] Kim S, Alonso J, Jameson A (2000) Two-dimensional high-lift aerodynamic optimization using the continuous adjoint method. In: 8th Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization
- [59] Kim S, Alonso J, Jameson A (2002) Design optimization of high-lift configurations using a viscous continuous adjoint method. In: 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, p 844
- [60] Kundu P (2004) I., M. Cohen, *Fluid Mechanics*. Elsevier Academic Press, New York, US

- [61] Lacasta A, García-Navarro P (2016) A gpu accelerated adjoint-based optimizer for inverse modeling of the two-dimensional shallow water equations. *Computers & Fluids* 136:371–383
- [62] Lacasta A, Morales-Hernández M, Brufau P, García-Navarro P (2018) Application of an adjoint-based optimization procedure for the optimal control of internal boundary conditions in the shallow water equations. *Journal of Hydraulic Research* 56(1):111–123
- [63] Lacasta A, Caviedes-Voullieme D, García-Navarro P (2019) Application of the adjoint method for the reconstruction of the boundary condition in unsteady shallow water flow simulation. In: *Advances in Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control in Engineering and Sciences*, Springer, pp 157–172
- [64] Lardner R (1993) Optimal control of open boundary conditions for a numerical tidal model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 102(3):367–387
- [65] Lardner R, Al-Rabeh A, Gunay N (1993) Optimal estimation of parameters for a two-dimensional hydrodynamical model of the arabian gulf. *Journal of Geophysical Research: Oceans* 98(C10):18229–18242
- [66] Lee I, Hwang H, Lee J, Yu N, Yun J, Kim H (2017) Modeling approach to evaluation of environmental impacts on river water quality: A case study with galing river, kuantan, pahang, malaysia. *Ecological Modelling* 353:167–173
- [67] Li WH (1962) Unsteady dissolved-oxygen sag in a stream. *Journal of the Sanitary Engineering Division* 88(3):75–86
- [68] Lindenschmidt KE (2006) The effect of complexity on parameter sensitivity and model uncertainty in river water quality modelling. *Ecological Modelling* 190(1):72–86
- [69] MacDonald I (1996) Analysis and computation of steady open channel flow. PhD thesis, University of Reading Reading, UK
- [70] MacDonald I, Baines M, Nichols N, Samuels P (1995) Comparison of some steady state saint-venant solvers for some test problems with analytic solutions. *Numerical Analysis Report* 2:95

-
- [71] Marchuk GI (2011) *Mathematical models in environmental problems*, vol 16. Elsevier
- [72] Marchuk GI (2013) *Adjoint equations and analysis of complex systems*, vol 295. Springer Science & Business Media
- [73] Martin JL, McCutcheon SC (1998) *Hydrodynamics and transport for water quality modeling*. CRC Press
- [74] Moin P (2010) *Fundamentals of engineering numerical analysis*. Cambridge University Press
- [75] Morales Hernández M, García Navarro P (2014) *Efficient explicit finite volume schemes for the shallow water equations with solute transport*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, Prensas de la Universidad
- [76] Morales-Hernández M, García-Navarro P, Murillo J (2012) A large time step 1d upwind explicit scheme ($\text{cfl} > 1$): Application to shallow water equations. *Journal of Computational Physics* 231(19):6532–6557
- [77] Morales-Hernández M, Murillo J, García-Navarro P (2018) Diffusion–dispersion numerical discretization for solute transport in 2d transient shallow flows. *Environmental Fluid Mechanics* DOI 10.1007/s10652-018-9644-2
- [78] Morales-Hernández M, Murillo J, García-Navarro P (2019) Diffusion–dispersion numerical discretization for solute transport in 2d transient shallow flows. *Environmental Fluid Mechanics* 19(5):1217–1234
- [79] Murillo J, García-Navarro P (2010) Weak solutions for partial differential equations with source terms: Application to the shallow water equations. *Journal of Computational Physics* 229(11):4327–4368
- [80] Murillo J, Navas-Montilla A (2016) A comprehensive explanation and exercise of the source terms in hyperbolic systems using roe type solutions. application to the 1d-2d shallow water equations. *Advances in Water Resources* 98:70–96
- [81] Murillo J, García-Navarro P, Burguete J (2009) Conservative numerical simulation of multi-component transport in two-dimensional unsteady shallow water flow. *Journal of Computational Physics* 228(15):5539–5573
- [82] Navas-Montilla A, Murillo J (2018) 2d well-balanced augmented ader schemes for the shallow water equations with bed elevation and extension to the rotating frame. *Journal of Computational Physics* 372:316–348

- [83] Neuman SP (1980) A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology: 3. improved solution method and added perspective. *Water Resources Research* 16(2):331–346
- [84] Neupauer RM (2010) Adjoint sensitivity analysis of contaminant concentrations in water distribution systems. *Journal of engineering mechanics* 137(1):31–39
- [85] Nocedal J, Wright S (2006) *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media
- [86] O'Connor DJ, Dobbins WE (1956) The mechanics of reaeration in natural streams. *Journal of the Sanitary Engineering Division* 82(6):1–30
- [87] Orlob GT (1983) *Mathematical modeling of water quality: Streams, lakes and reservoirs*, vol 12. John Wiley & Sons
- [88] Panchang VG, Richardson J (1993) Inverse adjoint estimation of eddy viscosity for coastal flow models. *Journal of Hydraulic Engineering* 119(4):506–524
- [89] Pandit AB, Kumar JK (2019) *Drinking Water Treatment for Developing Countries: Physical, Chemical and Biological Pollutants*. Royal Society of Chemistry
- [90] Park RA, Clough JS, Wellman MC (2008) Aquatox: Modeling environmental fate and ecological effects in aquatic ecosystems. *Ecological Modelling* 213(1):1–15
- [91] Phelps EB, Streeter H (1958) *A study of the pollution and natural purification of the ohio river*. Tech. rep., US Department of Health, Education, & Welfare
- [92] Piasecki M (2002) Optimization of in-stream dissolved oxygen via control of cbod loadings using the adjoint method. pp 547–565, DOI 10.1061/40628(268)35
- [93] Piasecki M (2004) Optimal wasteload allocation procedure for achieving dissolved oxygen water quality objectives. i: Sensitivity analysis. *Journal of Environmental Engineering* 130(11):1322–1334
- [94] Piasecki M (2004) Optimal wasteload allocation procedure for achieving dissolved oxygen water quality objectives. ii: Optimal load control. *Journal of Environmental Engineering* 130(11):1335–1344
- [95] Piasecki M, Katopodes N (1970) Containment of deliberate toxic spills in surface waters. *WIT Transactions on Ecology and the Environment* 8
- [96] Piasecki M, Katopodes ND (1997) Control of contaminant releases in rivers. ii: Optimal design. *Journal of Hydraulic Engineering* 123(6):493–503

- [97] Piasecki M, Katopodes ND (1999) Identification of stream dispersion coefficients by adjoint sensitivity method. *Journal of Hydraulic Engineering* 125(7):714–724
- [98] Plessix RE (2006) A review of the adjoint-state method for computing the gradient of a functional with geophysical applications. *Geophysical Journal International* 167(2):495–503
- [99] Powell MJ (1994) A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation. In: *Advances in optimization and numerical analysis*, Springer, pp 51–67
- [100] Press WH, Teukolsky SA, Vetterling WT, Flannery BP (2007) *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge University Press
- [101] Rao SS (2009) *Engineering optimization: theory and practice*. John Wiley & Sons
- [102] Rauch W, Henze M, Koncsos L, Reichert P, Shanahan P, Somlyódy L, Vanrolleghem P (1998) River water quality modelling: I. state of the art. *Water Science and Technology* 38(11):237–244
- [103] Reichert P, Borchardt D, Henze M, Rauch W, Shanahan P, Somlyódy L, Vanrolleghem P (2001) River water quality model no. 1 (rwqm1): Ii. biochemical process equations. *Water Science and Technology* 43(5):11–30
- [104] Reichert P, Borchardt D, Henze M, Rauch W, Shanahan P, Somlyody L, Vanrolleghem PA (2001) *River water quality model. 1*, IWA Publishing
- [105] Reuther J, Alonso JJ, Rimlinger MJ, Jameson A (1999) Aerodynamic shape optimization of supersonic aircraft configurations via an adjoint formulation on distributed memory parallel computers. *Computers & fluids* 28(4-5):675–700
- [106] Reynolds CS (2006) *The Ecology of Phytoplankton*. Ecology, Biodiversity and Conservation, Cambridge University Press
- [107] Ritchie H, Roser M (2020) Sanitation. *Our World in Data* <https://ourworldindata.org/sanitation>
- [108] Ryan P, Stolzenbach K (1972) *Engineering aspects of heat disposal from power generation*, (drf harleman, ed.). RM Parson Laboratory for Water Resources and Hydrodynamics, Department of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA

- [109] Sanders BF, Katopodes ND (1999) Control of canal flow by adjoint sensitivity method. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering* 125(5):287–297
- [110] Sanders BF, Katopodes ND (2000) Adjoint sensitivity analysis for shallow-water wave control. *Journal of Engineering Mechanics* 126(9):909–919
- [111] Sharma D, Kansal A (2013) Assessment of river quality models: a review. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology* 12(3):285–311
- [112] Shen J, Kuo A (1996) Inverse estimation of parameters for an estuarine eutrophication model. *Journal of Environmental Engineering* 122(11):1031–1040
- [113] Solow D (2007) Linear and nonlinear programming. *Wiley Encyclopedia of Computer Science and Engineering*
- [114] Steele J (1965) Notes on some theoretical problems in production ecology. primary production in aquatic environments. goldman, cr berkley
- [115] Streeter HW, Phelps EB (1958) A study of the pollution and natural purification of the ohio river. Tech. rep., US Department of Health, Education, & Welfare
- [116] Sun W, Yuan YX (2006) Optimization theory and methods: nonlinear programming, vol 1. Springer Science & Business Media
- [117] Sykes J, Wilson J, Andrews R (1985) Sensitivity analysis for steady state groundwater flow using adjoint operators. *Water Resources Research* 21(3):359–371
- [118] Taboada-Vázquez R (2006) Modelos de aguas poco profundas obtenidos mediante la técnica de desarrollos asintóticos. PhD thesis, Universidad Da Coruña
- [119] Tchobanoglous G, Burton FL, et al. (1979) Wastewater engineering: treatment, disposal, and reuse. McGraw-Hill New York, NY
- [120] Theriault EJ (1927) The dissolved oxygen demand of polluted waters. *Public Health Bulletin* (No 173)
- [121] Thomann RV, Mueller JA (1987) Principles of surface water quality modeling and control. Harper & Row, Publishers
- [122] Valdés Prada FJ (2014) Breviario sobre modelado matemático.(1ª edición) ed
- [123] Von Sperling M, de Lemos Chernicharo CA (2017) Biological wastewater treatment in warm climate regions. IWA publishing

-
- [124] Warn A (1987) Simcat—a catchment simulation model for planning investment for river quality. *Systems Analysis in Water Quality Management* Pergamon Press New York 1987 p 211-218, 10
- [125] Whitehead P, Beck B, O’Connell E (1981) A systems model of streamflow and water quality in the bedford ouse river system—ii. water quality modelling. *Water Research* 15(10):1157–1171
- [126] Whitehead P, Caddy D, Templeman R (1984) An on-line monitoring, data management and forecasting system for the bedford ouse river basin. *Water Science and Technology* 16(5-7):295–314
- [127] Whitehead P, Williams R, Lewis D (1997) Quality simulation along river systems (quasar): model theory and development. *Science of the Total Environment* 194:447–456
- [128] Wool TA, Ambrose R, Martin J, Comer E (2001) *Water quality analysis simulation program (WASP) version 6 user’s manual*. US Environmental Protection Agency, Atlanta, GA
- [129] Wool TA, Ambrose RB, Martin JL, Comer EA, Tech T (2006) *Water quality analysis simulation program (WASP). User’s Manual, Version 6*
- [130] Yao H, Qian X, Yin H, Gao H, Wang Y (2015) Regional risk assessment for point source pollution based on a water quality model of the Taipu River, China. *Risk Analysis* 35(2):265–277
- [131] Zou J, Holloway G (1995) Improving steady-state fit of dynamics to data using adjoint equation for gradient preconditioning. *Monthly Weather Review* 123(1):199–211