



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE INGENIERIA

9
Laj

“ESTIMACION DE PARAMETROS CON METODOS
INVERSOS”



T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO CIVIL
P R E S E N T A

PABLO ANDRES ALARCON MONTERO

DIRECTOR: M. I. MOISES BEREZOWSKY VERDUZCO

MEXICO, D. F.

1997

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

Señor
PABLO ANDRES ALARCON MONTERO
Presente.

FACULTAD DE INGENIERIA
DIRECCION
60-1-100/96

En atención a su solicitud me es grato hacer de su conocimiento el tema que propuso el profesor M. I. MOISES BEREZOWSKY VERDUZCO, que aprobó esta Dirección, para que lo desarrolle usted como tesis de su examen profesional de INGENIERO CIVIL.

"ESTIMACION DE PARAMETROS CON METODOS INVERSOS"

- I. INTRODUCCION
PROBLEMAS DIRECTOS Y PROBLEMAS INVERSOS EN LA INGENIERIA CIVIL
- II. BASES TEORICAS DEL METODO INVERSO
- III. APLICACION EN INGENIERIA SANITARIA. OBTENCION DEL COEFICIENTE DE DISPERSION LONGITUDINAL DE CONTAMINANTES
- IV. CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFIA

Ruego a usted cumplir con la disposición de la Dirección General de la Administración Escolar en el sentido de que se imprima en lugar visible de cada ejemplar de la tesis el título de ésta.

Asimismo le recuerdo que la Ley de Profesiones estipula que deberá prestar servicio social durante un tiempo mínimo de seis meses como requisito para sustentar Examen Profesional.

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
Cd. Universitaria a 22 de octubre de 1996.
EL DIRECTOR.

ING. JOSÉ MANUEL COVARRUBIAS SOLÍS

UMCS/GMP*lmf

DEDICATORIA

Este trabajo está dedicado a todas las personas que, de distintas maneras, han contribuido en mi formación como ser humano. En primera instancia a mis padres Luisa y Alejandro, por su gran espíritu de lucha para vencer a las vicisitudes que la vida les ha impuesto, y por el amor que me han entregado a lo largo de los años, sin los cuales, no habrían sido posibles muchos de mis logros; a Rodrigo, por su comprensión y compañía durante esta etapa de nuestras vidas, pero sobre todo por ser simultáneamente hermano y amigo; a mi abuela Adriana, por su enorme calidad humana y visión del mundo, guía de mis pasos presentes y futuros; a mi tío Eugenio por el cariño, alegría y confianza que siempre ha depositado en mí, así como por su influencia para estudiar esta carrera; a mi compañera; a los hermanos y hermanas que la vida me ha dado: Adolfo, Alberto, Emiliano, el grupo de los quince, y a cada uno de aquellos que por diversas razones nos ha separado la distancia y/o el paso del tiempo, pero que de algún modo son parte del Pablo de hoy en mis gestos, esperanzas, pensamientos, recuerdos, gustos e ideales. Por último, un agradecimiento especial al M.I. Moisés Berezowsky por el apoyo y confianza brindados durante el desarrollo de esta tesis, así como por compartirme, además de la ingeniería, una filosofía de vida.

México, D.F., a 23 de marzo de 1997.

INDICE

INTRODUCCION.	1
1. PROBLEMAS DIRECTOS Y PROBLEMAS INVERSOS EN LA INGENIERIA CIVIL.	3
1.1. Definiciones y formas de solución.	3
1.1.1. Solución de un problema inverso.	4
1.2. Problemas directos y problemas inversos en la Ingeniería Civil.	7
2. BASES TEORICAS DEL METODO INVERSO.	11
2.1. Método variacional adjunto.	11
2.1.1. Introducción.	11
2.1.2. Descripción del método	12
2.1.3. La función de costo J.	14
2.2. Optimización clásica.	15
2.2.1. Condiciones para valores óptimos.	16
2.2.2. Procedimientos de optimización.	18
2.3. Técnicas de optimización utilizadas en esta tesis.	21
2.3.1. Multiplicadores de Lagrange.	21
2.3.2. Búsqueda de la sección de oro.	23
2.3.3. Método de paso descendente.	25
2.3.4. Método de gradiente conjugado.	26
3. APLICACIÓN EN INGENIERIA SANITARIA. OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE DE DISPERSION LONGITUDINAL DE CONTAMINANTES.	30
3.1. Descripción del fenómeno físico.	30
3.1.1. Introducción.	30
3.1.2. Difusión molecular.	33
3.1.3. Transporte advectivo	33
3.1.4. Difusión turbulenta.	34
3.1.5. Dispersión longitudinal	37
3.2. Aplicación del método variacional adjunto para la obtención del coeficiente de dispersión de contaminantes.	43
3.3. Procedimiento iterativo de solución.	48
3.4. Implementación del método inverso : casos estudiados, resultados y análisis.	50
4. CONCLUSIONES.	80
BIBLIOGRAFIA.	83

INTRODUCCIÓN

El hombre, en su búsqueda por la comprensión y predicción de los fenómenos físicos, ha creado modelos matemáticos para poder representarlos. Dichos modelos tratan de caracterizar el fenómeno al definir los distintos factores que intervienen en el mismo. A estos factores se les denomina parámetros, y es partir de sus valores, que se logra predecir de alguna manera el fenómeno físico. El procedimiento anteriormente descrito se denomina una metodología directa de modelación. Si consideramos una modelación directa ideal (sin errores), la única condición necesaria para lograr una predicción adecuada de la realidad sería la de utilizar los valores correctos de los parámetros, por lo cual no es recomendable suponerlos arbitrariamente. Cuando por algún motivo estos valores no son conocidos, o no es posible medirlos directamente, una de las formas para establecerlos es el inferirlos a partir de las manifestaciones que pretenden predecir. Lo anterior se conoce como una metodología inversa de modelación. Debe tomarse en cuenta que estas metodologías no siempre son exactas, ya que su aplicación se enfrenta a las limitaciones impuestas por los errores en las teorías utilizadas para la predicción y los errores en las mediciones a partir de las cuales se infiere.

Por otra parte, desde mi punto de vista se puede considerar que la Ingeniería, al dar solución a problemas prácticos mediante la aplicación de teorías que pretenden predecir determinados fenómenos físicos, es el agente que logra integrar a la realidad y a los modelos matemáticos que intentan representarla. En el caso de la Ingeniería Civil, dichos modelos se utilizan en la realización de obras de infraestructura, las cuales son fundamentales para el bienestar humano. Por lo tanto, uno de los aspectos básicos para el desarrollo de la infraestructura de cualquier país, será que dichas obras sean diseñadas de forma apropiada para poder cumplir con el propósito por el cual fueron concebidas. En consecuencia, se comprenderá la necesidad de una adecuada aplicación de los modelos, y por ende, el uso de los valores correctos de los parámetros

involucrados en los mismos.

Debido a la importancia de lo expuesto en el párrafo precedente, el objetivo de esta tesis será discutir la aplicación de la metodología inversa en la estimación de parámetros utilizados para la solución de problemas de Ingeniería Civil, y analizar un caso como ejemplo.

El esquema de este trabajo es el siguiente. En el primer capítulo se hace una introducción a los conceptos fundamentales y formas de solución de la metodología inversa; así mismo, se discute su aplicación en los distintos ámbitos de la Ingeniería Civil. En el capítulo 2 se presentan las bases teóricas del procedimiento inverso que aquí se aplica, denominado "método variacional adjunto" y cuya implementación requiere de procedimientos de optimización clásica. En el último capítulo se aplica el esquema variacional para obtener el coeficiente de dispersión de contaminantes en pruebas realizadas sobre un canal de laboratorio. Finalmente, se presentan las conclusiones del trabajo.

1. PROBLEMAS DIRECTOS Y PROBLEMAS INVERSOS EN LA INGENIERIA CIVIL.

1.1. Definiciones y formas de solución

La problemática involucrada en el desarrollo de un modelo matemático que represente a un sistema físico tiene como punto de partida el definir dicho sistema a través de los distintos elementos que logran describirlo completamente. Estos elementos se denominan parámetros del modelo y, en casi todos los casos, pueden ser obtenidos de forma directa. Una vez que se ha caracterizado el sistema, es posible establecer ciertos parámetros "de interés", cuyo valor sea necesario predecir para distintas condiciones del medio. Estos parámetros de "interés" se definen de tal forma que dependan de los del modelo, y en general pueden ser medidos por lo que se les llama parámetros observables.

Los conceptos clásicos de problema directo y problema inverso se originan a partir de la forma en que se utilicen los dos tipos de parámetros anteriormente definidos para lograr modelar un aspecto del fenómeno físico que se esté analizando. De esta forma, resolver el problema directo consiste en predecir los valores de los parámetros observables dando valores arbitrarios a los parámetros de modelo, utilizando para ello ciertas leyes físicas que los relacionen. Por el contrario, resolver el problema inverso consiste en inferir (mediante ciertas técnicas), los valores de los parámetros del modelo a partir de valores medidos de los parámetros observables.

En otras palabras, se puede establecer que el procedimiento utilizado para el análisis de un sistema físico puede ser dividido en tres aspectos:

- **Parametrización del sistema:** consiste en el descubrimiento de un grupo particular de parámetros del modelo cuyos valores caractericen al sistema desde un punto de vista dado.

- **Modelación directa:** es el descubrimiento de las leyes físicas que permiten, dados los valores de los parámetros del modelo, hacer predicciones de los parámetros observables, ya sea que existan o no las condiciones para medir estos últimos y poder comparar lo calculado con lo medido.
- **Modelación inversa:** consiste en utilizar los resultados de algunas mediciones de parámetros observables para inferir los valores de los parámetros del modelo. De esta forma, se podrá deducir el valor correcto de los parámetros de modelo a partir de lo medido.

Se hace notar que las dos primeras etapas son de carácter inductivo (van de lo particular a lo general), mientras que la tercera es netamente deductiva (va de lo general a lo particular)

Por último, es necesario mencionar que el principal problema al que se enfrentan ambos tipos de modelación consiste en la posible sobredeterminación o indeterminación de los parámetros que se pretenden predecir o inferir. En el caso de la indeterminación, ésta es debida a dos factores: la falta de datos suficientes y las incertidumbres experimentales. En el primer caso se tiene un número indefinido de soluciones y se requiere de información adicional para hacer el problema más específico. El segundo factor está relacionado con la incertidumbre en el conocimiento. Los valores observables o datos siempre tienen incertidumbres experimentales y las teorías físicas que permiten la solución del problema directo son aproximaciones de una realidad más compleja

1.1.1. Solución de un problema inverso

La solución de todo problema inverso tiene como objetivo básico el transferir información desde los datos a los parámetros del modelo. Las metodologías inversas logran dicha transferencia utilizando los tres aspectos siguientes:

- Información experimental, relacionada con los valores reales de los parámetros observables, y obtenida a partir de mediciones experimentales o en campo.
- Información anterior, obtenida de forma independiente a las mediciones y que corresponde a los parámetros del modelo. Por ejemplo, en el caso de un proceso iterativo, la información de los parámetros del modelo generada en la iteración previa a la que se está analizando es la información anterior que se dispone de los mismos.
- Aspecto teórico, el cual implica establecer las leyes físicas que relacionan los parámetros del modelo con los parámetros observables o datos.

Estos tres factores son los elementos básicos de toda modelación, y la forma en que se emplean es lo que diferencia a los distintos procedimientos con los que se aplica la metodología inversa para la solución de problemas.

Antes de pasar a la descripción de dichos métodos es importante tomar en cuenta los siguientes conceptos para el análisis de solución de toda técnica inversa (la justificación teórica de estos conceptos se puede encontrar en Tarantola (1987)):

- Estabilidad: es la propiedad de un procedimiento de ser insensible a pequeños errores aleatorios en los valores de los datos. Si la información anterior en el espacio del modelo se utiliza de manera apropiada, se garantiza la estabilidad.
- Robustez: es la propiedad de una metodología según la cual, esta es insensible a un número pequeño de grandes errores en el grupo de datos.

A continuación se presentan algunas de las técnicas que pueden ser utilizadas para resolver un problema inverso

I. Soluciones analíticas

Se desarrollan en los casos donde es posible obtener una expresión analítica que relacione los tres factores fundamentales de toda solución inversa mencionados previamente (experimental, anterior y teórico).

II. Exploración sistemática del espacio del modelo

Si el número de parámetros del modelo es pequeño (≤ 4) y predecir por medio de correlaciones físicas el valor numérico de los parámetros observables no resulta muy complejo, se puede definir una malla sobre el espacio del modelo y predecir los parámetros en todos los nodos de la malla, luego, utilizar estos resultados de forma directa para discutir la información obtenida sobre los parámetros del modelo

III. Método de prueba y error

Si m representa un valor arbitrario de un parámetro del modelo, d_{obs} los valores observados de los datos y $d_{cal} = f(m)$ los valores predichos a partir de m . Entonces, el método de prueba y error se inicia desde algún valor m_0 , se calcula $d_{cal} = f(m_0)$, se compara d_{cal} con d_{obs} , se apela a la intuición física para escoger un nuevo valor m_1 para el cual $f(m_1)$ ajuste el dato observado mejor que $f(m_0)$. Se itera hasta que sucesivas modificaciones en el valor del parámetro del modelo no mejoren significativamente el ajuste entre los datos observados y los computados.

IV. Métodos Monte Carlo

Si el número de parámetros es grande y el predecir por medio de correlaciones físicas el valor numérico de los parámetros observables no es complejo, la exploración del espacio del modelo puede ser remplazada ventajosamente por una exploración aleatoria (o Monte Carlo).

V. Cómputo del punto de máximo valor esperado

Generalmente no se tiene un número pequeño de parámetros y el cálculo de los parámetros observables para cada parámetro del modelo es complejo. La única aproximación práctica en este caso es tratar de definir una estrategia que, sin grandes dificultades, alcance como resultado el punto que maximice la función que los relaciona. Si esta función es diferenciable para todo parámetro del modelo, el punto máximo puede ser obtenido usando métodos de gradiente, donde el gradiente de la función tiene componentes $\partial f/\partial m$.

VI. Criterio de mínimos cuadrados

Teoría

Los mínimos cuadrados son muy utilizados debido a que se pueden calcular fácilmente. Su único inconveniente es la falta de robustez, es decir que son muy sensibles a un número pequeño de grandes errores en los datos. El problema central en el criterio de mínimos cuadrados consiste en la minimización de una función de ajuste que mide cuán cercanamente el modelo concuerda con los datos observados. El criterio utilizado para el ajuste es la suma de los cuadrados de los errores:

$$S = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2$$

donde ϵ es el error o residuo, es decir, la diferencia entre los parámetros observados y los predichos. A valores más pequeños de S se tendrá un mejor ajuste. En realidad, lo que se logra al minimizar la función de desajuste es maximizar la función que relaciona ambos tipos de parámetros.

Métodos de solución

A continuación se presentan los métodos más simples (no necesariamente los más eficientes) para la solución del problema de minimización que involucran los mínimos cuadrados:

- *Exploración sistemática del espacio del modelo.*
- *Prueba y error.*

- *Métodos Monte Carlo.*

Estos tres métodos fueron ya descritos, sin embargo a diferencia de lo discutido anteriormente, en este caso utilizan la evaluación de la función S como criterio para encontrar la solución del problema inverso

- *Métodos de optimización clásica.*

Esta clase de métodos emplean técnicas de optimización clásica para minimizar la función de desajuste S. Debido a que el procedimiento que se utilizará en el presente trabajo para aplicar la metodología inversa a un caso específico de la Ingeniería Civil pertenece a esta categoría, se expondrán sus fundamentos teóricos en el capítulo segundo

1.2. Problemas directos y problemas inversos en la Ingeniería Civil

La discusión expuesta por este subcapítulo se desarrolló tras analizar la aplicabilidad de las metodologías directa e inversa en las distintas áreas que componen las Ciencias de la Ingeniería y la Ingeniería Aplicada. A partir de esta revisión fue posible llegar a la siguiente conclusión :

"muchos problemas de Ingeniería Civil cuya modelación involucre parámetros pueden ser resueltos tanto por metodologías inversas como directas"

A continuación se presentan una serie de casos donde la conclusión anterior es aplicable :

CAMPO	MODELACION	METODOLOGIA DIRECTA	METODOLOGIA INVERSA
Estructuras. Flexión.	$\frac{d^2y}{dx^2} = -\frac{M}{EI}$	<ul style="list-style-type: none"> • Obtener la flecha a partir de E, I y M. 	<ul style="list-style-type: none"> • Inferir el momento flexionante a partir de la flecha, I y E. • Inferir el módulo de elasticidad a partir de la flecha, I y M.
Sanitaria. Reactor Batch.	$X = X_0 e^{-Kt}$	<ul style="list-style-type: none"> • Obtener la concentración a partir de t y K. 	<ul style="list-style-type: none"> • Inferir la constante de velocidad de reacción a partir de X y t.

CAMPO	MODELACION	METODOLOGIA DIRECTA	METODOLOGIA INVERSA
Geotecnia. Consolidación unidimensional (Terzaghi)	$\Delta H = m_v \Delta \sigma'_v / H$	<ul style="list-style-type: none"> Determinar asentamientos a partir de m_v, $\Delta \sigma'_v$, y H 	<ul style="list-style-type: none"> Inferir el coeficiente de variación volumétrica a partir de ΔH, $\Delta \sigma'_v$, y H
Sanitaria. Transporte de masa.	$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	<ul style="list-style-type: none"> Obtener la concentración a partir de u y E. 	<ul style="list-style-type: none"> Inferir el coeficiente de dispersión a partir de u y C.
Hidráulica de Canales. Régimen uniforme.	$Q = \frac{A}{n} R^{2/3} S^{1/2}$	<ul style="list-style-type: none"> Obtener el gasto en el canal a partir del tirante, la geometría, n y S_0. 	<ul style="list-style-type: none"> Inferir la n de Manning a partir de Q, S_0, el tirante y la geometría del canal. Inferir la geometría del canal a partir de Q, S_0, n y el tirante.

La dificultad para aplicar la metodología directa varía en función de la facilidad con que se puedan determinar los parámetros del modelo. El caso crítico se presenta cuando no se tiene manera de obtenerlos directamente, y en primera instancia la única solución posible sería suponerlos de manera arbitraria.

Es ante esta problemática que puede ser aplicado el método inverso, pues permite inferir los parámetros del modelo a partir de mediciones sobre parámetros observables.

La metodología de solución para un problema planteado en forma inversa puede ser tan sencilla como despejar el parámetro que se desea obtener del modelo directo, y calcularlo mediante los valores de las observaciones. Sin embargo, no siempre el procedimiento es tan simple, por lo que en muchos problemas de Ingeniería Civil generalmente se recurre a la técnica de prueba y error.

En Ingeniería Civil, generalmente se presenta el caso crítico ya mencionado, cuando las características del medio físico involucradas en el problema por analizar no permiten la obtención de los parámetros del modelo necesarios para la aplicación de la metodología directa.

Específicamente, la Hidráulica y la Geotecnia son los campos que enfrentan estas vicisitudes. Debido a lo anterior, es que estas áreas han establecido soluciones analíticas al tener que resolver un gran número de problemas mediante metodologías inversas

A continuación se presentan algunos casos como ejemplo:

CAMPO	MODELACION	METODOLOGIA INVERSA
Hidráulica Flujo de agua soterránea Thiem	$P = \frac{527.7 Q \log_{10}(r_2 / r_1)}{b(h_1 - h_2)}$	<ul style="list-style-type: none"> Inferir la permeabilidad sobre el terreno al observar los descensos del cono de abatimiento de un pozo mediante sondeos
Geotecnia Empuje sobre elementos de retención. Rankine.	$E = \frac{1}{2} K \gamma_w H^2$	<ul style="list-style-type: none"> Inferir la K pasiva o activa a partir de mediciones del ángulo de fricción interna para el material

La aplicación anteriormente discutida del procedimiento inverso, se puede considerar como la forma clásica de la teoría de problemas inversos para la solución de problemas

Sin embargo, otro de los casos donde puede ser utilizado este procedimiento es para comprobar que los valores de los parámetros usados en la metodología directa son los que realmente se están presentando. De esta forma, los parámetros verdaderos pueden ser inferidos desde los datos para compararlos con los empleados originalmente. Esto puede, por ejemplo, ser aplicado en la etapa de operación y mantenimiento de una obra

Por último se puede señalar que muchos problemas de diseño en los cuales es necesario calcular un factor de seguridad podrían ser enfrentados desde el punto de vista inverso. Dicho factor, se obtiene generalmente dividiendo lo calculado con la metodología directa y lo medido en

laboratorio o en campo. De esta forma, a partir de las condiciones medidas y los factores de seguridad requeridos sería posible obtener los parámetros de diseño óptimos para cada caso. Llevar a cabo lo anterior dependerá de la complejidad del problema analizado, pero en caso de ser factible, se impediría un derroche innecesario de recursos económicos ya que la obra no estaría sobrediseñada; y en cierto modo se optimizaría el proceso de diseño al reducir el número de opciones que se deben probar mediante tanteos hasta obtener aquella que cumple con las condiciones de seguridad solicitadas.

2. BASES TEORICAS DEL METODO INVERSO

2.1. Método variacional adjunto

Para la solución de un caso específico de la Ingeniería Civil, se aplicará una técnica de modelación inversa denominada "método variacional adjunto" y cuyo empleo requiere de un procedimiento de optimización. A continuación se presentan sus orígenes y fundamentos.

2.1.1. Introducción

De acuerdo con Smedstad y O'Brien (1991), el método variacional adjunto es resultado de los análisis numéricos y de datos desarrollados principalmente para estudios oceanográficos y meteorológicos en los últimos treinta años. A partir de estas experiencias se establecieron básicamente tres clases de algoritmos:

- Métodos de interpolación polinomial local:

En estas técnicas, se ajustan funciones polinomiales a los datos observados en la vecindad de cada punto de una malla. Tienen la ventaja de ser simples y eficientes.

- Métodos de interpolación estadística:

En ellos se asignan pesos a una combinación lineal de desviaciones observadas en un intento de minimizar el error cuadrático medio. Se requiere como información estadística los primeros y segundos momentos de las variables observadas y desconocidas. Una de sus ventajas es el producir una aproximación práctica y consistente al tratar grandes grupos de observaciones heterogéneas. Su principal defecto consiste en suavizar excesivamente los aspectos analizados, eliminando factores que no son de gran importancia desde el punto de vista estadístico, pero que son necesarios para la correcta interpretación del fenómeno físico. Por último, cabe mencionar que estas técnicas son computacionalmente complejas, ya que

tienen que ser resueltos grandes sistemas de ecuaciones lineales para encontrar los pesos de interpolación.

- **Métodos de análisis numérico variacional**

En estos métodos, se minimiza un funcional o función de costo que representa el desajuste entre los datos observados y los resultados de la modelación. La minimización se lleva a cabo bajo la restricción de que deben satisfacerse las ecuaciones de modelo. La solución del problema de minimización restringida involucra multiplicadores de Lagrange y lleva a ecuaciones adicionales o adjuntas, desde las cuales se determinan dichos multiplicadores. Las variables del modelo y los multiplicadores de Lagrange permiten entonces el cálculo del gradiente del funcional original, el cual se utiliza para minimizar dicho funcional mediante métodos de optimización clásica. Entre las desventajas de los métodos variacionales está la utilización de una técnica matemática compleja y un costo computacional alto.

2.1.2. Descripción del método

En el método variacional se minimiza una función de costo que mide el desajuste entre lo modelado y las observaciones, las ecuaciones de modelo sirven como restricciones. El primer campo de interés para este procedimiento son los modelos dependientes del tiempo. Un modelo matemático con estas características puede ser escrito como

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{x}; \mathbf{c}) \quad (2.1)$$

donde los componentes del vector \mathbf{x} son las variables dependientes, t es el tiempo y el vector \mathbf{c} contiene a los parámetros de modelo. Los componentes de \mathbf{x} denotan los distintos aspectos bajo consideración. \mathbf{F} puede ser un operador lineal o no lineal. Según Smedstad y O'Brien (1991), se supone que el sistema (2.1) no es cerrado, por lo cual debe ser proporcionada información adicional en orden de obtener una solución única para (2.1). La información adicional será una variable de control \mathbf{y} . La variable \mathbf{y} , puede consistir por ejemplo en las condiciones iniciales, condiciones de frontera, alguno de los parámetros del problema, o una combinación de estos. Una vez que se ha definido \mathbf{y} , es posible encontrar una solución única $\mathbf{x}(\mathbf{y})$ de (2.1). Es importante comprender que la variable de control, \mathbf{y} , debe pertenecer a un grupo de controles admisibles \mathbf{y}_{ad} . Lo anterior quiere decir que \mathbf{y} debe ser físicamente posible para el caso que se este analizando, de tal manera que pueda obtenerse una solución congruente. Para determinar \mathbf{y}_{ad} se puede utilizar

información física sobre las condiciones iniciales o los parámetros utilizados como una variable de control.

El interés principal es obtener una solución de (2.1) lo más cercana posible a las observaciones, \mathbf{x}^* . La cercanía puede ser definida en diferentes formas, y es usual emplear una función de costo J , la cual mide la distancia entre la solución de (2.1) y las mediciones. El problema variacional puede establecerse entonces de la manera siguiente:

Encontrar \mathbf{y}^* la cual pertenece a \mathcal{Y}_{ad} y minimiza la función de costo J , donde \mathbf{y}^* representa el \mathbf{y} óptimo.

El problema planteado es un problema de minimización restringida, en el que la ecuación de modelo (2.1) representa la restricción. El problema se resuelve redefiniéndolo de tal forma que llegue a ser un problema de minimización sin restricciones.

Sasaki (1970) introdujo dos diferentes métodos en el análisis variacional: el método de restricción débil (relacionado con el procedimiento de penalización) y el método de restricción fuerte.

La aproximación aplicada aquí es el esquema de restricción fuerte y está basada en la técnica de los multiplicadores de Lagrange. En dicha técnica, se construye un Lagrangiano $\mathbf{L}(\mathbf{x}, \lambda, \mathbf{y})$ como

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}, \lambda, \mathbf{y}) = J(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \langle \lambda, \mathbf{G}(\mathbf{x}; \mathbf{c}) \rangle \quad (2.2)$$

donde los componentes del vector λ son los multiplicadores de Lagrange. El problema de minimización restringido se reemplaza por un problema sin restricciones con respecto a las variables \mathbf{x} , λ y \mathbf{y} . Usando este formalismo se asegura que las observaciones satisfarán exactamente a las restricciones. De acuerdo con Smedstad y O'Brien (1991), puede demostrarse que el problema de determinar los puntos estacionarios del funcional $J(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ bajo la restricción $\mathbf{G}(\mathbf{x}; \mathbf{c}) = 0$ es equivalente al problema de determinar los puntos estacionarios de (2.2) con respecto a las variables \mathbf{x} , \mathbf{y} y λ . Las ecuaciones que hacen estacionario al Lagrangiano, son llamadas las ecuaciones de Euler-Lagrange del problema de minimización restringida. La condición óptima de Euler-Lagrange está dada por

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \lambda}(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mathbf{y}^*) = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mathbf{y}^*) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y}(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \mathbf{y}^*) = \mathbf{0} \quad (2.5)$$

de donde se determinan \mathbf{x}^* , λ^* y \mathbf{y}^* . La ecuación (2.3) lleva al modelo original nuevamente. El operador en (2.4) es el adjunto del operador en (2.3). Es por lo tanto común llamar a la ecuación (2.4) la ecuación adjunta de (2.3). La ecuación de modelo propaga información hacia adelante en el tiempo, mientras que la ecuación adjunta la propaga hacia atrás. Esta última característica es necesaria para asegurar la estabilidad del problema (ver Smedstad y O'Brien (1991)). Las dos formas de propagar información en el tiempo se discuten más ampliamente en el último capítulo de esta tesis, al ser aplicada la técnica variacional a un problema específico de Ingeniería Civil. La ecuación (2.5) da lugar al gradiente de L con respecto a la variable de control. El gradiente juega un papel importante para la determinación del mejor ajuste en la solución, ya que es uno de los factores principales de los algoritmos de descenso utilizados para encontrar el mínimo de la función de costo.

Como puede observarse en las ecuaciones anteriores, el análisis variacional depende de la elección del funcional J y de la restricción G . El método de solución es también una parte importante del análisis. En general tiene que ser utilizado un método iterativo para las elecciones de J y G . El objetivo será realizar un número de iteraciones lo más pequeño posible.

2.1.3. La función de costo J

El objetivo del método variacional es encontrar una solución cercana a las observaciones. Como ya se mencionó, la función de costo J tiene que ser estructurada de tal manera que mida la distancia (desajuste) entre el modelo y las observaciones, por lo tanto debe tener la propiedad de una norma (desde el punto de vista matemático). Hay muchas formas del funcional J que pueden ser consideradas, y cada una de ellas dará distintos resultados en el ajuste de la solución del modelo. El método variacional hace uso de las derivadas de J y por lo tanto, la función de costo debe ser diferenciable. Es común escoger J basado en la norma del error cuadrático medio, es decir

$$J(\mathbf{x}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T \mathbf{K}_x (\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{2}(\mathbf{c} - \mathbf{c}')^T \mathbf{K}_c (\mathbf{c} - \mathbf{c}') \quad (2.6)$$

donde \mathbf{x}' y \mathbf{c}' representan variables observadas o estimadas, las \mathbf{x} las \mathbf{c} son variables calculadas y las \mathbf{K} son matrices de validación especificadas. Estas dependen de la varianza del error en cada

punto de observación, y de alguna manera entregan información sobre la calidad de los datos. Si los errores en las observaciones no están correlacionados, las matrices de validación son diagonales; siempre son matrices simétricas y definidas positivas. Las observaciones pueden no estar disponibles en todas partes, por lo que, en aquellos puntos donde no hay observaciones, las matrices de validación son iguales a cero (para mayor información sobre las matrices de validación véase Tarantola (1987)).

El primer término en la ecuación (2.6) es llamado el desajuste de los datos, y es el factor de control de las ecuaciones adjuntas. Es a partir de estas ecuaciones que los multiplicadores de Lagrange propagan información de dicho desajuste hacia el tiempo inicial del periodo de asimilación de los datos, influyendo de este modo en la reconstrucción del estado del modelo. El último término se agrega a la función de costo para asegurar que las nuevas estimaciones de los parámetros en el modelo no estén tan alejadas de la suposición inicial, es decir, el término representa información anterior acerca de los parámetros (véase Tarantola (1987)). De esta forma, según Yu y O'Brien (1991), las nuevas estimaciones de los parámetros no se alejan demasiado de los valores tomados por los parámetros en la iteración anterior; por ello, es primordial que las suposiciones iniciales de los parámetros sean lo más razonables posible con objeto de que el proceso de optimización pueda desarrollarse eficientemente. Sintetizando la discusión anterior, se puede afirmar que minimizar la función de costo conduce a una solución cercana a las observaciones, y a nuevos valores de los parámetros cercanos a los estimados.

2.2. Optimización clásica

El problema fundamental de la optimización es alcanzar la mejor decisión posible en cualquier grupo de circunstancia dadas. En el caso de un problema de optimización matemático, el primer paso para enfrentar esta situación consiste en desarrollar una modelación que represente el caso por analizar. En general dicho modelo será una función de múltiples parámetros, para ser minimizada o maximizada, sujetándola o no a restricciones. El siguiente paso consiste en escoger un método matemático para resolver el problema; tales métodos son denominados técnicas de optimización o algoritmos.

Expresando lo anterior de manera más específica, la problemática de encontrar el valor óptimo de una función $f(x_1, \dots, x_n)$, llamada función objetivo o de costo, de n parámetros x_1, \dots, x_n (restringidos o no), se resuelve mediante técnicas de optimización que permiten encontrar los

valores de los parámetros que maximizan o minimizan dicha función

Antes de continuar con esta discusión debe hacerse notar que los valores x_i que maximizan $f(x)$ también minimizan $-f(x)$, por lo que todo problema de maximización puede ser formulado como un problema de minimización y viceversa

Por último, cabe mencionar que no existe un método general de cálculo para manejar la búsqueda de un valor óptimo. Esto se debe al hecho de que muchos de ellos han sido desarrollados únicamente para la solución de un tipo de problema específico. Por tanto, no solo se debe modelar correctamente al problema, sino también investigar de que tipo se trata, para determinar de esta forma las clases de técnicas de optimización disponibles o la clase más eficiente

2.2.1. Condiciones para valores óptimos

Las condiciones óptimas pueden ser encontradas solo en puntos particulares de una región de exploración. Por ello, es importante examinar toda posible localización de un óptimo, y en el análisis final comparar entre sí los valores de la función objetivo en cada punto factible. A continuación se presentan estas condiciones para diferentes clases de funciones y las metodologías usadas en la determinación de la posición del óptimo:

a) Funciones continuas.

Si una función es continua, la existencia de un máximo o un mínimo esta justificada por el teorema de Weierstrass, el cual indica que toda función continua en un dominio determinado posee un valor mayor o menor, ya sea en el interior o en el límite de dicho dominio. La localización del óptimo en el interior de la región puede ser determinada mediante el siguiente teorema (ver Beveridge y Schechter (1970)):

Una función continua $f(x)$ de n variables independientes x_1, x_2, \dots, x_n , tendrá un máximo o un mínimo en el interior de una región solo si para los valores de los parámetros x_i , se anulan simultáneamente las n derivadas parciales f_{x_i} (denominándose punto estacionario), o cuando una o más de esas derivadas dejan de existir en una discontinuidad

Por ello, un valor óptimo se puede encontrar en alguna de tres posibles condiciones:

- En el interior de una región
 - ⇒ En un punto estacionario, caracterizado por el hecho de que todas las primeras derivadas continuas son simultáneamente cero

⇒ En discontinuidades de una o más de las primeras derivadas.

- En el límite de la región.

La determinación de la posición del óptimo bajo cada una de las condiciones mencionadas se obtiene mediante los siguientes procedimientos :

- ◆ En un punto estacionario: si la función tiene derivadas continuas en el rango de interés pueden utilizarse métodos de búsqueda analíticos o numéricos.
- ◆ En discontinuidades interiores: en este caso se colocan límites artificiales en dichas discontinuidades, y el sistema se trata en partes
- ◆ En las fronteras: ante esta situación debe usarse un método de exploración, o bien replantearse el problema incorporando las restricciones de frontera en una función objetivo modificada.

b) Funciones discontinuas

Lo mejor es dividir la región de búsqueda agregando fronteras en las discontinuidades, y utilizar los métodos tradicionales para manejar las secciones continuas. De esta forma, los resultados de cada sección se comparan unos con otros, así como con los valores de la función en las fronteras impuestas.

c) Funciones discretas.

Se deben comparar los valores de la función discreta en cada punto para el cual la función existe.

En ciertos casos, pueden encontrarse más de un valor extremo, denominándoseles valores extremos locales. En general, estos extremos locales deben ser comparados entre sí para definir al resultado global. Como ya fue mencionado, la condición **necesaria** para la localización de un valor extremo en el interior de una región, consiste en hacer simultáneamente cero todas las derivadas continuas. De esta forma se tiene :

- Funciones unidimensionales

$$\frac{df}{dx} = 0 \quad (2.7)$$

- Funciones multidimensionales

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_2} = \dots = \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0 \quad (2.8)$$

Sin embargo, las soluciones de estas ecuaciones pueden representar mínimos, máximos o puntos de inflexión, por lo que, para poder determinar su naturaleza es necesario recurrir a un

análisis de la segunda derivada de las funciones evaluadas en los puntos estacionarios. Las siguientes condiciones son suficientes para la existencia del valor extremo de que se trate :

Funciones unidimensionales

$$\frac{d^2 f}{dx^2} > 0 \quad \text{se tiene un mínimo} \quad (2.9a)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = 0 \quad \text{se tiene un punto de inflexión} \quad (2.9b)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} < 0 \quad \text{se tiene un máximo} \quad (2.9c)$$

- Funciones multidimensionales

En este caso, la condición suficiente será que la matriz H, con elementos h_{ij} , dados por la expresión

$$h_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.10)$$

sea definida positiva para un mínimo, nula para un punto de inflexión o definida negativa para un máximo, al ser evaluada en el punto analizado. H se conoce como matriz Hessiana y es simétrica de orden $n \times n$.

2.2.2. Procedimientos de optimización

Puede pensarse que para determinar mediante optimización un máximo o un mínimo lo más sencillo es aplicar el cálculo diferencial elemental, encontrando el valor estacionario de la función al tomar en cuenta la variación de los parámetros independientes. Sin embargo, en problemas reales, la situación es más complicada debido a la forma de la región de búsqueda delimitada por el sistema de restricciones, la complejidad y el comportamiento de las funciones bajo estudio, y la posibilidad de que ciertas funciones sean discontinuas o no diferenciables en el rango de interés.

Como puede constatarse, el problema general de maximizar o minimizar una función de uno o más parámetros, lineal o no lineal, discreta o continua, restringida o no, es difícil y aún se continúan desarrollando formas para solucionarlo. En la actualidad existen dos tipos de procedimientos para enfrentar esta problemática: las técnicas analíticas y las numéricas.

Los métodos analíticos son utilizados cuando se debe examinar una función para cada

valor estacionario con el objeto de determinar si es un extremo. Estas técnicas determinan los puntos estacionarios mediante la solución simultánea de n ecuaciones obtenidas al hacer iguales a cero las n derivadas parciales correspondientes. La problemática de las funciones multidimensionales es la más compleja, ya que, a pesar de que muchos casos pueden ser reducidos a problemas unidimensionales mediante sustituciones directas, en otros dicha forma de eliminación es imposible o demasiado complicada. La situación anterior, sumada a la inclusión de restricciones surgidas de consideraciones físicas, llevó al desarrollo de métodos que logran satisfacer dichas restricciones sin eliminar variables. En el caso particular de las restricciones en forma de igualdades, los multiplicadores de Lagrange y los términos de penalización son los procedimientos más utilizados.

Si los métodos analíticos no son adecuados, debido a que la complejidad de las expresiones impide un análisis matemático adecuado, se utilizan entonces las técnicas numéricas de búsqueda. En ellas se requiere la determinación, en localizaciones sucesivas, del valor de la función objetivo, y a veces de su gradiente. Una de sus características es la necesidad de suponer la unimodalidad de la función analizada de modo de asegurar que solo exista un óptimo en cada región de búsqueda. Si no se tiene la certeza de que la función cumpla la propiedad mencionada, se debe iniciar la búsqueda desde distintos puntos separados ampliamente, de tal forma que si se llega al mismo valor se pueda afirmar que se ha determinado el óptimo global. Si se encuentran varios óptimos locales, se debe seleccionar el mejor de ellos.

Las técnicas numéricas de búsqueda unidimensionales y multidimensionales son iterativas y proceden mediante la generación de una secuencia de soluciones, cada una de las cuales representa una mejor aproximación a los valores de los parámetros en el mínimo o el máximo de f , según sea el caso. El procedimiento es llevado a cabo de manera tal que

para una minimización

$$f(\mathbf{x}_{i+1}) \leq f(\mathbf{x}_i) \quad (2.11a)$$

para una maximización

$$f(\mathbf{x}_{i+1}) \geq f(\mathbf{x}_i) \quad (2.11b)$$

donde \mathbf{x}_{i+1} y \mathbf{x}_i son vectores que contienen los valores de los n parámetros de las iteraciones $i+1$ e i .

Estas metodologías requieren un grupo inicial de valores de los parámetros desde el cual se van determinando nuevos grupos de parámetros por medio de una ecuación con la forma

siguiente:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{d}_i \quad (2.12)$$

En esta expresión, \mathbf{d}_i es un vector n -dimensional y α_i es un escalar. El vector \mathbf{d}_i especifica la dirección que debe ser tomada en el movimiento de \mathbf{x}_i a \mathbf{x}_{i+1} , y α_i establece la distancia que debe ser recorrida a lo largo de la dirección previamente mencionada; dicha distancia es conocida como longitud de paso. La magnitud de esta longitud puede ser establecida con un valor fijo, o ser encontrada mediante la búsqueda de su valor óptimo en la dirección establecida, utilizando para ello una sencilla técnica unidimensional.

Las evaluaciones de la función pueden llevarse a cabo siguiendo dos criterios:

- **Búsqueda preplanada:** las evaluaciones de la función se programan de forma adelantada, y los resultados no influyen en el curso de las mismas. Es una aproximación ineficiente en términos del número de experimentos requeridos para alcanzar una precisión dada.
- **Búsqueda secuencial:** se examinan los resultados de un grupo de experimentos antes de posicionar y llevar a cabo el grupo siguiente. La noción básica es que cada prueba eliminará una porción de la región que está siendo explorada, confinando la búsqueda a secciones sucesivas más pequeñas, hasta que el intervalo final de incertidumbre es muy reducido y está dentro de los límites deseados.

Si el nuevo grupo de parámetros mejora el valor de la función objetivo, se le adopta como nuevo punto base, continuando la búsqueda en la forma descrita. En caso de no mejorarlo, se siguen distintas reglas para situar la búsqueda en la dirección correcta. La búsqueda del óptimo terminará cuando este haya sido localizado dentro de un grado de precisión requerido, o en el caso de no encontrar cambios en su valor tras sucesivas iteraciones.

La elección de una dirección de búsqueda y distancia factibles para asegurar cumplir las ecuaciones (2.11), puede realizarse de distintos modos. Por una parte, se pueden utilizar valores de la función en localizaciones particulares, junto con información obtenida de iteraciones anteriores; o por otra, se pueden emplear valores de las derivadas parciales de f con respecto a los parámetros.

Las técnicas que adoptan la primera forma de aproximación son conocidas como métodos de búsqueda directa. Son más eficientes que las de gradiente en cuanto al tiempo computacional que requieren, ya que aunque no siempre se muevan en la mejor dirección, no necesitan de una exploración local para definir cada dirección de movimiento. Para su aplicación pueden escogerse

direcciones típicas, situándolas de forma paralela a los ejes coordenados o siguiendo algún patrón de movimiento tal como una figura geométrica (método Simplex).

Aquellas metodologías basadas sobre el segundo tipo de aproximación se denominan métodos de gradiente. Con este nombre se denomina a las derivadas de la función objetivo con respecto a cada una de las n variables. El gradiente es un vector en un punto dentro de un espacio n -dimensional. La mayor razón de cambio de la función se encuentra moviéndose a lo largo del gradiente. Esta es llamada la dirección de paso ascendente si se está buscando un máximo y paso descendente en el caso de un mínimo. Desafortunadamente, la dirección de paso es una propiedad local, por lo que un movimiento iniciado en dicha dirección no necesariamente terminará alineado a lo largo de la nueva dirección de paso asociada al nuevo punto. Esto implica que la dirección de paso varía de punto a punto, y el lugar geométrico de movimientos infinitamente pequeños a lo largo de esta dirección será generalmente en una línea curva. Varias técnicas de búsqueda utilizan las características de la dirección de paso como su base. Dichos métodos se dividen en dos categorías:

- Aquellos que siguen la dirección de paso lo más cercanamente posible.
- Aquellos que utilizan el gradiente para guiar la búsqueda, pero cuyos movimientos no son realizados necesariamente en la dirección de paso.

Experimentalmente se ha establecido que los métodos de gradiente convergen más rápidamente que los de búsqueda directa. Es por tanto recomendado adoptarlos, siempre y cuando estén disponibles expresiones analíticas apropiadas para definirlos.

2.3. Técnicas de optimización utilizadas en esta tesis

2.3.1. Multiplicadores de Lagrange (Beveridge y Schechter (1970))

Es un método analítico aplicable a funciones multivariadas con restricciones en forma de igualdades. Se caracteriza por tratar de la misma forma a cada variable (evitando eliminaciones) y, al mismo tiempo, preservar la integridad de las restricciones. Lo anterior se logra mediante la introducción en el problema de ciertas constantes artificiales indeterminadas, por lo que deberán ser resueltas $n + m$ ecuaciones (donde n es el número de variables y m el de restricciones).

Desarrollo de condiciones necesarias

La condición necesaria para la existencia de un óptimo local es que dy definida como

$$dy = \sum_{i=1}^n \frac{\partial y}{\partial x_i} dx_i, \quad (2.13)$$

debe anularse para toda posible variación. Las variables admisibles son aquellas que satisfacen la ecuación:

$$g(x_i^* + dx_i, x_j^* + dx_j) = 0 \quad (2.14)$$

donde $g(x_1, x_2)$ es la restricción de la función objetivo, el punto $\{x_1^*, x_2^*\}$ es un máximo, y dx_1, dx_2 son desplazamientos admisibles. Entonces tenemos:

$$dg_k = \sum_{i=1}^n \frac{\partial g_k}{\partial x_i} dx_i = 0 \quad \text{para } k=1,2,\dots,m \quad (2.15)$$

En el punto estacionario restringido x^* :

$$g_k^* = g_k(x^*) = 0 \quad \text{para } k=1,2,\dots,m \quad (2.16)$$

Si multiplicamos (2.15) por una constante λ_k , se forma dF , donde:

$$dF = dy + \sum_{k=1}^m \lambda_k dg_k \quad (2.17)$$

esto es,

$$dF = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial y}{\partial x_2} dx_2 + \dots \right) + \lambda_1 \left(\frac{\partial g_1}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial g_1}{\partial x_n} dx_n \right) \\ + \dots + \lambda_m \left(\frac{\partial g_m}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial g_m}{\partial x_n} dx_n \right)$$

Agrupando términos en dx_i , resulta

$$dF = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} + \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_1} + \dots + \lambda_m \frac{\partial g_m}{\partial x_1} \right) dx_1 + \dots + \left(\frac{\partial y}{\partial x_n} + \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_n} + \dots + \lambda_m \frac{\partial g_m}{\partial x_n} \right) dx_n$$

o bien,

$$dF = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^m \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \right) dx_i \quad (2.18)$$

La función dF debe anularse para todas las variaciones admisibles y, como está compuesta de dos elementos, ambos deberán hacerlo para las mismas condiciones. Entonces:

$$dF = 0 \quad \text{para todas las variaciones admisibles.} \quad (2.19)$$

Como hay m restricciones, hay $n-m$ desplazamientos que pueden ser escogidos

arbitrariamente. Se seleccionan valores para λ_k ($k=1,2,\dots,m$), de tal manera que los coeficientes de los primeros m desplazamientos desaparezcan; por tanto, los λ_k se definen a partir de:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^m \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, m \quad (2.20a)$$

Así se dejarán solo desplazamientos arbitrarios en la expresión de dF . Como dF debe anularse para todos los valores de estos $n-m$ desplazamientos, los coeficientes de los mismos deben necesariamente anularse también, dando lugar a

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^m \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} = 0 \quad \text{para } i = m + 1, m + 2, \dots, n \quad (2.20b)$$

¿Qué se ha ganado introduciendo m multiplicadores indeterminados?: Esencialmente cada una de las variables x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) son tratadas como si fueran independientes con respecto a la función objetivo modificada, es decir

$$F = y + \sum_{k=1}^m \lambda_k g_k \quad (2.21)$$

Esta nueva función objetivo F reconoce la ecuación (2.17) sobre el cálculo del cambio resultado de un desplazamiento muy pequeño. Dicha función se supone estacionaria con respecto a todas las variaciones, por lo que

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n \quad (2.22)$$

y los λ_k son seleccionados de tal forma que

$$g_k = 0 \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, m \quad (2.23)$$

Estas condiciones generan un sistema de $n + m$ ecuaciones, y $n + m$ incógnitas x_1, x_2, \dots, x_n , y $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$.

Es importante hacer notar que la función objetivo modificada no puede ser examinada en la forma usual con el objeto de determinar si el punto estacionario es un máximo o un mínimo, por lo cual es necesario investigar la región del punto estacionario en la función objetivo original.

2.3.2. Búsqueda de la sección de oro (Walsh (1975) y Press et al (1986))

Este es un método numérico directo de búsqueda uniforme secuencial para funciones unidimensionales con restricciones. Estos procedimientos se caracterizan por utilizar un número

de experimentos en cada ciclo, colocados a distancias iguales en el intervalo explorado. Una vez analizados los puntos y localizado el intervalo que contiene al óptimo, este último es tratado nuevamente de la misma forma, aplicando el número de experimentos seleccionado y escogiendo un nuevo subintervalo que contenga el valor extremo.

La técnica está basada sobre la siguiente relación:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_n}{F_{n+1}} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \cong 0.618034$$

donde F_n y F_{n+1} son términos sucesivos de la serie de Fibonacci.

Para la aplicación de esta técnica es necesario primero aislar un mínimo. Esto se logra cuando en una función existe una tripleta de puntos, $a < b < c$, tales que $f(a) > f(b) < f(c)$. En este caso se sabe, con base en el criterio de unimodalidad, que la función tiene un mínimo en el intervalo $[a,c]$.

Ahora bien, si el intervalo $a < b < c$ tiene su punto b a una distancia de 0.38197 de uno de los extremos y a 0.61803 del otro, entonces a estas fracciones se les denomina secciones de oro. Esta relación tiene sus orígenes en el año 500 A.C., cuando los Pitagóricos le adjudicaban propiedades estéticas. Por las razones expuestas es que a este procedimiento de minimización se le llama "búsqueda de la sección de oro".

Dada en cada etapa una tripleta de puntos con las características ya mencionadas, el siguiente punto de la función por evaluar será localizado a una fracción de 0.38197 del más grande de los dos intervalos (medida desde el punto central de la tripleta). Si se inicia con una tripleta de puntos cuyos segmentos no están establecidos por la regla de oro, el procedimiento de escoger puntos sucesivos en la fracción de la sección de oro del intervalo más grande llevará rápidamente a alcanzar las proporciones apropiadas.

La búsqueda de la sección de oro garantiza que cada nueva evaluación de la función irá aislando el mínimo en un intervalo justamente 0.61803 veces el tamaño del intervalo precedente.

Dada una función unimodal de una variable continua x definida en el intervalo cerrado $[0,L]$, el procedimiento de la sección de oro puede ser resumido en los siguientes puntos:

- Encontrar los puntos de evaluación de la función de acuerdo a las proporciones dadas por la sección de oro:

$$x_1 = 0.38197 L, \quad x_2 = 0.61803 L,$$

Para este caso x_1 debe ser el punto central de la tripleta de valores aislada y x_2 el punto por evaluar de acuerdo a la indicación establecida anteriormente.

- Evaluar $f(x_1)$ y $f(x_2)$.
- Si $f(x_1) < f(x_2)$, entonces se descarta el intervalo (x_2, L_1) . Por tanto queda un intervalo $L_{1,1}$ de tamaño $0.61803 L_1$, y los siguientes puntos de evaluación de la función quedarán establecidos de la siguiente manera:

$$x_1 = 0.38197 L_{1,1} \quad x_2 = 0.61803 L_{1,1}$$

Si $f(x_2) < f(x_1)$, entonces se descarta el intervalo $(0, x_1)$. De igual manera, queda un intervalo $L_{1,1}$ de tamaño $0.61803 L_1$, y los puntos de evaluación de la función serán determinados de la misma forma:

$$x_1 = 0.38197 L_{1,1} \quad x_2 = 0.61803 L_{1,1}$$

- Repetir el segundo y tercer paso hasta alcanzar la precisión deseada para el mínimo.

2.3.3. Método de paso descendente (Beveridge y Schechter (1970) y Everitt (1987))

Como ya ha sido indicado, las derivadas parciales de una función $f(x)$ con respecto a cada uno de los n parámetros en x son, colectivamente llamadas, el gradiente de la función. El vector gradiente está simplemente dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}$$

Si se sigue la dirección indicada por dicho vector desde cualquier punto de un espacio n -dimensional, se incrementará el valor de la función en la razón más rápida posible. En caso de seguir la dirección negativa del gradiente, el valor de la función decrecerá en la razón más rápida posible.

El método de paso descendente explota la propiedad de la dirección del gradiente ya citada. Es una técnica numérica de gradiente cíclica para funciones multivariadas sin restricciones, la cual no sigue la línea curva de la dirección del gradiente, sino que la aproxima mediante una sucesión de líneas rectas. Cada línea corresponde a una etapa en la búsqueda, en la que se determina el gradiente local de la función, y se hacen movimientos a lo largo de la dirección resultante del paso descendente, buscando (unidimensionalmente) la localización del óptimo. De esta forma, dado un punto cualquiera x_i , el punto x_{i+1} se obtiene mediante una búsqueda lineal en la dirección $-g(x_i)$, es decir, siguiendo el vector gradiente evaluado en el punto x_i . El proceso

iterativo para encontrar el mínimo estará dado por la siguiente expresión:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \quad (2.24)$$

donde se parte del punto inicial \mathbf{x}_k , arbitrario y α_k , (la longitud de paso) se determina por un procedimiento de búsqueda directa unidimensional

El método de paso descendente es, en primera instancia, la mejor técnica para minimizar una función, ya que cada búsqueda unidimensional comienza en la mejor dirección. Sin embargo, como ya se señaló, la dirección del gradiente es una propiedad local, por lo que es necesario realizar frecuentes cambios de dirección, esto hace que el método sea ineficiente en algunos problemas

2.3.4. Método de gradiente conjugado (Smedstad y O'Brien (1991))

Muchos métodos de optimización avanzados son el resultado de una modificación del algoritmo de paso descendente, de tal forma que se han mejorado sus propiedades de convergencia.

El procedimiento de gradiente conjugado es un método alternativo para la minimización sin restricciones de una función general multivariable. El método produce una mejor aproximación al mínimo de la función con cada iteración. Durante cada una de ellas, se hace una estimación acerca del mejor modo de cambio de cada componente del vector \mathbf{x} , con el objeto de producir la máxima reducción en la función. La nueva dirección de descenso se encuentra al combinar información acerca del gradiente de la función con información de iteraciones anteriores. El algoritmo también requiere estimar una longitud de paso óptima, la cual debe ser utilizada para evaluar la magnitud de los cambios a lo largo de la dirección de búsqueda.

El problema consiste en minimizar una función cuadrática de la forma

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \quad (2.25)$$

donde $f(\mathbf{x})$ representa la función objetivo y \mathbf{x} es un vector representando las n variables, x_1, \dots, x_{n-1} de la función. Se supone que $f(\mathbf{x})$ puede ser escrita como una función cuadrática, donde \mathbf{Q} es una matriz simétrica definida positiva, \mathbf{b} es un vector, c es una constante y \mathbf{x}^T representa la traspuesta de \mathbf{x} . En general, el algoritmo para resolver la ecuación (2.25) toma la forma:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \quad (2.26)$$

donde \mathbf{d}_k es una dirección de descenso y α_k es un parámetro positivo de longitud de paso. La

ecuación (2.26) es referida a un método de gradiente generalizado.

Si se utiliza el método de paso descendente, la dirección de descenso d_k , estaría simplemente dada por $-g_k$, el gradiente negativo de la función.

Para el desarrollo de este método es necesario primero establecer algunas propiedades de las direcciones conjugadas. (Ver Smedstad y O'Brien (1991))

Definición: dada una matriz simétrica Q , dos vectores d_i y d_j se dice que son conjugados con respecto a Q si $d_i^T Q d_j = 0$ para $i \neq j$.

Si $Q = I$, entonces la definición anterior es equivalente a la noción de ortogonalidad.

Teorema: si Q es definida positiva y los vectores d_i son mutuamente conjugados, entonces esos vectores son linealmente independientes.

Para un grupo dado de n vectores linealmente independientes v_0, v_1, \dots, v_{n-1} , es posible establecer un grupo de direcciones conjugadas d_0, d_1, \dots, d_{n-1} de la siguiente manera; si

$$d_0 = v_0 \quad (2.27)$$

y entonces se define

$$d_i = v_i + \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} d_j \quad (2.28)$$

para $i = 1, \dots, n-1$, los coeficientes a_{ij} se escogen de manera tal que d_i es conjugada con respecto a las direcciones previas d_0, \dots, d_{i-1} . Multiplicando (2.28) por $Q d_i$, para $L = 0, \dots, i-1$ tenemos

$$d_i^T Q d_i = v_i^T Q d_i + \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} d_j^T Q d_i = 0 \quad (2.29)$$

Si todos los valores previos a_{ij} han sido escogidos de manera que los d_0, \dots, d_{i-1} son conjugados, entonces

$$d_j^T Q d_i = 0, \quad j \neq L \quad (2.30)$$

y de la ecuación (2.29) se llega a

$$a_{ij} = -\frac{v_i^T Q d_j}{d_j^T Q d_j} \quad (2.31)$$

para todo $i = 0, \dots, n-1$ y $j = 0, \dots, i-1$.

El grupo de vectores d_0, \dots, d_{n-1} definido por las ecuaciones (2.27) y (2.31) es conjugado con respecto a Q . El procedimiento anterior puede ser aplicado entonces para desarrollar el método de gradiente conjugado. El primer paso es hacer que

$$\mathbf{v}_0 = -\mathbf{g}_0 \quad (2.32)$$

de esta forma, el paso inicial es en la dirección del gradiente negativo de f y es idéntico a la dirección de paso descendente. El resto de los vectores se escoge como $\mathbf{v}_1 = -\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{v}_{n-1} = -\mathbf{g}_{n-1}$. Utilizando la ecuación (2.26) entonces tenemos

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \alpha_0 \mathbf{d}_0 \quad (2.33)$$

La siguiente dirección conjugada \mathbf{d}_1 puede encontrarse utilizando las ecuaciones (2.28) y (2.31) con $\mathbf{v}_1 = -\mathbf{g}_1$.

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \frac{\mathbf{g}_1^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_0}{\mathbf{d}_0^T \mathbf{Q} \mathbf{d}_0} \mathbf{d}_0 \quad (2.34)$$

De la ecuación (2.25)

$$\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k = \mathbf{Q}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) \quad (2.35)$$

y utilizando la ecuación (2.26)

$$\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0 = \mathbf{Q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \alpha_0 \mathbf{Q} \mathbf{d}_0 \quad (2.36)$$

La ecuación (2.25) puede entonces escribirse como

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \frac{\mathbf{g}_1^T (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0)}{\mathbf{d}_0^T (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0)} \mathbf{d}_0 \quad (2.37)$$

El proceso puede ser repetido generando el resultado siguiente

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_{j+1} - \mathbf{g}_j)}{\mathbf{d}_j^T (\mathbf{g}_{j+1} - \mathbf{g}_j)} \mathbf{d}_j \quad (2.38)$$

Esta expresión puede ser simplificada utilizando el hecho de que

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_j = 0 \quad (2.39)$$

para $j = 0, \dots, k-1$. El subespacio medido por $\mathbf{d}_0, \dots, \mathbf{d}_{k-1}$ es también el subespacio medido por $\mathbf{g}_0, \dots, \mathbf{g}_{k-1}$ y por lo tanto

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_j = 0 \quad (2.40)$$

para $j = 0, \dots, k-1$. La ecuación (2.38) se reduce entonces a

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_k \mathbf{d}_{k-1} \quad (2.41)$$

donde

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})} \quad (2.42)$$

Utilizando nuevamente (2.39), (2.40) y (2.41) para \mathbf{d}_{k-1} , la expresión para β se escribe finalmente como

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}} \quad (2.43)$$

Por último, es importante hacer notar que para calcular la nueva dirección \mathbf{d}_k solo es necesario conocer los gradientes de f actual y precedente, así como la dirección previa \mathbf{d}_{k-1} .

3. APLICACIÓN EN INGENIERIA SANITARIA. OBTENCIÓN DEL COEFICIENTE DE DISPERSIÓN LONGITUDINAL DE CONTAMINANTES

3.1. Descripción del fenómeno físico

3.1.1. Introducción

En este subcapítulo se describe el comportamiento de un contaminante tras ser arrojado en un flujo de agua. Se sigue el enfoque de la mecánica del transporte de masa, tema en el cual coinciden la ingeniería sanitaria abocada al modelado de la calidad de agua en ríos y la ingeniería hidráulica de canales abiertos. Basándose en el tipo de discusión realizada por French (1988), los fenómenos físicos que involucran la disgregación de un contaminante se analizan desde el punto de vista de su entendimiento y cuantificación, no de los efectos que dicho transporte provoca. Por la razón anterior, no se mencionará ningún contaminante en específico.

El proceso de mezclado de un contaminante está constituido por la combinación de los siguientes fenómenos.

- Difusión molecular.
- Transporte convectivo: es el transporte generado por la presencia de inestabilidades hidrodinámicas asociadas a gradientes de temperatura. En esta discusión no se tomará en cuenta dicha forma de transporte.
- Transporte advectivo: es el transporte debido a sistemas forzados de velocidad.
- Difusión turbulenta.
- Dispersión longitudinal.
- Cantidad de movimiento inicial del trazador.

- **Decaimientos o crecimientos del contaminante con el tiempo debido a características particulares del mismo.**

Según Fischer (1979), la difusión turbulenta y la dispersión son los procesos de mezclado significativos en el flujo en canales abiertos. La primera consiste en la propagación aleatoria de partículas dentro de un flujo ocasionada por movimientos turbulentos. La segunda involucra el movimiento de partículas provocado por la acción conjunta de esfuerzo cortante y de difusión turbulenta transversal. Por cortante se entiende la advección de un fluido a diferentes velocidades en distintas posiciones dentro del flujo. Por ejemplo, el perfil vertical de velocidades produce cortante, ya que las partículas cercanas a la superficie del agua se mueven más rápido que las cercanas al fondo.

Pueden diferenciarse tres etapas en el proceso de transporte de un contaminante :

1. Dilución inicial del contaminante dentro del flujo debido a su cantidad de movimiento.
2. Mezclado en toda la sección transversal producto de la difusión turbulenta.
3. Eliminación de las variaciones longitudinales en la concentración del contaminante como resultado de la dispersión longitudinal.

La modelación de la segunda etapa es tridimensional. En las direcciones lateral, vertical y longitudinal ocurre difusión turbulenta, y en la dirección del flujo se presentan fenómenos advectivos. Sin embargo, las expresiones para el cálculo de las concentraciones durante este periodo se basan en un análisis bidimensional de la propagación, considerando que ya se ha dado un mezclado total en la dirección vertical. En la tercera etapa, la propagación también es tridimensional, pero dado que la dispersión longitudinal es mucho mayor que la difusión turbulenta, esta última se desprecia, reduciendo la solución a una forma unidimensional que solo toma en cuenta la advección y la dispersión. Las tres fases se presentan en la siguiente figura :

Las tres etapas en el proceso de transporte de un contaminante :

<p>En el punto de descarga</p> 	<p>ZONA. DE CERCANIA :</p> <ul style="list-style-type: none">• Efecto del movimiento inicial.
<p>Aguas abajo del punto de descarga</p> 	<p>ZONA DE MEZCLADO TRANSVERSAL :</p> <ul style="list-style-type: none">• Estimación del mezclado con un modelo bidimensional.• Difusión turbulenta transversal y advección longitudinal.
<p>Después de unos kilómetros</p> 	<p>ZONA DE LEJANIA :</p> <ul style="list-style-type: none">• Modelo unidimensional de dispersión longitudinal.

3.1.2. Difusión molecular

En realidad, el efecto de la difusión molecular es pequeño en comparación con el provocado por los otros tipos de difusión; sin embargo, la modelación que la describe (fundamentada en la ley de Fick), es la base para el desarrollo de las ecuaciones correspondientes a las otras clases de difusión.

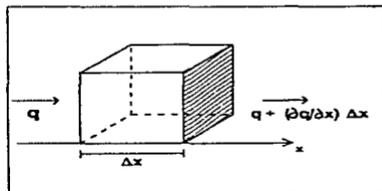
La ley de difusión de Fick indica que el transporte de masa a través de la superficie de un volumen de control es proporcional al gradiente de concentraciones (ver figura 3.1). Si se toma en cuenta lo anterior se llega a

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

donde

- D coeficiente de difusión molecular (m^2/s).
- C concentración del contaminante.
- t tiempo (s)
- x dirección del flujo

Figura 3.1. Difusión molecular del paso de una sustancia q por un volumen de control.



El sistema coordenado para el análisis se escoge de manera que el eje z coincida con la vertical (con el sentido positivo hacia abajo), y el plano x,y queda en un plano horizontal; el eje x coincide con el eje del río y el y es normal a éste.

3.1.3. Transporte advectivo

Al moverse un flujo, además de la difusión molecular, se presenta transporte advectivo. La advección de un contaminante con un flujo de velocidad \bar{u} en la dirección x está representado por :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial C}{\partial X} \quad (3.2)$$

Puede observarse que la concentración sólo depende de la velocidad \bar{u} y de su gradiente en la dirección del flujo. El signo negativo indica que la concentración disminuye en el tiempo si su gradiente en la dirección x es positivo. El efecto combinado de la difusión molecular y el transporte advectivo se denomina difusión advectiva, y su modelación se logra uniendo las ecuaciones (3.1) y (3.2) de la siguiente manera :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.3)$$

De esta forma, en la ecuación anterior se describe el fenómeno de la difusión advectiva como dependiente de la velocidad del flujo \bar{u} , del coeficiente de difusión molecular D , del tiempo t y del gradiente de la concentración. Esta fórmula, considerando un coeficiente de difusión molecular constante, queda expresada en forma tridimensional de la siguiente manera :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \therefore D \cdot \nabla^2 C = D \cdot \Delta C \quad (3.4)$$

El primer término del lado izquierdo de la igualdad representa la velocidad de cambio de la concentración en un punto, el segundo término indica el transporte mediante advección del contaminante por el fluido y el término del lado derecho modela la difusión molecular.

3.1.4. Difusión turbulenta

Debido a que el término de transporte advectivo descrito es función exclusiva de \bar{u} , no representa el fenómeno completo de la advección, por lo que es necesario introducir factores correctivos. Es por esta razón que se define el término de difusión turbulenta. Dicha difusión tiene su origen en el carácter turbulento del flujo en la naturaleza, por lo que la distribución del contaminante no coincide con el perfil de velocidad, sino que además de la difusión advectiva se propaga por las fluctuaciones turbulentas. Dado que las fluctuaciones turbulentas son tridimensionales, el contaminante se difunde en todas direcciones y, al final la difusión turbulenta lo mezclará completamente en la sección transversal. La representación del fenómeno anteriormente mencionado se logra modelando las fluctuaciones turbulentas siguiendo la idea de la ley de Fick (ver Fisher, 1979). La única diferencia se encuentra en el tratamiento de los coeficientes ya que, mientras se supone a los coeficientes de difusión molecular idénticos en todas

direcciones (debido a la isotropía del gradiente de la concentración), los coeficientes de la difusión turbulenta no son iguales como resultado de variación de las fluctuaciones turbulentas en las direcciones x, y, z

La ecuación que describe las difusiones advectiva y turbulenta, definiendo el campo de concentraciones en la etapa dos de la disgregación de un contaminante, es la siguiente :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = \epsilon_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \epsilon_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \epsilon_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (3.5)$$

donde ϵ_x , ϵ_y , ϵ_z son los coeficientes de difusión turbulenta en las direcciones x, y, z en [m²/s].

Las expresiones simplificadas para el cálculo de las concentraciones en ríos y canales durante esta etapa, se basan en un análisis bidimensional de la propagación. Se ha comprobado que el mezclado en la dirección vertical se da rápidamente, por lo que se considera que el contaminante se ha mezclado totalmente en dicha dirección, pero continúa haciéndolo en las direcciones lateral y longitudinal

Por las razones anteriores, se han desarrollado fórmulas empíricas fundamentadas en la relación proporcional de la intensidad de la turbulencia y el esfuerzo cortante en las paredes del canal; en general, se considera un flujo somero y una sección transversal rectangular de gran anchura.

a) Mezclado vertical.

El coeficiente de difusión turbulenta vertical se obtiene a partir del perfil de velocidades vertical por medio de la siguiente expresión :

$$\epsilon_z \approx 0.067 \cdot d \cdot u \quad (3.6)$$

donde $u_c = \sqrt{gRS}$ velocidad al cortante

d = tirante

La deducción de la ecuación anterior se puede ver en French (1988) o Fisher (1979).

b) Mezclado transversal

El coeficiente ϵ_y de la ecuación (3.6) se estimó considerando una anchura infinita, por lo que no existe un perfil de velocidades lateral. Debido a ello, no se puede obtener el coeficiente de difusión turbulenta transversal basándose en las mismas hipótesis. La expresión para su cálculo fue deducida a partir de resultados experimentales, los cuales son resumidos en Fisher (1979). En canales rectangulares rectos, una media aproximada de los resultados (con una variación posible

de $\pm 50\%$) es :

$$e_y \approx 0.15 \cdot d \cdot u. \quad (3.7)$$

En el caso de canales naturales con irregularidades moderadas en las fronteras, o canales con irregularidades fuertes de geometría y curvaturas, se han desarrollado fórmulas específicas (ver French, 1988 y Fisher, 1979).

Haciendo un análisis comparativo entre las ecuaciones (3.6) y (3.7) se puede observar que el coeficiente de mezclado transversal es aproximadamente diez veces mayor que el coeficiente de mezclado vertical. De acuerdo a lo anterior, Fisher indica que en un canal típico, el tiempo en que una pluma de contaminante se mezcla completamente en la dirección lateral es del orden de 90 veces el tiempo requerido para la propagación vertical. Debido a este distintivo, el mezclado lateral es determinante para la estimación de la distancia al punto de mezclado completo de la sección transversal.

c) Mezclado longitudinal.

Las fluctuaciones turbulentas provocan un mezclado longitudinal de valor similar al mezclado lateral, por lo que $e_y \approx e_x$. Sin embargo, la dispersión longitudinal (fenómeno que se explicará en el subcapítulo siguiente) es mucho mayor. Esta diferencia es del orden de 40 veces, comparada con la difusión turbulenta longitudinal. Por lo tanto, como consecuencia de su pequeña influencia en la propagación total del contaminante, ésta última generalmente se desprecia.

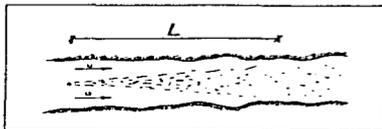
En flujos naturales no existen canales rectangulares con una profundidad uniforme, sin curvas y sin irregularidades en la sección transversal, como se supuso para el desarrollo de las ecuaciones anteriores. La no existencia de estas condiciones ideales causa una dispersión mayor. Tienen especial importancia el efecto de curvas y meandros donde existe un flujo transversal que aumenta el valor del coeficiente de difusión turbulenta transversal (fig. 3.3). Para la cuantificación de este efecto véase Fischer (1979). Por otra parte, en muchos casos no es posible evaluar el efecto de irregularidades como pilas de puentes o bancos de arena.

Figura 3.3 : Componente transversal de la velocidad en una curva.



Definiendo el mezclado completo como el punto donde la concentración no varía más del 5% a través de toda la sección transversal del canal, el modelo para la determinación de la distancia longitudinal L (ver figura 3.2) en la cual se presenta esta condición, supone la propagación bidimensional de una pluma mezclada completamente en la dimensión vertical.

Figura 3.2 : Longitud L hasta un mezclado completo en la sección transversal



Con base en lo anterior y tomando en cuenta la posición del punto de descarga en la dirección y , se han desarrollado dos ecuaciones para estimar L :

- Inyección en el centro del canal :

$$L = \frac{0.1 \bar{u} b^2}{c_y} \quad (3.8)$$

- Inyección en una de las orillas del canal :

$$L = \frac{0.1 \bar{u} (2b)^2}{c_y} \quad (3.9)$$

donde b = ancho del canal

Cuando la cantidad de movimiento inicial del contaminante es grande, las ecuaciones anteriores no pueden usarse, por lo que este movimiento debe ser tomado en cuenta para una correcta estimación de L .

3.1.5. Dispersión longitudinal

Una vez que el trazador se ha mezclado completamente en la sección transversal, los gradientes de concentración en la dirección x se reducen por la dispersión longitudinal. Como se mencionó anteriormente, este fenómeno es causado por el efecto conjunto de las tensiones cortantes, que provocan una distribución no uniforme de la velocidad en una sección, y de la

difusión turbulenta transversal Una vez que el punto de mezclado completo se ha alcanzado, la difusión actúa para suavizar la distribución, sin embargo, su efecto es relativamente pequeño si se compara con el efecto del gradiente de velocidad. De este modo, mientras mayores son las diferencias de velocidades entre las distintas zonas de la sección transversal, tanto mayor será la dispersión longitudinal.

En flujos naturales no sólo existe un perfil de velocidad vertical, sino también un perfil transversal. Lo anterior es resultado de la variación, tanto del área hidráulica en la dirección x, como de la profundidad de la sección transversal. Según Godfrey y Frederick (1970), citados en Fischer (1979), el perfil transversal es más determinante en la dispersión que el perfil vertical, ya que el primero genera variaciones horizontales de la concentración, provocando un mezclado en la dirección y que reduce las concentraciones. Según Reichert (1993), la dispersión longitudinal disminuye cuando el mezclado lateral aumenta.

De acuerdo a lo discutido en el párrafo anterior, lo adecuado sería aplicar un modelo bidimensional para el cálculo de la dispersión longitudinal, el cual incluiría las zonas de mezclado longitudinal y transversal. Sin embargo, en problemas prácticos normalmente se prescinde de esta última zona de mezclado y se utilizan modelos unidimensionales como el que se presenta a continuación.

De acuerdo con Fisher (1979), la ecuación de la dispersión longitudinal también puede ser establecida a partir del esquema de Fick. De esta forma, y siguiendo la misma metodología aplicada en el caso de la difusión turbulenta, la dispersión se modela de la siguiente manera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.10)$$

donde E = coeficiente de dispersión longitudinal (m²/s)

En esta expresión, el coeficiente E incluye la propagación causada por el perfil de la velocidad vertical y lateral. El empleo de la ecuación (3.10) está sujeto a las siguientes condiciones:

- Los mezclados transversal y vertical son totales (mezclado completo)
- La variación de la concentración es fundamentalmente en la dirección longitudinal.
- La ecuación no es válida antes de una distancia o tiempo necesario para que el ritmo del transporte advectivo dependa solo del gradiente de concentración del contaminante y de E (constante para un flujo uniforme). Esta condición inicial (para un derrame puntual sin cantidad

de movimiento) está dada por :

$$0 < x' < 0,4$$

con

$$x' = \frac{x \epsilon_x}{\bar{u} b^2} \quad (3.11)$$

donde x es la distancia longitudinal.

Un caso más general está representado por las siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t} (AC) + \frac{\partial}{\partial x} (UAC) = \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3.12)$$

en la que U, A y E pueden variar con la distancia y/o el tiempo.

Las ecuaciones (3.10) y (3.12) no incluyen decaimientos o crecimientos del contaminante con el tiempo. Para que tomen en cuenta este factor, se agrega en el lado derecho de dichas ecuaciones un término denominado fuente o sumidero. Dicho término toma en cuenta el tipo de contaminante descargado, para lo cual se define en primera instancia, si este es conservativo o no conservativo. En el último caso se debe definir el modo de decaimiento o crecimiento correspondiente.

Cuando se unen la ecuación que describe la longitud necesaria para un mezclado completo (3.8) y la ecuación de restricción (3.11), es posible observar que x debe ser mayor que 4L, por lo cual esta es la distancia inicial para alcanzar las condiciones requeridas. Para el caso que se analizará en esta tesis, se trabajará suponiendo un mezclado completo antes de la distancia mencionada.

En flujos naturales todas las irregularidades aumentan las dispersion. También se debe tomar en cuenta el efecto de las zonas muertas, en las que parte del contaminante se retiene. De esta forma, el contaminante retenido se libera lentamente de dicha zona y puede causar concentraciones observables aguas abajo, mucho después del paso de la nube principal. Por otra parte, como en las curvas existe un perfil de velocidad no uniforme en la dirección transversal (fig. 3.4), el coeficiente de dispersión es mayor que en flujos rectos. Para cuantificación de estos efectos véase Fischer (1979).

Como resultado de estas peculiaridades, según Meyer (1993), es difícil transferir los resultados del laboratorio a la realidad, ya que no existe seguridad de que las ecuaciones que describen correctamente la propagación en un canal de laboratorio, arrojen resultados

satisfactorios en ríos reales con todas sus irregularidades.

Figura 3.4 : Perfil de velocidades en curvas.



Ahora bien, el problema principal para representar la disgregación de un contaminante en un flujo de agua, es la estimación del coeficiente E. Con este fin, en la actualidad se cuenta con dos tipos de métodos, aquellos que no necesitan medir concentraciones y aquellos que requieren mediciones de campo. A continuación se presentan las distintas técnicas :

• **Métodos empíricos :**

- **Fischer (1967) :** esta ecuación es aplicable si se desea determinar E en un canal natural, cuando se tienen velocidades medidas y una sección transversal definida :

$$E = -\frac{1}{A} \int_0^b u' d \int_0^b \frac{1}{\epsilon_y} d \int_0^b u' d \quad dy \quad dy \quad dy \quad (3.13)$$

En la práctica, las integrales son reemplazadas por las siguientes sumatorias :

$$E = -\frac{1}{A} \sum_{i=1}^N q'_i \Delta y \left[\sum_{j=2}^i \frac{\Delta y}{\epsilon_j d_j} \left(\sum_{l=1}^{j-1} q'_l \Delta y \right) \right] \quad (3.14)$$

donde $q'_i = \left[(d_i + d_{i-1}) / 2 \right] u'_i$

u'_i = velocidad media en el elemento i de la sección transversal.

$u'_i = u_i + \bar{u}$

\bar{u} = velocidad media del flujo en la sección transversal.

d_i = tirante al inicio del elemento transversal i

Δy = ancho del elemento (constante).

ϵ_y = **0.6 d u** = coeficiente de difusión turbulenta transversal entre los elementos (i-1) e i.

N = número de elementos transversales.

Según Fischer (1979), N no debe exceder de 20 elementos. Las ecuaciones (3.13) y (3.14) suponen un flujo uniforme y una sección transversal constante. Debido a que toman en cuenta el perfil de la velocidad transversal logran describir con más cercanía el efecto de la dispersión.

- Fischer (1979) :

$$E = \frac{0.011 \bar{u}^2 b^2}{d u} \quad (3.15)$$

Esta ecuación considera el efecto del perfil de la velocidad transversal, pero es más práctica debido a que parte de parámetros comúnmente conocidos.

Según French (1988), al hacer un análisis comparativo entre los coeficientes de dispersión longitudinal estimados con las expresiones anteriores y los coeficientes medidos (ver tabla French(1988)), es posible observar que ninguno de ellos genera resultados satisfactorios. Sin embargo, asocia esta diferencia a la imprecisión del método empleado para la determinación de los valores medidos del coeficiente de dispersión, e incluso cita a Fischer (1979) para indicar que dichos valores generalmente tienen un error en la precisión de $\pm 100\%$.

- **Métodos basados en mediciones de campo :**

Existen tres métodos para calcular el valor de E a partir de datos de campo. En ellos, tras una descarga puntual de contaminante, se mide la nube resultante en dos estaciones aguas abajo, obteniendo la concentración con el tiempo en ambas secciones. Estos métodos consideran una distribución gaussiana de la concentración en el tiempo y un mezclado completo en las dos secciones :

- Método de momentos : El coeficiente de dispersión longitudinal es una medida del ritmo de cambio de la forma de la nube de contaminante; de este modo, es posible determinarlo a partir de las distribuciones de concentraciones medidas. Para llevar a cabo lo anterior, se aplica la siguiente ecuación propuesta por Fischer (1979)

$$E = \frac{\bar{u}^2}{2} \left[\frac{\sigma_{t_2}^2 + \sigma_{t_1}^2}{t_2 - t_1} \right] \quad (3.16)$$

con

$$\sigma_u^2 = \frac{\sum_{i=1}^n C_i t_i^2}{\sum_{i=1}^n C_i} - \left(\frac{\sum_{i=1}^n C_i t_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \right)^2 \quad (3.17)$$

- donde σ_u^2 = varianza de la concentración contra el tiempo en las secciones.
 C_i = concentración medida en el instante i
 t_i = tiempos desde la primera observación
 t_1 y t_2 = tiempo de paso del pico de la nube trazadora en las secciones aguas arriba y aguas abajo respectivamente

Con este método es importante que la distancia entre las secciones de medición sea larga, y que la primera sección se encuentre localizada por lo menos a la distancia de mezclado completo. Como fue mencionado, la ecuación supone una distribución gaussiana de concentración en la nube para calcular el coeficiente. Dado que en la mayoría de los casos no se presenta esta distribución, este supuesto puede causar resultados inexactos cuando la diferencia entre teoría y realidad es grande.

- Método de tránsito: esta técnica correlaciona una distribución de concentración observada a una distancia x_2 aguas abajo del punto de vertido, con una distribución predicha por un modelo. El modelo hace la predicción con base en otra distribución de concentración observada, pero a una distancia $x_1 < x_2$. A partir de estos datos, se debe modificar el valor de E hasta que la distribución predicha en la sección dos coincide con la distribución observada. Generalmente el criterio de convergencia consiste en minimizar la diferencia media cuadrada entre las dos curvas. Se aplica la ecuación siguiente, Fischer (1979):

$$C(x_2, t) = \int_0^{\infty} \bar{u} C(x_1, \tau) \frac{\exp\left\{-\left[\bar{u}(t_2 - t_1 - t + \tau)\right]^2 / 4E(t_2 - t_1)\right\}}{\sqrt{4\pi E(t_2 - t_1)}} d\tau \quad (3.18)$$

- donde $C(x_1, \tau)$ = concentración observada del contaminante a una distancia x_1 aguas abajo del punto de descarga en el tiempo τ .
 $C(x_2, t)$ = concentración estimada del contaminante a una distancia x_2 aguas abajo del punto de descarga en el tiempo.
 τ = variable de integración de tiempo

En la práctica la integración sólo tiene que efectuarse en el intervalo $t(1) \leq t \leq t(2)$ donde $t(1)$ y $t(2)$ son los puntos inicial y final de la distribución de concentración a x_1 .

- **Método de Krenkel:** se basa en la solución de la ecuación (3.10) para un pulso de entrada de contaminante (krenkel, 1960):

$$C = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Et}} \exp - \frac{(x - ut)^2}{4Et} \quad (3.19)$$

donde M es la masa del trazador y A es el área hidráulica. Ordenando y tomando el logaritmo en ambos lados de la ecuación se tiene

$$\log(C\sqrt{t}) = \log\left(\frac{M}{A\sqrt{4\pi E}}\right) - \frac{(x - ut)^2}{4Et} \log(e) \quad (3.20)$$

Si se traza una gráfica de $\log(C\sqrt{t})$ contra $(x - ut)^2 / t$ teóricamente debería obtenerse una recta con pendiente $\log(e) / 4E$, desde la cual se puede estimar E . Esta metodología solo requiere una curva de concentración contra tiempo a partir de una estación aguas abajo del vertido y t se mide desde la descarga del contaminante.

En el siguiente subcapítulo del presente trabajo, se utilizará la técnica variacional adjunta como otra metodología para la obtención del coeficiente de dispersión de contaminantes basada en mediciones de campo, esperando que sea una alternativa mejor a las ya existentes y que fueron descritas previamente.

3.2. Aplicación del método variacional adjunto para la obtención del coeficiente de dispersión de contaminantes

Siguiendo el procedimiento descrito en el capítulo dos, el problema por resolver radica en obtener el coeficiente E de la siguiente ecuación diferencial parcial:

$$\frac{\partial C}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.21)$$

Se supondrá en lo que sigue que el flujo es permanente, el canal es prismático y E es constante. Además, que se tiene mezclado completo y variación de la concentración fundamentalmente en la dirección longitudinal.

En las pruebas que se analizarán, se utilizó un canal prismático de sección rectangular. En cada una de ellas, tras un derrame puntual instantáneo, se hicieron mediciones de las concentraciones en dos secciones, considerando que ya había mezclado completo desde la primera estación. Para el cumplimiento de esta última condición se diseñó un dispositivo de derrame con una longitud igual al ancho de la sección transversal del canal, asegurando desde el comienzo de cada prueba el mezclado transversal. Para lograr también un rápido mezclado vertical, después del derrame se empleó un instrumento para agitar el flujo y forzar de este modo dicho mezclado (información más detallada de los experimentos, véase Berezowsky et al (1996)). Por otra parte, se utilizó una velocidad media para cada prueba, considerando un flujo permanente y uniforme, aunque de forma estricta esta última característica no se cumplía. Por último, se analizó el caso de un contaminante conservativo, razón por la cual no se incluyó el término sumidero en (3.21).

La expresión (3.21) es al mismo tiempo la ecuación de modelo y la restricción en el esquema de minimización. Para aplicar el método variacional, el siguiente paso es definir la función de costo J que mida el desajuste entre la solución de (3.21) y las observaciones hechas en las pruebas. Para esto se siguió la estructura propuesta por Smedstad y O'Brien (1991), representada por (2.6) que en este caso se escribe como:

$$J(C, E) = \frac{1}{2} K_c \iint (C - C')^2 dx dt + \frac{1}{2} K_E T L (E - E')^2 \quad (3.22)$$

donde C son las concentraciones calculadas, C' las concentraciones medidas, E es el nuevo coeficiente obtenido mediante el método inverso, E' la estimación inicial o anterior del coeficiente de dispersión, K_c y K_E son las matrices de validación, T es la duración de la simulación y L la longitud del tramo analizado. Nótese que en el segundo término del funcional no se han establecido integrales, esto se debe a la consideración de un coeficiente de dispersión constante para todo t y x en el tramo analizado. Por último, se puede observar que en (3.22), además de ser E el parámetro por obtener, se ha considerado como la variable de control de acuerdo a lo recomendado.

Una vez establecida la función de costo, la meta es minimizar (3.22) sujeta a la restricción (3.21). Para llevar a cabo lo anterior, como ya fue discutido, el problema es redefinido de tal forma que se transforma en un problema de minimización sin restricciones. La transformación se realiza mediante la aplicación de multiplicadores de Lagrange :

$$L(C, \lambda, E) = \frac{1}{2} K_c \iint (C - C')^2 dx dt + \frac{1}{2} K_e TL(E - E')^2 + \iint \lambda \left[\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} - E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right] dx dt \quad (3.23)$$

Ahora, se aplica la condición óptima de Euler-Lagrange para encontrar sus puntos estacionarios (los cuales corresponden al mínimo de la función de costo). De esta forma, la primera variación de L con respecto a λ (igualada a cero) da como resultado la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial L(C, \lambda, E)}{\partial \lambda} = 0 = \iint \delta \lambda \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} - E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) dx dt$$

esto es,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.24)$$

como puede observarse (3.24), es idéntica a la ecuación de modelo original (3.21).

Obteniendo la primera variación de L con respecto a C se obtiene la ecuación adjunta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(C, \lambda, E)}{\partial C} = 0 = & K_c \iint (C - C') \delta C dx dt + \iint \lambda \frac{\partial(\delta C)}{\partial t} dx dt \\ & + \iint \lambda \bar{u} \frac{\partial(\delta C)}{\partial x} dx dt - E \iint \lambda \frac{\partial^2(\delta C)}{\partial x^2} dx dt \end{aligned} \quad (3.25)$$

Integrando por partes el segundo término del lado derecho de la ecuación (3.25),

$$\iint \lambda \frac{\partial(\delta C)}{\partial t} dx dt = \int \lambda \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx - \iint \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta C dx dt \quad (3.25a)$$

Integrando por partes el tercer término de lado derecho de la ecuación (3.25),

$$\iint \lambda \bar{u} \frac{\partial(\delta C)}{\partial x} dx dt = \int \lambda \bar{u} \delta C \Big|_{x_0}^{x_f} dt - \iint \frac{\partial(\lambda \bar{u})}{\partial x} \delta C dx dt$$

Aplicando la regla del producto, el término queda finalmente como

$$\iint \lambda \bar{u} \frac{\partial(\delta C)}{\partial x} dx dt = \int \lambda \bar{u} \delta C \Big|_{x_0}^{x_f} dt - \iint \lambda \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \delta C dx dt - \iint \bar{u} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C dx dt \quad (3.25b)$$

Integrando por partes el cuarto término de lado derecho de la ecuación (3.25) se obtiene

$$- E \iint \lambda \frac{\partial^2(\delta C)}{\partial x^2} dx dt = - E \int \lambda \frac{\partial(\delta C)}{\partial x} \Big|_{x_0}^{x_f} dt + E \iint \frac{\partial \lambda}{\partial x} \frac{\partial(\delta C)}{\partial x} dx dt$$

Integrando por partes el segundo término del lado derecho de la expresión anterior

$$- E \iint \lambda \frac{\partial^2 (\delta C)}{\partial x^2} dx dt = - E \int \lambda \left. \frac{\partial (\delta C)}{\partial x} \right|_{t_0}^{t_f} dt + E \int \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx - E \iint \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \delta C dx dt \quad (3.25c)$$

Substituyendo (3.25a), (3.25b) y (3.25c) en (3.25), se llega a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(C, \lambda, E)}{\partial C} = 0 = & K_c \iint (C - C') \delta C dx dt + \int \lambda \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx - \iint \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta C dx dt \\ & + \int \lambda \bar{u} \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dt - \iint \lambda \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \delta C dx dt - \iint \bar{u} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C dx dt \\ & - E \int \lambda \left. \frac{\partial (\delta C)}{\partial x} \right|_{t_0}^{t_f} dx + E \int \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx - E \iint \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \delta C dx dt \end{aligned}$$

Ordenando la expresión anterior

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(C, \lambda, E)}{\partial C} = 0 = & K_c \iint (C - C') \delta C dx dt - \iint \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta C dx dt - \iint \lambda \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \delta C dx dt - \iint \bar{u} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C dx dt \\ & - E \iint \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \delta C dx dt + \int \lambda \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx + \int \lambda \bar{u} \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dt - E \int \lambda \left. \frac{\partial (\delta C)}{\partial x} \right|_{t_0}^{t_f} dx \\ & + E \int \frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta C \Big|_{t_0}^{t_f} dx \end{aligned} \quad (3.26)$$

Según Yu y O'Brien (1991), Smedstad y O'Brien (1991), así como Panchang y Richardson (1993), las siguientes condiciones de frontera deben ser aplicadas al derivar la ecuación adjunta (3.26):

- La variable adjunta λ debe ser cero al inicio y término del tramo analizado, de esta forma

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = 0 \quad \text{y} \quad x = x_{\text{Final}}$$

- La condición inicial para λ debe ser :

$$\lambda = 0 \quad \text{en} \quad t = T$$

Como ya fue mencionado, las ecuaciones adjuntas son forzadas por los errores, pero después del último nivel de tiempo computacional para el modelo directo no hay datos, por lo tanto, $\lambda = 0$ es la condición inicial natural en ese instante para la variable adjunta.

- Debido a que C es conocida en $t = 0$, como condición inicial para la ecuación de modelo se debe considerar :

$$\delta C = 0 \text{ en } t = 0$$

Aplicando las condiciones anteriores, se eliminan los últimos cuatro términos de la ecuación (3.26) y la ecuación adjunta resultante es

$$K_c(C - C') - \frac{\partial \lambda}{\partial t} - \lambda \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \bar{u} \frac{\partial \lambda}{\partial x} = E \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \quad (3.27)$$

Comparando la ecuación adjunta (3.27) con la ecuación de modelo puede observarse que tienen una forma similar, excepto que la primera tiene signos contrarios. Lo anterior implica que esta ecuación corresponde a una evolución hacia atrás en el tiempo, siempre y cuando el primer término se tome como un término fuente o sumidero

Siguiendo el mismo procedimiento para hacer estacionario el Lagrangiano con respecto a E se llega a

$$\frac{\partial L(C, \lambda, E)}{\partial E} = 0 = \frac{\partial J}{\partial E} - \iint \lambda \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dt \quad (3.28)$$

siendo esta expresión el gradiente de la función de costo con respecto al parámetro analizado.

De la derivada de la función de costo (3.22) con respecto a E se obtiene

$$E = E' + \frac{1}{K_c T L} \frac{\partial J}{\partial E} \quad (3.29)$$

Substituyendo (3.28) en (3.29)

$$E = E' + \frac{1}{K_c T L} \left(- \iint \lambda \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dt \right) \quad (3.30)$$

donde el signo negativo dentro del paréntesis se debe a la utilización de un método de gradiente en un problema de minimización.

Siguiendo la recomendación de Yu y O'Brien (1991), Smedstad y O'Brien (1991), y Panchang y Richardson (1993), conviene modificar la escala de la solución del problema eliminando una de las matrices de validación o pesos. De esta forma, si se define $\lambda^* = \lambda / K_c$ y $K = K_c / K_c$ se modifican las expresiones de la siguiente forma

$$(C - C') - \frac{\partial \lambda^*}{\partial t} - \lambda^* \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \bar{u} \frac{\partial \lambda^*}{\partial x} = E \frac{\partial^2 \lambda^*}{\partial x^2} \quad (3.31)$$

$$E = E' + \frac{1}{K T L} \left(- \iint \lambda^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dt \right) \quad (3.32)$$

El parámetro K , es un parámetro libre que puede ser utilizado para regular la velocidad y

rendimiento del proceso iterativo. Además, es una medida de los pesos relativos asignados en el funcional al término de desajuste de los datos, y al término de información anterior del parámetro. Se ha encontrado que algunos valores de este parámetro pueden degradar el rendimiento del esquema de minimización. Asociado al problema anterior, su orden de magnitud es difícil de establecer a priori, por lo que se han planteado como alternativas desde considerarlo igual a la unidad y sustituirlo por una longitud de paso en el esquema de minimización (Smedstad y O'Brien 1991), hasta la utilización del método de prueba y error para obtenerlo (Panchang y O'Brien 1990). En el caso particular de la estimación del coeficiente de dispersión, la utilización de la primera opción resultó infructuosa y la segunda era demasiado rudimentaria. Ante estas circunstancias, se utilizó la propuesta de Panchang y Richardson (1993), en la cual se elimina la subjetividad de K al explorar el rango de sus valores, cada uno de los cuales produce un coeficiente E con sus correspondiente desajuste de los datos, para determinar cual genera el menor error. Con este fin, recomiendan aplicar una rutina de optimización apropiada para llevar a cabo de forma más eficiente la búsqueda de una K_{min} . En esta tesis se utilizó el método de la sección de oro descrito en el subcapítulo 2.3.2., que requiere de tres estimaciones iniciales K_a , K_b y K_c tal que

$$K_a < K_b < K_c \quad \text{y} \quad M_{(E_a)} > M_{(E_b)} < M_{(E_c)}$$

donde $M_{(E_a)}$, $M_{(E_b)}$ y $M_{(E_c)}$ denotan el desajuste resultante de cada coeficiente E .

Debe hacerse notar que al tratar de encontrar el mínimo de la función de costo, no se puede esperar que este sea exactamente cero. Experiencias hidrológicas al aplicar la técnica variacional en la obtención de parámetros de flujos subterráneos, han demostrado que confiar en la norma del gradiente como única medida de convergencia hacia la solución óptima conduce a un número incesariamente grande de iteraciones. Smedstad y O'Brien (1991) sugieren revisar si $\|\nabla J\| / \|\nabla J_0\|$ es menor que una tolerancia preestablecida, donde $\|\nabla J\|$ denota la norma del gradiente durante la primera iteración. Estos autores sugieren utilizar como tolerancia un criterio de convergencia tal que $\|\nabla J\| / \|\nabla J_0\| \leq 10^{-2}$, y fue el criterio aquí empleado.

3.3. Procedimiento iterativo de solución

El esquema iterativo (basado en el método variacional adjunto) para obtener estimaciones sucesivas de E se plantea en los siguientes pasos .

1. Se escoge una primera estimación del coeficiente de dispersión E . Para que esta estimación no fuera disparatada, se utilizó la ecuación (3.15) propuesta por Fischer, como valor de referencia inicial en el proceso iterativo.
2. Se integra la ecuación de modelo 3.24 (modelo directo) hacia adelante en el tiempo para el periodo en el cual se tienen las observaciones. Se obtiene $\partial^2 C / \partial x^2$ en cada nudo.
3. Se calcula el desajuste de los datos ($C - C^*$) en las localizaciones donde existan datos.
4. Se integra la ecuación adjunta 3.31 (modelo inverso) forzada por el desajuste de los datos hacia atrás en el tiempo y se obtiene λ^* .
5. Se utilizan $\partial^2 C / \partial x^2$ y λ^* (calculados en los pasos 2 y 4) para calcular el gradiente de la función de costo ∇J (ecuación 3.28).
6. Con la información del gradiente se aplica la ecuación 3.32, en conjunción con una K cualquiera y un método de minimización de gradiente sin restricciones, para obtener una nueva estimación del parámetro E . En esta tesis se utilizó $K = 1$ como valor inicial en esta etapa del modelo.
7. Se utiliza el método de la sección de oro para optimizar K de tal manera que el parámetro estimado resultante produzca el menor desajuste.
8. Se revisa si el criterio de convergencia $\|\nabla J\| / \|\nabla J_0\| < 10^{-2}$ del proceso de minimización se cumple, donde ∇J_0 es el valor en la primera iteración.
9. Si no se encuentra la solución óptima, se regresa al paso 2.

La estructura numérica que se utiliza en la solución, tanto de la ecuación del modelo, como de la ecuación adjunta, se basa en el procedimiento planteado por Berezowsky (1993) para la modelación del transporte y dispersión unidimensional de contaminantes en ríos. En dicha metodología, la ecuación (3.24) se divide en dos expresiones que se analizan por separado; representando una el transporte advectivo puro y la otra a la dispersión longitudinal. La primera de las ecuaciones mencionadas es resuelta mediante el método de las características y la otra con un esquema de diferencias finitas del tipo Crank-Nicholson. En ese mismo reporte se describe el modelo matemático, el cual se adaptó en este trabajo para que incluyera el método adjunto variacional previamente descrito. Se aprovechó la ventaja de que la ecuación del modelo (3.24) y la adjunta (3.31) tienen formas similares, por lo cual, la solución numérica aplicada por Berezowsky al modelo directo también es válida para el modelo inverso.

3.4. Implementación del método inverso : casos estudiados, resultados y análisis

Como primera aplicación, se comprobó la consistencia del método variacional adjunto en a un caso con solución analítica y cuyo coeficiente de dispersión era conocido de antemano. Si el procedimiento inverso era adecuado, debería existir una correspondencia exacta entre las "observaciones" y los resultados del modelo, haciendo igual a cero el valor óptimo de la función de costo, y en consecuencia, iguales los coeficientes de dispersión calculado y conocido.

La simulación se llevó a cabo haciendo uso de la ecuación (3.19) para generar los datos de concentraciones, y se consideró un coeficiente de dispersión de 50 m²/seg, con los siguientes datos:

Cadenamiento de la primera sección (donde se tienen "observaciones") = 2000.0 m.

Cadenamiento de la segunda sección (donde se hacen las "mediciones") = 7000.0 m.

$$\Delta x = 200.0 \text{ m}$$

$$u = 0.5 \text{ m/s}$$

Sección rectangular : tirante = 1.0 m

ancho = 100.0 m

Masa del trazador = 10.0 kg

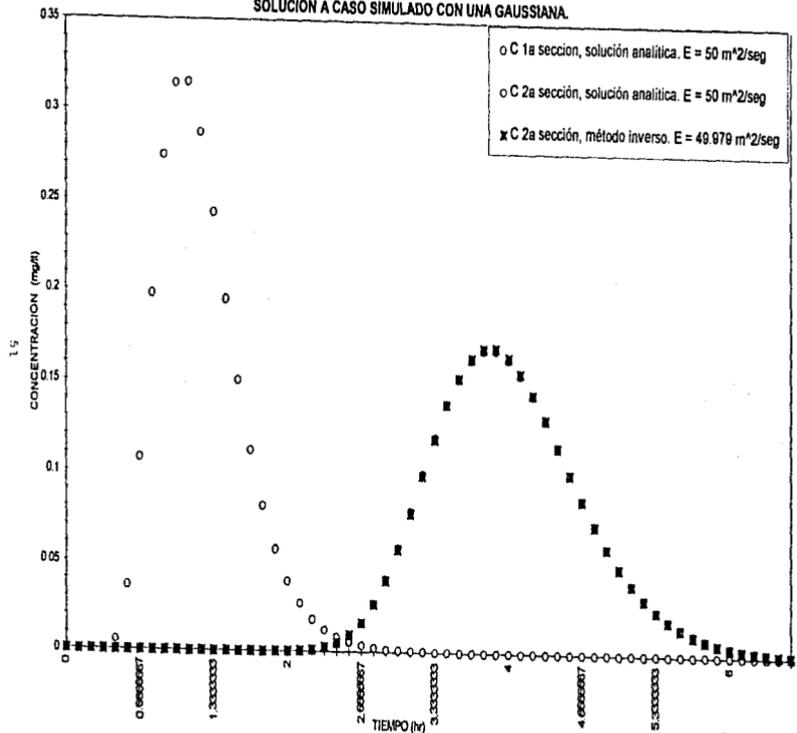
Al aplicar el procedimiento aquí descrito se obtienen los siguientes resultados :

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	∇/∇_0
550	3	49.979	2.38×10^{-3}

Como se puede observar, el método logra una aproximación adecuada al coeficiente utilizado en la simulación con un número pequeño de iteraciones. La diferencia entre lo medido y lo calculado es de apenas un 0.042 %. Puede corroborarse que este error es poco significativo observando en la gráfica siguiente la consistencia entre las concentraciones calculadas y "medidas".

Este ejemplo permite probar además la bondad del método numérico (tanto del método directo como del problema inverso), pues la difusión numérica es mínima y las concentraciones

SOLUCION A CASO SIMULADO CON UNA GAUSSIANA.



calculadas con $E = 49.979 \text{ m}^2/\text{seg}$ son prácticamente idénticas a las obtenidas analíticamente con $E = 50.0 \text{ m}^2/\text{seg}$.

Una vez que fue probado el método con un problema teórico basado en una solución analítica, se aplicó el método para obtener el coeficiente de dispersión de nueve pruebas experimentales realizadas entre diciembre de 1995 y febrero de 1996, en el canal de pendiente variable del Instituto de Ingeniería de la UNAM. Este canal tiene una longitud de 25.00 m, ancho de 0.80 m y 1.00 m de alto. Las secciones analizadas fueron localizadas en el último tercio del canal con una separación de 9.60 m entre sí. Se utilizó Rodamina B como trazador. Esta sustancia es un colorante conservativo y neutro para el ambiente. La condición para que cada una de las pruebas fuera considerada satisfactoria y, por lo tanto, adecuada para ser analizada, se basó en la pérdida de masa entre dos secciones. Dado el carácter conservativo de la Rodamina B, la masa de trazador observada en cada una de las estaciones de medición debería ser la misma; sin embargo, errores en el equipo y las metodologías de muestreo empleadas impidieron que dicha característica se cumpliera exactamente. Debido a esto, de las más de 30 pruebas que se realizaron, solo se aceptaron aquellas en las cuales la diferencia de masa entre secciones fue como máximo del 10%. Los datos de las 9 pruebas que cumplieron con el requisito anterior se presentan a continuación:

**PRUEBAS REALIZADAS EN EL CANAL DE PENDIENTE VARIABLE DEL
INSTITUTO DE INGENIERIA DE LA UNAM.**

PRUEBA	GASTO (lt/s)	TIRANTES		S_f ($\times 10^{-3}$)	VELOCIDAD MEDIA MEDIDA CON MOLINETE		E (MÉTODO DE MOMENTOS) (m^2/seg)
		Y_A (cm)	Y_B (cm)		V_A (m/s)	V_B (m/s)	
8/12/95	36.124	11.0	12.0	1.345	0.398	0.347	0.111
16/1/96	20.765	10.0	12.0	0.482	0.261	0.222	0.069
25/1/96	50.0	12.5	12.5	1.980	0.462	0.503	0.087
8/2/96	50.0	14.0	14.5	1.339	0.436	0.441	0.178

PRUEBA	GASTO (lt/s)	TIRANTES		S_f ($\times 10^{-3}$)	VELOCIDAD MEDIA MEDIDA CON MOLINETE		E (MÉTODO DE MOMENTOS) (m^2/seg)
		Y_A (cm)	Y_B (cm)		v_A (m/s)	v_B (m/s)	
9/2/96	50.0	16.5	17.3	0.810	0.380	0.359	0.091
15/2/96	36.124	16.0	10.0	2.036	0.392	0.412	0.265
20/2/96	36.124	15.0	16.0	0.547	0.295	0.267	0.128
23/2/96	20.765	8.0	9.0	1.224	0.306	0.284	0.194
28/2/96	20.765	8.5	9.0	0.001	0.287	0.262	0.120

(información detallada sobre las características del equipo, instalaciones y el proceso experimental utilizados en estas pruebas, vease Berezowsky et al (1996))

Todas las pruebas fueron analizadas con las mismas condiciones y métodos. Sin embargo, únicamente se presentarán los análisis y resultados completos de una de ellas, considerándola como la prueba representativa. Lo anterior tiene como objetivo evitar presentar información de forma repetitiva, haciéndola más clara y menos densa.

El experimento patrón fue realizado el 9/2/1996, y para estimar el coeficiente de dispersión que representaba el fenómeno físico medido se aplicaron los siguientes procedimientos:

- **Método inverso:**

Con la finalidad de observar el comportamiento del método ante distintas suposiciones iniciales del coeficiente de dispersión, además del valor dado por la ecuación (3.15), se utilizaron un coeficiente nulo y un valor grande del coeficiente de dispersión (como podrá apreciarse en las tablas mostradas más adelante). El valor nulo es el más pequeño que cualquier coeficiente puede tomar desde el punto de vista físico. Como criterio de convergencia para

detener el método iterativo, se utilizó el indicado por Smedstad y O'Brien (1991), sin embargo, se limitó como máximo a cinco el número de iteraciones en caso de que dicho criterio no fuera satisficcho. Las distintas versiones del proceso inverso que fueron aplicadas fueron :

- I. Paso descendente como método de minimización .
- II. Gradiente conjugado como método de minimización .

• **Método de tránsito :**

- I. Se utilizó el error cuadrático medio como criterio de convergencia :
- II. Se utilizó el error en el primer momento del perfil de la concentración, normalizado por el tiempo de viaje exacto.

Cada uno de estos casos fue resuelto de dos diferentes maneras, de acuerdo al procedimiento con el cual se obtuvo la velocidad media de la prueba. Los criterios utilizados fueron :

- a) Cálculo de la velocidad promedio en función del gasto medido en un vertedor y el área hidráulica media entre las dos secciones (estimada con el tirante medio, obtenido de los tirantes medidos).
- b) Cálculo de la velocidad promedio como la relación de la distancia entre las secciones analizadas y la diferencia de los tiempos de paso del pico en cada una de ellas.

Se incluyó el método de tránsito por considerarse importante hacer un análisis comparativo entre una metodología ya probada en la práctica y el procedimiento propuesto en esta tesis. Los resultados presentados en forma de tablas y gráficas concentración contra tiempo pueden ser observados a continuación :

PRUEBA DEL 9/2/1996

METODO INVERSO.

**I-MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE
A)VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.**

E ₀ m ² /seg	ITERACIONES		E _{FINAL} m ² /seg	∇J/∇J ₀
	No			
0.09598	5		0.1615	1.04 x 10 ⁻¹
0.0	2		0.1605	1.04 x 10 ⁻²
0.4	5		0.1611	2.09 x 10 ⁻¹

B) VELOCIDAD MEDIA FUNCION DEL GASTO.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.05697	2	0.4971	1.16×10^{-2}
0.0	2	0.4967	2.7×10^{-3}
0.7	5	0.4907	4.47×10^{-1}

II.-MINIMIZACION CON GRADIENTE CONJUGADO

A) VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.09598	5	0.161	1.1×10^{-1}
0.0	2	0.1605	1.04×10^{-2}
0.4	5	0.1611	2.08×10^{-1}

B) VELOCIDAD MEDIA FUNCION DEL GASTO.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.05697	2	0.4971	1.16×10^{-2}
0.0	2	0.4967	2.7×10^{-3}
0.7	5	0.4886	4.29×10^{-1}

METODO DE TRANSITO.

I.-CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO (ERR).

A)VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	150	0.149	1.16×10^{-2}

B)VELOCIDAD MEDIA FUNCION DEL GASTO.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	90	0.089	1.9×10^{-4}

I.-CONVERGENCIA CON EL ERROR EN EL PRIMER MOMENTO (μ)

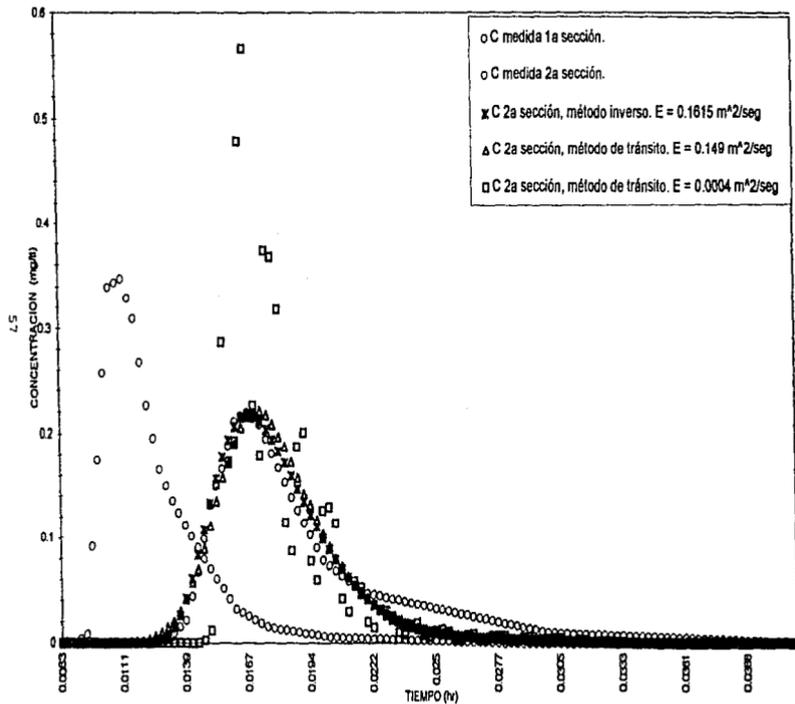
A)VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	E_{FINAL} m ² /seg	μ
0.001	0.0004	1.8×10^{-1}

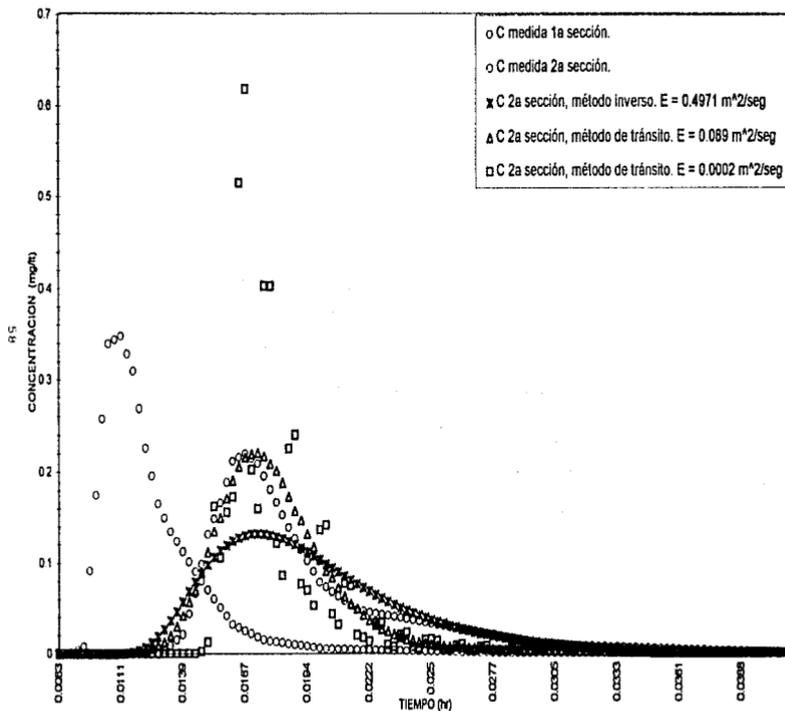
B)VELOCIDAD MEDIA FUNCION DEL GASTO.

E_0 m ² /seg	E_{FINAL} m ² /seg	μ
0.001	0.0002	5.6×10^{-3}

PRUEBA 8/2/1998. VELOCIDAD $f(t,d)$ DE PICOS.



PRUEBA 9/2/1998. VELOCIDAD (Q,Am)



Analizando las tablas y gráficas anteriores se puede concluir lo siguiente :

- Contrariamente a lo indicado por Yu y O'Brien (1991), Smedstad y O'Brien (1991), así como Panchang y Richardson (1993), no existe en este caso una diferencia entre utilizar como método de minimización paso descendente o gradiente conjugado. Esto se debe a que se tiene un solo parámetro a determinar y a que este es constante; por ello, ambos métodos son equivalentes. Debido a lo anterior, se decidió reportar en las pruebas restantes únicamente los resultados generados por la primera metodología.
- Los coeficientes obtenidos a partir de distintas suposiciones iniciales generan parámetros con una diferencia muy pequeña y poco significativa, por lo que en los esquemas presentados, solo se graficó el método inverso correspondiente a la E inicial propuesta con la ecuación (3.15).
- Para el método de tránsito, el criterio de convergencia de "error en el primer momento", da resultados imposibles desde el punto de vista físico, ya que genera una distribución aguas abajo con una concentración pico mayor que la de aguas arriba. Debido a lo anterior, es totalmente inadecuado, y en las pruebas siguientes este método no será usado.
- En todas las pruebas examinadas, el método inverso es sensible a los valores iniciales supuestos del coeficiente de dispersión, con algunos valores converge rápidamente en pocas iteraciones y con otros lo hace lentamente. Sin embargo, en los casos donde el criterio de convergencia no se satisface en cinco iteraciones, se obtiene de cualquier forma una buena aproximación al valor correcto de E. Este fenómeno puede ser justificado mediante dos análisis complementarios :
 - 1º Si la suposición inicial del parámetro es cercana al valor óptimo, no se puede esperar que la función de costo y su gradiente experimenten un gran decremento (Smedstad y O'Brien, 1991). Esto no significa que el procedimiento de minimización sea inadecuado; en realidad si se alcanzará una aproximación propicia al óptimo, pero es difícil cumplir el criterio de convergencia establecido.
 - 2º El método puede ser descrito como no robusto, debido a que los coeficientes calculados son dependientes de las estimaciones originales. Sin embargo, como no se tiene un desajuste igual a cero, es posible obtener varios coeficientes de dispersión como soluciones estimadas, cada una de las cuales es una buena aproximación a la E verdadera (Panchang y Richardson, 1993). En otras palabras, para distintos valores iniciales de E se puede llegar a distintos valores finales que cumplen la tolerancia, lo cual implica, que el método variacional no garantiza una solución única. A pesar de lo anterior, los resultados

son adecuados de cualquier forma pues cumplen (con cualquier valor final de E), con la minimización del criterio de ajuste aplicado en la función de costo. Es decir que para cada E inicial se tendrá un valor final válido, asociado a un desajuste mínimo entre lo medido y lo calculado si se cumplió la tolerancia; si no, aunque el desajuste no sea mínimo, es tal que no se nota la diferencia

- En todos los casos, el criterio para el cálculo de la velocidad media no afecta los resultados del método de tránsito, en cambio el método inverso tiene un mejor ajuste cuando la velocidad se obtiene como función de la distancia entre secciones y tiempos de pico. Lo anterior puede ser debido a la característica ya mencionada de la no robustez del procedimiento, razón por la cual es sensible a un número pequeño de grandes errores en el grupo de datos. Dichos errores pueden ser resultado del grado de incertidumbre al medir los tirantes para obtener el área media, ya que esta medición fue hecha con poca precisión.

Como consecuencia de lo discutido en el párrafo precedente, en las tablas y esquemas subsecuentes únicamente se comparan los resultados generados por los métodos inverso y de tránsito al utilizar una velocidad media calculada con la distancia entre secciones y los tiempos de pico.

PRUEBA DEL 8/12/1995

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

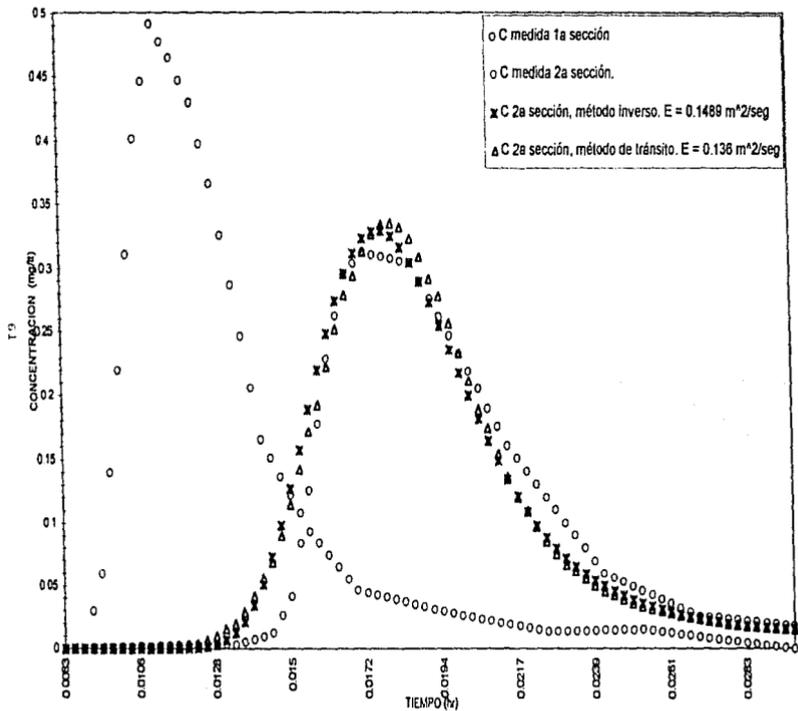
E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	\sqrt{I}/\sqrt{I}_0
0.11657	5	0.1489	11.42

METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR). VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	138	0.136	4.9×10^{-4}

PRUEBA 8/12/1995



PRUEBA DEL 16/1/1996

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_n m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.04551	5	0.0758	2.71×10^{-1}

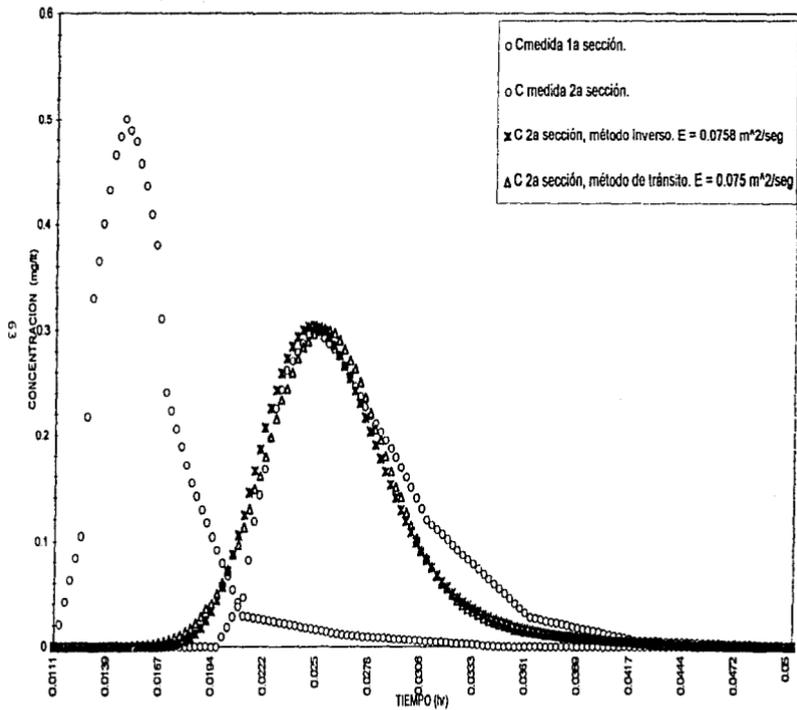
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_n m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	76	0.075	5.07×10^{-4}

PRUEBA 16/1/1996



PRUEBA DEL 25/1/1995.

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.23069	5	0.2384	9.27×10^{-1}

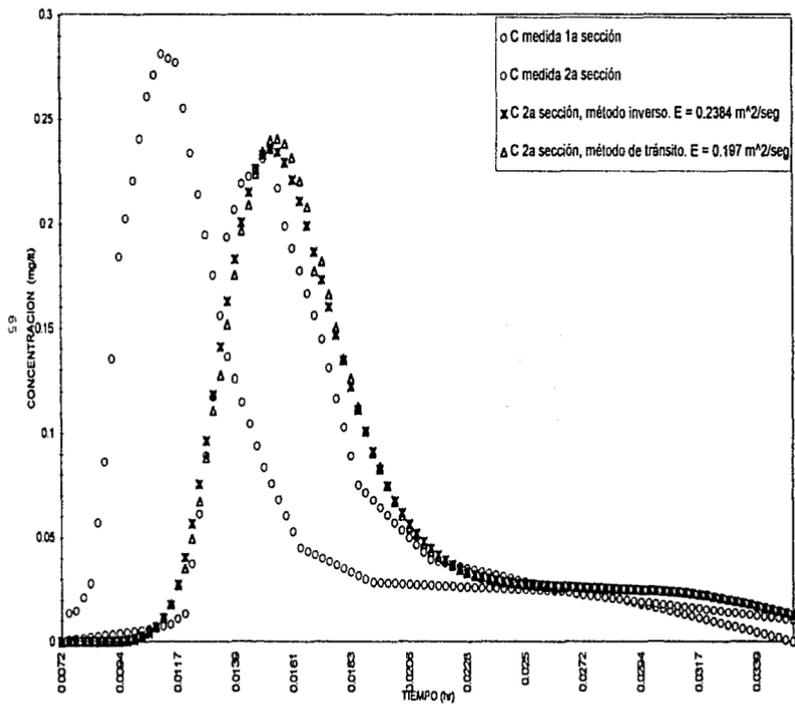
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	198	0.197	2.5×10^{-4}

PRUEBA 25/1/1996



PRUEBA DEL 8/2/1996

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.17785	5	0.1776	9.97×10^{-1}

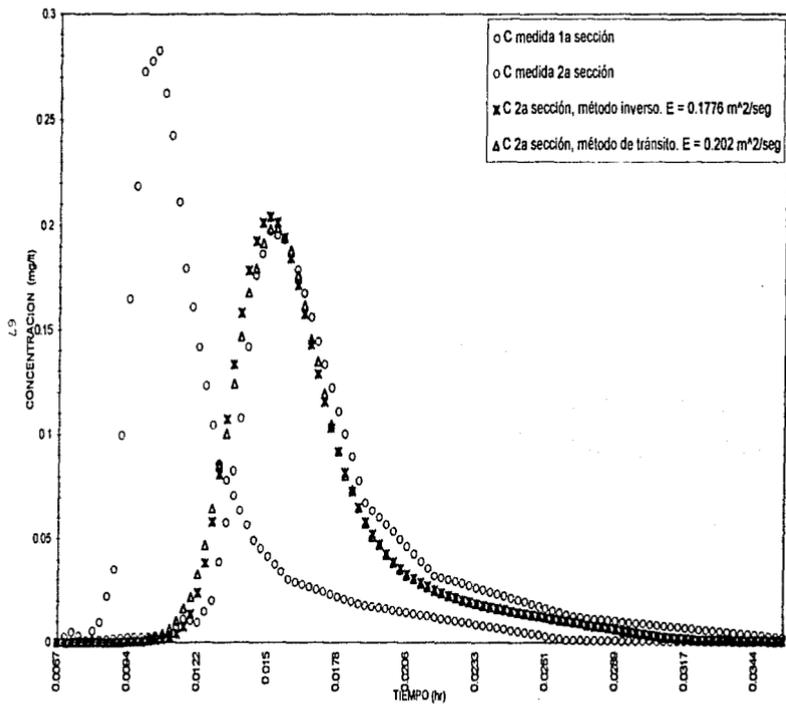
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	203	0.202	1.57×10^{-4}

PRUEBA 8/2/1996



PRUEBA DEL 15/2/1996.

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.20025	5	0.2	9.94×10^{-1}

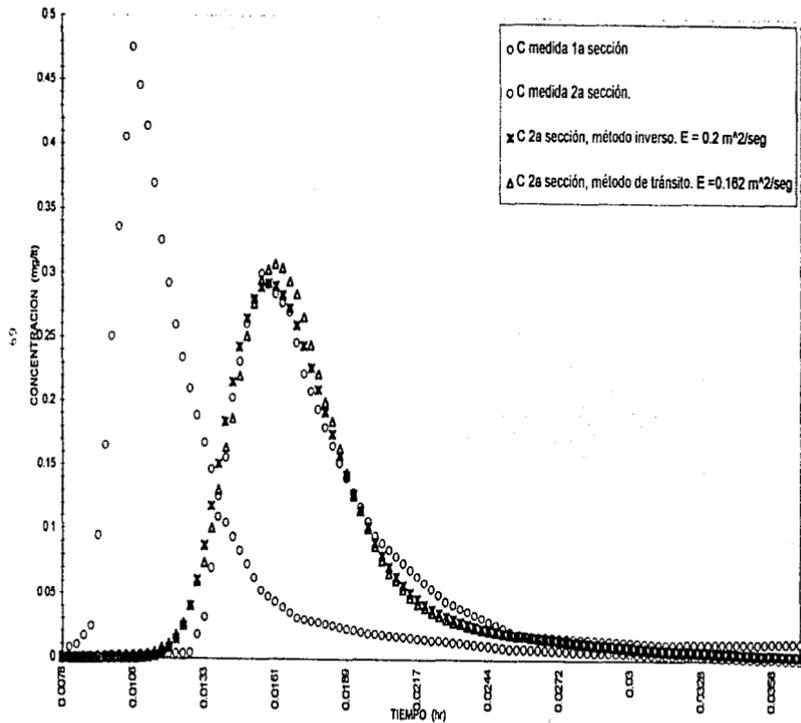
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	163	0.162	2.05×10^{-4}

PRUEBA 15/2/1996



PRUEBA DEL 20/2/1996.

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.06697	2	0.228	4.5×10^{-2}

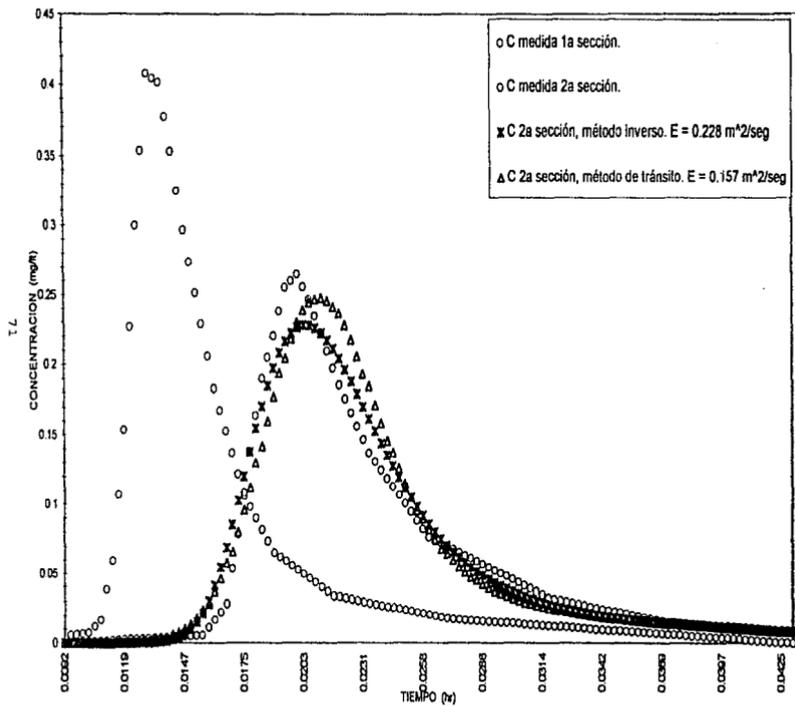
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	158	0.157	3.7×10^{-4}

PRUEBA 20/2/1996



PRUEBA DEL 23/2/1996.

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.09736	5	0.238	2.33×10^{-1}

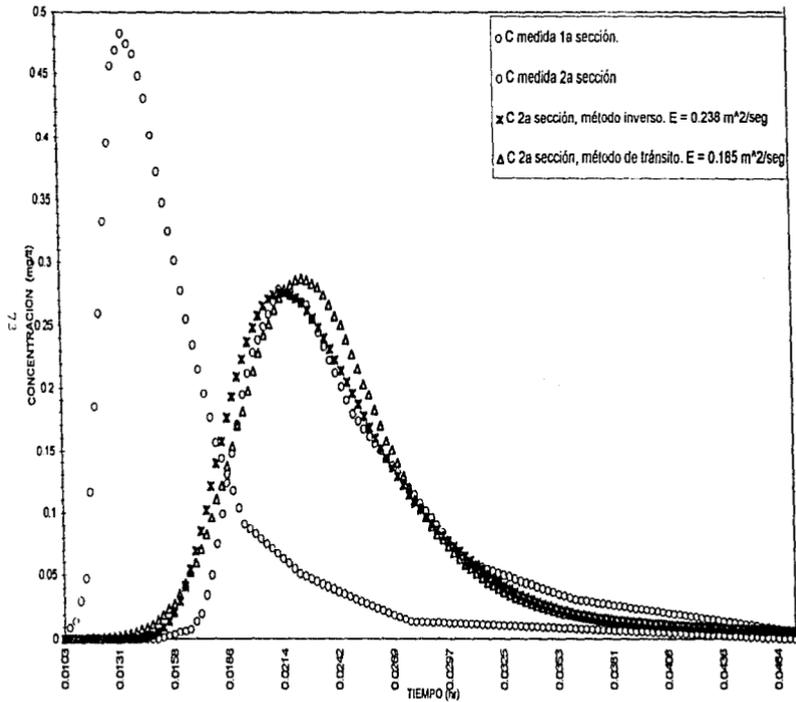
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	186	0.185	3.5×10^{-4}

PRUEBA 23/2/1996



PRUEBA DEL 28/2/1996.

METODO INVERSO

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.07716	5	0.2099	4.16×10^{-1}

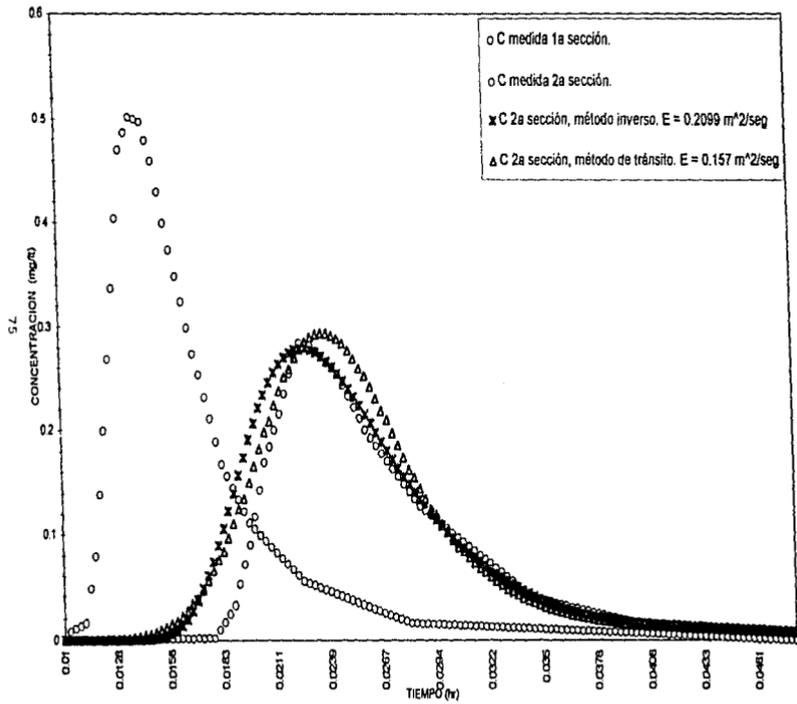
METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E_0 m ² /seg	ITERACIONES No	E_{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	158	0.157	5.87×10^{-1}

PRUEBA 28/2/1996



A partir del análisis comparativo de los resultados numéricos y gráficos originados por el método inverso y el de tránsito, se pueden establecer las siguientes conclusiones :

- Las metodologías comparadas producen distintos valores estimados del coeficiente de dispersión. La diferencia de valores entre ambos métodos va desde el 1% hasta el 35%, pero como la relación entre la magnitud del coeficiente y la dispersión no es lineal, solo se generan pequeñas diferencias en las distribuciones de concentración correspondientes a cada estimación.
- Observando las gráficas es posible notar que el método inverso se ajusta, en la mayoría de los casos, mucho mejor a las distribuciones medidas que el método de tránsito (véase por ejemplo la prueba del 15/2/1996). Además de lograr dicho ajuste con un número menor de iteraciones. Por las razones anteriores se puede considerar al método inverso como ligeramente superior.
- En algunos, casos como la prueba del 25/1/1996, ambos procedimientos provocan un desplazamiento de las distribuciones con respecto al tiempo de la concentración pico de la distribución medida. Esto puede ser debido a tres factores :
 - ◆ Errores en los intervalos de tiempo en los cuales fueron tomadas las muestras, por lo cual el tiempo medido de la concentración pico no corresponde al verdadero en cualquiera de las secciones.
 - ◆ Errores al obtener las muestras y/o al calcular las concentraciones en el laboratorio.
 - ◆ A una medición defectuosa de la distancia entre secciones.
- En otros no hay desplazamiento, pero el desajuste entre los datos medidos y lo calculado con el método inverso es muy grande (prueba del 20/2/1996). Este fenómeno pudo ser provocado también por los dos primeros factores mencionados en el punto anterior.

Por último, fue implementada la misma metodología sobre un experimento realizado en las instalaciones del Instituto Mexicano de Tecnología del Agua en Cuernavaca, Morelos. En dicho lugar se contó con un canal de 50.0 m de largo, 0.60 m de ancho y 1.00 m de altura. La primera sección analizada se colocó a 32.50 m del punto de vertido, y entre las secciones se dejó una distancia de 12.65 m. El trazador y las condiciones para aceptar la prueba fueron las mismas que para las realizadas en el canal de Instituto de Ingeniería. Para la estimación del coeficiente de dispersión, al experimento del IMTA le fueron aplicadas los mismos procedimientos y consideraciones anteriormente descritos. Los datos y resultados se presentan a continuación :

PRUEBA IMTA DEL 25/6/1996.

DATOS.

PRUEBA	GASTO (lt/s)	TIRANTES		VELOCIDAD MEDIA MEDIDA CON MOLINETE (m/s)
		Y _A (cm)	Y _B (cm)	
25/6/96	45.60	18.7	15.7	0.436

METODO INVERSO.

MINIMIZACION CON PASO DESCENDENTE

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E ₀ m ² /seg	ITERACIONES No	E _{FINAL} m ² /seg	$\nabla J / \nabla J_0$
0.04373	2	0.113	7.3×10^{-3}

METODO DE TRANSITO.

CONVERGENCIA CON ERROR CUADRÁTICO MEDIO(ERR).

VELOCIDAD MEDIA FUNCION DE LOS PICOS.

E ₀ m ² /seg	ITERACIONES No	E _{FINAL} m ² /seg	ERR
0.001	77	0.076	5.5×10^{-4}

Después de analizar los resultados de esta prueba, es posible aplicar las mismas conclusiones del análisis comparativo de métodos ya descrito para el caso de los experimentos realizados en el Instituto de Ingeniería de la UNAM. De este modo se comprueba la eficacia del método para aplicarse en cualquier circunstancia.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

4. CONCLUSIONES

En esta tesis se analizó la aplicabilidad de las metodologías inversas de modelación en la estimación de parámetros utilizados en la solución de problemas de Ingeniería Civil, y posteriormente, se utilizó un procedimiento inverso llamado método variacional adjunto para obtener el coeficiente de dispersión de contaminantes en canales.

El método variacional se caracteriza por minimizar un funcional o función de costo que representa el desajuste entre los datos observados y los resultados de la modelación. La minimización se lleva a cabo utilizando como restricción las ecuaciones de modelo, su solución involucra multiplicadores de Lagrange y lleva a ecuaciones adicionales o adjuntas, desde las cuales se determinan dichos multiplicadores. Las variables del modelo y los multiplicadores de Lagrange permiten entonces el cálculo del gradiente del funcional original, el cual se utiliza para minimizar dicho funcional mediante métodos de optimización clásica.

De acuerdo a los resultados obtenidos, tras realizar este trabajo se llegó a las siguientes conclusiones:

- Muchos problemas de Ingeniería Civil cuya modelación involucre parámetros puede ser resueltos mediante metodologías inversas.
- La conclusión anterior tiene especial aplicación en los aspectos que a continuación se presentan:
 - ◆ Para inferir los parámetros del modelo a partir de mediciones de parámetros observables (concepto clásico de problema inverso).
 - ◆ Para comprobar que los valores de los parámetros usados en la metodología directa son los que realmente se están presentando. De esta forma, los parámetros verdaderos pueden ser deducidos desde los datos para compararlos con los empleados

originalmente. Esto puede, por ejemplo, ser aplicado en la etapa de operación y mantenimiento de una obra.

- ◆ En muchos problemas de diseño para los cuales sea necesario calcular un factor de seguridad dividiendo lo calculado con la metodología directa y lo medido en laboratorio o en campo. De esta forma, a partir de las condiciones medidas y los factores de seguridad requeridos se podrían obtener los parámetros de diseño óptimos. En los casos donde fuera factible aplicar este procedimiento, se evitaria un derroche innecesario de recursos económicos ya que la obra no estaría sobrediseñada; y se optimizaría el proceso de diseño al reducir el número de tanteos necesarios para obtener la opción que cumpla con las condiciones de seguridad solicitadas.
- En el caso particular de la aplicación del método variacional adjunto para obtener el coeficiente de dispersión de contaminantes se puede indicar lo siguiente
 - ◆ El coeficiente de dispersión obtenido con el método inverso ajusta mucho mejor a las distribuciones medidas en casi todos los casos y además es estimado en un número menor de iteraciones, comparado con los calculados mediante procedimientos ya existentes. Con base en lo descrito, el método variacional se puede considerar superior a los procedimientos con los que se le confrontó.
 - ◆ Por otra parte, el procedimiento inverso variacional tiene menos restricciones para ser utilizado, lo cual es una ventaja sobre el resto de los métodos. De esta forma, dicho procedimiento puede ser aplicado con distribuciones iniciales complejas (sin que sean forzadamente Gaussianas), así como con velocidades y geometrias variables.
 - ◆ Los coeficientes de dispersión de contaminantes determinados con el método inverso variacional son dependientes de los valores iniciales supuestos, por lo que el procedimiento puede ser clasificado como no robusto. Sin duda esta característica fue una consecuencia de utilizar el criterio de mínimos cuadrados para resolver el problema inverso.
 - ◆ Como consecuencia de lo anterior, el método variacional no garantiza una solución única. Sin embargo, los resultados son adecuados de cualquier forma pues cumplen con la minimización del criterio de ajuste aplicado en la función de costo. Es decir que para

cada E inicial se tendrá un valor final válido, asociado a un desajuste mínimo entre lo medido y lo calculado.

Por último, se pueden sugerir las siguientes recomendaciones a aquellos que se interesen en usar la metodología aquí descrita :

- En el caso de querer aplicar una metodología inversa a un problema de Ingeniería Civil distinto al presentado en este trabajo, antes de tratar de resolverlo se deben tomar en cuenta la complejidad del problema y el grado de aproximación de las formas de solución existentes. De esta forma se podrá evaluar que tan factible resultaría hacerlo, que trascendencia tendría desarrollar otro procedimiento de solución y que tan práctico sería en comparación a los otros. Si después de analizar los aspectos anteriores se decide aplicarlo, el investigar si en otras áreas se han resuelto modelos con estructuras parecidas puede ser de gran utilidad
- Para el problema de la obtención del coeficiente de dispersión de contaminantes, recomendaría llevar a cabo una campaña en canales y ríos reales, basada en los procedimientos de medición y análisis aplicados en esta tesis. De esta manera, se podría observar el comportamiento del método inverso variacional con datos no obtenidos en un canal de laboratorio, y redondear el trabajo al comparar con otros procedimientos y poder concluir si realmente conviene aplicar en la práctica este método o es preferible continuar utilizando técnicas ya existentes (como la de tránsito).

BIBLIOGRAFIA

- Berezowsky, M. (1993). **Modelo matemático de transporte y dispersión unidimensional de especies en ríos**, Informe Interno, Universidad Politécnica de Cataluña, España.
- Berezowsky, M., Kampfer, A., Alarcón, P.A. y De Luna, E. (1996). **Experimentos de dispersión de contaminantes en canal de laboratorio**, Ingeniería Civil, Vol. 329, septiembre, 29-34.
- Beveridge, G.S.G., and Schechter, R.S. (1970). **Optimization. Theory and practice**, McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo.
- Everitt, B.S. (1987). **Introduction to optimization methods and their application in statistics**, Chapman and Hall, New York.
- Fisher, H.B. (1979). **Mixing in inland and coastal waters**, Academic Press Inc., San Diego.
- French, R.H. (1988). **Hidráulica de canales abiertos**, McGraw-Hill/Interamericana de México, México.
- Meyer-Scharemborg, U. (1993). **Determinación experimental del coeficiente de dispersión longitudinal**, Tesis Profesional, Universidad Politécnica de Cataluña, España.
- Panchang, V.G., and Richardson J.E. (1993). **Inverse adjoint estimation of eddy viscosity for coastal flow models**, Journal of Hydraulic Engineering, 119(4), 506-524.
- Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T. (1986). **Numerical recipes. The art of scientific computing**, Cambridge University Press, England.
- Reichert, P. (1993). **Mathematische modellierung aquatischer systeme, teil A: fließgewässer**, Vorlesung 03-426 sommersemester 1993, ETH Zürich.
- Sasaki, Y. (1970). **Some basic formalisms in numerical variational analysis**, Monthly Weather Review, 98, 875-883.
- Smedstad, O.M., and O'Brien, J.J. (1991). **Variational data assimilation and parameter estimation in an equatorial Pacific Ocean model**, Progress in Oceanography, 26, 179-241.
- Tarantola, A. (1987). **Inverse problem theory. Methods for data fitting and model parameter estimation**, Elsevier, Amsterdam.
- Walsh, G.R. (1975). **Methods of optimization**, John Wiley & Sons, England.
- Yu, L., and O'Brien, J.J. (1991). **Variational estimation of the wind stress drag coefficient and the oceanic eddy viscosity profile**, J. Phys. Oceanogr., 21, 709-719.

FE DE ERRATAS.

- En la página 14

Dice:

de donde se determinan x^* , λ^* y y^* .

Debe decir:

de donde se determinan x^* , λ^* y y^* .

- En la página 18

Dice:

En la actualidad existen dos tipos de procedimientos para enfrentar esta problemática: las técnicas analíticas y las numéricas.

Debe decir:

En la actualidad existen dos tipos de procedimientos para enfrentar esta problemática: las técnicas analíticas y las numéricas.

- En la página 22

Dice:

$dF = 0$ para todas las variaciones admisibles. (2.19)

Debe decir:

$dF = 0$ para todas las variaciones admisibles. (2.19)

- En la página 38

Dice:

... lo adecuado sería aplicar un modelo bidimensional para el cálculo de la dispersión longitudinal, el cual incluiría las zonas de mezclado longitudinal y transversal.

Debe decir:

... lo adecuado sería aplicar un modelo bidimensional para el cálculo de la dispersión longitudinal, el cual incluiría las zonas de mezclado longitudinal y transversal.

- En la página 44

Dice:

... después del derrame se empleó un instrumento para agitar el flujo y forzar de este modo dicho mezclado (información más detallada de los experimentos, véase Berezowsky et al (1996)).

Debe decir:

... después del derrame se empleó un instrumento para agitar el flujo y forzar de este modo dicho mezclado (información más detallada de los experimentos, véase Berezowsky et al (1996)).

- En la página 59

Dice:

...; con algunos valores converge rápidamente en pocas iteraciones y con otros lo hace lentamente.

Debe decir:

...; con algunos valores converge rápidamente en pocas iteraciones y con otros lo hace lentamente.

- En la página 76

Dice:

Por las razones anteriores se puede considerar al método inverso como ligeramente superior.

Debe decir:

Por las razones anteriores se puede considerar al método inverso como ligeramente superior.