

**METODO DE CALIBRACIÓN MEDIANTE
ALGORITMO GENETICO DE UN
MODELO DE CALIDAD DEL AGUA EN REDES DE CANALES**

Ing. Rafael Bécemberg Lippo

Trabajo de Grado presentado ante la ilustre
Universidad Central de Venezuela para
Optar al título de Magister Scientiarium en
Ingeniería Hidráulica.

Caracas, Octubre de 2.002

Certifico que he revisado este trabajo de
Grado y que lo encuentro apropiado tanto
en su contenido como en su formato y
apariencia externa

Prof. Iván Saavedra Cuadra

Tutor

Fecha

RESUMEN

Un algoritmo genético es una técnica de búsqueda y optimización “ciega”, heurística e intuitiva basada en los procesos de selección natural y supervivencia del más apto. Se basan en la representación digital del ADN y constituyen una herramienta muy útil para resolver problemas de optimización, presentando una serie de ventajas con respecto a los métodos tradicionales, ya que el mecanismo de evolución y de selección en que se basan, es independiente del problema a resolver. Dado el hecho de que no necesitan derivadas de las funciones con las cuales se trabaja, su desarrollo y eventual convergencia no está sujeta a condiciones de continuidad de las funciones y de sus derivadas, este enfoque presenta ventajas para problemas en los cuales normalmente dichas derivadas no tienen solución analítica que introducirían el problema adicional de encontrar una formulación numérica de dicha derivada.

En este trabajo se desarrolló un modelo unidimensional de transporte que en conjunto con un modelo de flujo, permite obtener la distribución espacial y temporal de una sustancia, utilizando y modificando la estructura básica de un algoritmo genético para obtener el valor del coeficiente E de dispersión involucrado en la ecuación de convección-difusión que mejor reproduzca el conjunto de mediciones que se tienen.

Se utilizaron probabilidades de cruce y mutación expresadas en función de la posición relativa de los individuos, con lo cual se acelera el proceso de convergencia del parámetro que se está calculando sin afectar su convergencia global. Se efectuaron pruebas en funciones de dos (2) y tres (3) parámetros previas a la aplicación en el caso real, siendo los resultados obtenidos indicativos de la eficiencia de la técnica de calibración utilizada.

Para obtener el valor del coeficiente E se definió una función de aptitud del problema, considerando la presencia de errores sujetos a una distribución probabilística, por lo cual se ajustan los parámetros por medio de la maximización de la función de verosimilitud.

Se efectuó la aplicación en el sistema hidráulico del río San Juan y se comprueba que este método permite obtener valores representativos del coeficiente de dispersión sin manipular la estructura original del modelo a calibrar.

METODO DE CALIBRACIÓN MEDIANTE

ALGORITMO GENETICO DE UN

MODELO DE CALIDAD DEL AGUA EN REDES DE CANALES

INDICE DE CONTENIDO

1. INTRODUCCION	1
1.1 MODELOS NUMERICOS EN HIDRAULICA FLUVIAL	1
1.1.1 Modelos de Flujo	2
1.1.2 Modelos de Transporte y calidad.....	3
1.1.3 Técnicas de Solución.....	3
1.2 MODELOS DE CALIDAD DEL AGUA	7
1.2.1 Ecuación de Convección-Difusión.....	8
1.3 TERMINOS DE FUENTE Y SUMIDERO	11
1.3.1 Cinética Química.....	13
1.4 SUSTANCIAS CONSERVATIVAS Y NO CONSERVATIVAS	15
1.5 ESTIMACION DE LOS VALORES DEL COEFICIENTE DE DISPERSION	18
1.6 CALIBRACION	25
1.7 DESARROLLO DEL ALGORITMO GENETICO. GENERALIDADES	28
1.8 OBJETIVOS DEL TRABAJO	37
2. DESCRIPCION DEL MODELO HIDRAULICO	39
2.1 FORMULACION MATEMATICA	39
2.1.1 Hipótesis.....	39
2.1.2 Ecuaciones Básicas.....	40
2.1.3 Pendiente de Fricción	411
2.2 METODO NUMERICO	42
2.2.1 Integración en el tiempo.....	42
2.2.3 Condiciones Iniciales y de Contorno.....	43
2.2.4 Solución del Sistema de Ecuaciones No-Lineales.....	44
2.3 ECUACIONES DE COMPATIBILIDAD EN LAS CONFLUENCIAS	46
2.4 SISTEMA FLUVIAL DONDE SE APLICO EL MODELO DE FLUJO	47
2.4.1 Propagación de la onda de marea en el estuario.....	47
3. DESARROLLO DEL MODELO DE CALIDAD DEL AGUA	49
3.1 ECUACIONES BASICAS	49
3.2 SOLUCION NUMERICA	52

3.2.1 Esquema Numérico	52
3.2.2 Conservación de la masa.....	54
3.2.3 Ecuación numérica en las confluencias.....	56
3.3 ESTABILIDAD Y PRECISION DEL MODELO	57
3.4 CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO.....	60
3.5 SISTEMA DE ECUACIONES.....	62
4. APLICACIÓN DEL ALGORITMO GENETICO	65
4.1 ALGORITMO GENETICO BASICO.....	67
4.2 MODIFICACIONES, ANTECEDENTES Y MEJORAMIENTO DEL ALGORITMO GENETICO	70
4.3 METODO DE CALIBRACION MEDIANTE ALGORITMO GENETICO.....	73
4.4 MODIFICACIONES DEL ALGORITMO GENETICO REALIZADAS EN ESTE TRABAJO	75
4.4.1 Probabilidades de cruce y de mutación.....	75
4.5 PRUEBA DEL ALGORITMO GENETICO PARA LA CALIBRACIÓN DE UN MODELO SIMPLE.	77
4.5.1 Prueba del esquema de calibración con parámetros conocidos.....	77
4.5.1.1 Función con dos parámetros de estimación	77
4.5.1.2 Función con tres parámetros de estimación	79
5. APLICACIÓN DEL MODELO DE TRANSPORTE Y SU CALIBRACION MEDIANTE ALGORITMOS GENETICOS.....	81
5.1 CASOS ESTUDIADOS.....	81
5.2 APLICACIÓN AL ESTUDIO DEL RIO SAN JUAN.....	83
5.2.1 Descripción del Area de Estudio.....	83
5.2.2 Discretización del sistema estudiado.....	85
5.2.3 Aplicación del algoritmo genético a la calibración.....	86
6. RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES	89
7. BIBLIOGRAFÍA	92

INDICE DE FIGURAS

Figura No. Descripción

- 1.1 Esquema de la variación espacial de los términos de convección y dispersión a lo largo de un tramo de canal.
- 1.2 Esquematación de la descarga de un efluente en un río.
- 1.3 Función de Ackley en 2D.
- 2.1 Estuario del Río San Juan.
- 2.2 Propagación de la onda de marea.
- 2.3 Relación entre los niveles de marea y las velocidades de corriente. Terminal Petrolero de Caripito. Mareas Vivas.
- 2.4 Hidrograma de caudales y niveles de marea en el Terminal Petrolero de Caripito. Mareas Vivas.
- 2.5 Hidrograma de caudales y niveles de marea Aguas abajo de Punta Marieta. Mareas Vivas.
- 4.1 Operador de cruce basado en un punto.
- 4.2 Operador de mutación.
- 4.3 Función de probabilidad de cruce utilizada en el algoritmo genético.
- 4.4 Función de probabilidad de mutación utilizada en el algoritmo genético.
- 4.5 Función de probabilidad de cruce utilizada en el algoritmo genético.
- 4.6 Función de probabilidad de mutación utilizada en el algoritmo genético.
- 4.7 Función de dos parámetros utilizada para evaluar al algoritmo genético.

- 4.8 Convergencia del método de calibración e influencia del número inicial de individuos.
- 4.9 Convergencia del método de calibración e influencia del número inicial de individuos
- 4.10 Evolución del valor de los parámetros en cada generación.
- 4.11 Evolución del valor de los parámetros en cada generación.
- 4.12 Evolución de la función de aptitud en cada generación.
- 4.13 Función de tres parámetros utilizada para evaluar el algoritmo genético.
- 4.14 Evolución del valor de los parámetros en cada generación.
- 4.15 Evolución del valor de los parámetros en cada generación.
- 4.16 Evolución del valor de los parámetros en cada generación.
- 4.17 Evolución de la función de aptitud en cada generación. Función con tres parámetros.
- 5.1 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 5$ seg, Tiempo 125 seg.
- 5.2 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 5$ seg, Tiempo 250 seg.
- 5.3 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 5$ seg, Tiempo 500 seg.
- 5.4 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 25$ seg, Tiempo 125 seg.
- 5.5 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 25$ seg, Tiempo 250 seg.
- 5.6 Comparación de soluciones analítica y calculada. $Dt= 25$ seg, Tiempo 500 seg.
- 5.7 Velocidades de corriente y variación vertical de salinidad. Sección 66. Caño La Brea.

- 5.8** Velocidades de corriente y variación vertical de salinidad. Sección 25. Caño Guanoco.
- 5.9** Velocidades de corriente y variación vertical de salinidad. Sección 8. Río San Juan (Muelle 3).
- 5.10** Discretización espacial del sistema Hidráulico del Río San Juan y ubicación y tipo de mediciones y condiciones de borde.
- 5.11** Resultados del Algoritmo Genético. Curva de Función de aptitud Vs Coeficiente de dispersión.
- 5.12** Comparación de los datos de salinidad medidos y los calculados para $E = 450 \text{ m}^2/\text{s}$.
- 5.13** Evolución de la población (16 individuos) para cada generación.
- 5.14** Valores de E para cada generación. Caso $Q_{\text{Caripito}} = 200 \text{ m}^3/\text{s}$ y $Q_{\text{Guanoco}} = 50 \text{ m}^3/\text{s}$.

INDICE DE SIMBOLOS

A = Area de flujo.

C = Concentración de una sustancia.

C_l = Concentración lateral de la descarga.

D_b = Oxígeno removido por depósitos bentales.

D_m = Coeficiente de difusión molecular.

E = Coeficiente longitudinal de dispersión.

E_x = Coeficiente de difusión turbulenta en la dirección x.

K = Constante de velocidad de reacción de una sustancia.

K_l = Velocidad de reacción de la DBO carbonácea.

K_3 = Velocidad de remoción del DBO por absorción o sedimentación.

K_2 = Coeficiente de reareación.

M = Momento de área de la sección transversal con respecto a la superficie libre.

M_i = Cantidad de sustancia difundida por unidad de área.

n = Coeficiente de fricción de Manning.

P = Perímetro mojado de la sección transversal.

q_l = Aporte lateral al canal por unidad de longitud.

Q = Caudal.

R = Radio hidráulico de la sección transversal.

S_f = Término de fuente o sumidero.

S_f = Pendiente de fricción.

t = Tiempo.

U^* = Velocidad de corte.

V_x = Componente del vector velocidad en la dirección x .

W = Ancho del canal.

y = Profundidad del flujo.

Γ = Factor de ponderación.

1. INTRODUCCION

1.1 MODELOS NUMERICOS EN HIDRAULICA FLUVIAL

Un modelo matemático es en términos generales una representación de fenómenos naturales extremadamente complejos que permite obtener el valor de las variables que intervienen en el proceso tanto en lo referente a su distribución espacial como a su evolución temporal, basándose en la solución de las ecuaciones descriptivas del fenómeno que se quiera modelar.

El modelo matemático utilizado puede tener simplificaciones en mayor o menor grado, lo cual dependerá de la incorporación al mismo de un mayor o menor número del total de variables que intervienen en el proceso que se quiere simular. Para su desarrollo e implementación se deben identificar en primer lugar las ecuaciones básicas que lo describen, las cuales conforman usualmente un sistema de ecuaciones diferenciales parciales.

Luego de que se han determinado las ecuaciones que describen al fenómeno que se vaya a modelar, se debe implementar un algoritmo de cálculo para obtener la solución del sistema de ecuaciones resultantes, las cuales a su vez pueden ser lineales o no lineales. Esto conlleva a la ejecución de una serie de pruebas numéricas para estudiar la convergencia y estabilidad del modelo para lo cual se utilizan normalmente problemas con soluciones analíticas contra las cuales se puedan comparar los resultados obtenidos con el modelo.

Una vez que se tiene seguridad en lo referente a la convergencia y estabilidad del modelo se procede entonces a calibrarlo de forma tal de que el mismo se ajuste a un sistema físico dado, para lo cual es necesario contar con mediciones reales efectuadas en dicho sistema contra las cuales se pueda comparar la respuesta del modelo.

Logrado esto, el modelo se convierte en una herramienta de trabajo muy útil a la hora de predecir los efectos que puedan originar cambios en los valores de las distintas variables que intervienen en el sistema.

1.1.1 Modelos de Flujo

Entre los modelos matemáticos utilizados en hidráulica fluvial se pueden distinguir los llamados “modelos de flujo” o modelos hidráulicos, a través de los cuales se trata de caracterizar el comportamiento de un fluido (en este caso el agua) dentro de un sistema fluvial, utilizando para ello las ecuaciones de continuidad y de cantidad de movimiento.

El desarrollo de modelos para estimar el patrón de flujo en ríos se basa en las ecuaciones del flujo con superficie libre. Dichas ecuaciones son la de continuidad y la de cantidad de movimiento (ecuaciones de Saint Venant) estudiadas y conocidas desde hace muchos años y cuya solución completa, salvo algunos casos simples, tiene que ser encontrada por métodos numéricos.

La complejidad de las ecuaciones condujo en el pasado a muchos investigadores a trabajar con formas simplificadas de las mismas, ignorándose en muchos casos algunos de los términos de dichas ecuaciones (Wormleaton *et al.* 1984).

En el presente, con el auge de las computadoras, la solución completa de éstas ecuaciones ha alcanzado un gran desarrollo permitiendo con ello una determinación muy confiable del patrón de flujo, siempre y cuando se tenga a la disposición una información básica confiable. En la literatura especializada están descritos numerosos modelos unidimensionales y bidimensionales tanto de flujo como de sedimentos y contaminantes en cuerpos de agua, los cuales se basan en técnicas numéricas para la solución de las ecuaciones de flujo no permanente y transporte de sedimentos en canales abiertos.

Los fundamentos y aplicación de modelos de hidráulica fluvial basados en las ecuaciones de Saint Venant pueden encontrarse, por ejemplo, en “*Practical aspects of computational river hydraulics*”(Cunge *et al.* 1980).

1.1.2 Modelos de Transporte y calidad

Otros tipos de fenómenos son simulados mediante los llamados “modelos de transporte”, los cuales toman en cuenta el transporte de masa de una sustancia en el sistema estudiado a través de la resolución de la ecuación de convección-difusión, y dentro de éstos se encuentran los llamados “modelos de calidad del agua”.

Los modelos de calidad del agua para régimen permanente en ríos y estuarios son en la actualidad muy utilizados y tradicionalmente se basan en extensiones de las ecuaciones de Streeter-Phelps para la predicción de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) de varios componentes biodegradables, así como las concentraciones resultantes de oxígeno disuelto (OD) en ríos.

Las diferencias entre los modelos matemáticos existentes para calidad del agua se basan en las siguientes condiciones:

- 1) Dimensión del modelo (una, dos o tres dimensiones).
- 2) Tipo de flujo (permanente o no).
- 3) Tipos de fuente o sumidero y el tipo de sustancias a simular (conservativas o no).
- 4) Métodos numéricos que en realidad no representan una clasificación del modelo en sí, sino de técnicas de solución.

1.1.3 Técnicas de Solución

Las técnicas de solución tienen un papel importantísimo en el desarrollo de los modelos. Los métodos de solución van desde el cálculo manual y utilización de gráficos y nomogramas hasta métodos de optimización y simulación de alta complejidad para los cuales es imprescindible la utilización de computadoras.

En las últimas décadas, con el auge en la utilización de equipos de computación digital rápidos, poderosos y de bajo costo, los métodos numéricos han pasado a representar un medio natural para obtener soluciones rápidas y precisas.

Las ecuaciones de un modelo forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que representan las propiedades de almacenamiento y transporte. Las técnicas de solución de dichas ecuaciones pueden basarse en soluciones analíticas, o en métodos de solución numérica aproximada, tales como el de diferencias finitas o el de elementos finitos y más recientemente a través del uso de las técnicas de ecuaciones integrales para la solución de las ecuaciones de flujo y dispersión.

A continuación procederemos a describir brevemente dichas técnicas de solución.

Método de Diferencias Finitas: Utilizado tradicionalmente en la resolución de ecuaciones de flujo y calidad del agua. Su amplia difusión se debe principalmente a su simplicidad conceptual y a la facilidad para programarlo en un computador, ya que las ecuaciones diferenciales se transforman directamente en ecuaciones aproximadas de diferencias finitas. En general los pasos que se deben seguir para la obtención de la solución numérica son: (1) Selección de un método de diferencias finitas adecuado para el tipo de ecuaciones que se pretenda resolver; (2) Discretización de dichas ecuaciones diferenciales; (3) Resolución del sistema de ecuaciones obtenido.

La aplicación clásica del método de diferencias finitas a la solución de un problema de derivadas parciales en dos dimensiones involucra la discretización del dominio de cálculo mediante una malla de celdas cuadradas o rectangular de dimensiones fijas, por lo cual, si se quiere refinar dicha malla para mejorar la representación del dominio físico se deben aumentar los puntos o nodos de cálculo y en consecuencia se necesita más memoria y mayor tiempo de computación, lo cual puede llegar a representar una limitación de cierta importancia si la geometría del problema estudiado es muy irregular, en cuyo caso sería preferible la utilización del método de elementos finitos.

Por último, debe destacarse que en general no se dispone de métodos exactos para estudiar la convergencia de esquemas de diferencias finitas, razón por la cual se necesita realizar experimentos numéricos para con ello determinar las condiciones bajo las cuales un esquema puede garantizar una mejor simulación de las condiciones reales de un flujo.

Método de Elementos Finitos: Si el dominio físico es geoméricamente irregular es preferible utilizar, por las causas referidas en el párrafo anterior, el Método de Elementos Finitos antes que el de Diferencias Finitas. En contraposición con los esquemas de diferencias finitas en los cuales el dominio de interés es sustituido por un conjunto de puntos discretos, en este método el dominio se subdivide en segmentos o subdominios a los cuales se refiere el término elementos el cual puede tener una forma arbitraria y sobre el cual se efectúan directamente todos los balances.

Una virtud esencial del método de elementos finitos es que, a diferencia del método de diferencias finitas, permite una discretización muy flexible de forma que puede reducirse notablemente el número de elementos necesarios para una representación adecuada del fenómeno estudiado.

Método de Elementos de Frontera: El método de elementos de frontera (BEM) es un método numérico para la solución de las ecuaciones integrales de frontera basado en un procedimiento de discretización, el cual es en cierta manera similar al método de elementos finitos, pero se efectúa solamente sobre el contorno del problema. En general, se expresa el problema mediante una ecuación integral equivalente a la ecuación diferencial parcial que se desea resolver por medio de la representación de Green correspondiente (método directo).

Existe en la actualidad un gran interés en la investigación de métodos de frontera ya que al obtener la solución numérica por un método de integral de frontera no se necesita construir una malla sobre dicho dominio sino solamente sobre el contorno, pudiéndose de ésta forma disminuir el esfuerzo computacional a través de una reducción de la dimensionalidad, pero con la desventaja del costo computacional de evaluar las integrales de frontera sobre dicho contorno.

El BEM se ha extendido hoy en día a muchas áreas del análisis en ingeniería, en particular ha sido aplicado al flujo en medio poroso con superficie libre por Liggett (1977), siendo también muy utilizado para simulaciones tridimensionales de flujo potencial y en modelos de transporte con métodos muy sofisticados, no siendo muy ventajoso su uso en modelos unidimensionales de superficie libre o de transporte.

En este trabajo se utilizó un modelo unidimensional de diferencias finitas ya que el objetivo principal del mismo no se centra en particular en el tipo de técnica de solución del modelo (diferencias finitas, elementos finitos o elementos de frontera) sino en el desarrollo y evaluación de la rutina de calibración de dicho modelo.

1.2 MODELOS DE CALIDAD DEL AGUA

El proceso global del modelaje de la calidad del agua es muy amplio, y aunque algunos aspectos del mismo pueden ser considerados independientes por completo del modelaje del flujo no permanente en canales abiertos, existe un factor que enlaza ambas disciplinas; el transporte de las sustancias disueltas o suspendidas. Una explicación amplia y detallada de esto se encuentra en Cunge *et al.*, 1980.

El transporte de masa en el medio ambiente es ocasionado tanto por los procesos de dispersión, como por los procesos de convección y difusión, entendiéndose por transporte al proceso hidrodinámico de dispersión, es decir, la interacción entre la convección diferencial y la difusión turbulenta, ya que ambas dependen del campo de velocidades que tenga el flujo.

Los contaminantes y efluentes, cuando se descargan en un curso de agua, se mezclan con el flujo de agua y son transportados aguas abajo, siendo entonces el efluente dispersado longitudinalmente, transversalmente y verticalmente por los procesos de transporte convectivos y dispersivos (Loucks *et al.* 1981). Luego de que la mezcla en la sección transversal está completa, el mecanismo más importante es el proceso de dispersión longitudinal, tendiente a eliminar el gradiente de concentraciones longitudinales (Fischer 1979).

El transporte convectivo domina en la mayoría de los ríos, mientras que la dispersión domina en estuarios sujetos a la oscilación de los niveles de la superficie libre por acción de las mareas.

En aquellos cauces donde se presentan velocidades altas, la convección es el proceso dominante siendo la difusión despreciable frente a la primera, mientras que en aquellos estuarios donde las velocidades son usualmente bajas, tanto la dispersión como la difusión deben ser examinadas con detenimiento.

1.2.1 Ecuación de Convección-Difusión.

El fenómeno de difusión molecular, en el cual unas “moléculas marcadas” de un fluido se van a difundir en otro fluido “neutral”, se realiza de acuerdo a la primera ley de estado de Fick (1855) quien expresó por primera vez en términos cuantitativos el esparcimiento de sustancias así como el movimiento aleatorio de las moléculas. Para ello, hizo una analogía entre este proceso y la transferencia de calor por conducción, la cual también se debe al movimiento aleatorio de las moléculas. Para representar matemáticamente este fenómeno, adaptó la ecuación matemática de conducción de calor desarrollada anteriormente por Fourier (1822) para expresar la cantidad de sustancia difundida a través de una sección de área unitaria.

De acuerdo con Fick la variación del transporte de masa en una dirección i , es proporcional al gradiente de la concentración en esa dirección, es decir;

$$M_i = -D_m \frac{\partial C}{\partial i} \quad (1.1)$$

Donde M_i es la cantidad de sustancia difundida por unidad de área de una sección por unidad de tiempo, C es la concentración de la sustancia difundida, i es la distancia medida normal a la sección y D_m es el coeficiente de difusión molecular. El signo (-) obedece al hecho de que la concentración de la sustancia que se difunde decrece en el sentido en que ocurre la transferencia de la sustancia.

El proceso de difusión molecular juega un papel importante en la difusión de contaminantes cuando el flujo es laminar, pero en el caso de que el flujo sea turbulento su efecto es despreciable en comparación con el “proceso de difusión turbulento”

En efecto, si se libera un número pequeño de partículas de alguna sustancia flotante, neutra, en un punto “P”, se puede notar que a una distancia aguas abajo del punto “P”, las partículas se habrán dispersado por completo una de la otra, siempre y cuando el flujo sea turbulento. Este es el “proceso de difusión turbulento”, donde cada porción individual de fluido está sujeta a fluctuaciones aleatorias del vector velocidad, tanto en magnitud como en sentido, razón por la cual

su ruta o las rutas de varias partículas que salen del mismo punto, varían alrededor del campo de flujo.

Usando la ecuación (1.1) para tomar en cuenta la variación en un elemento volumétrico, el proceso de difusión a través de dicho elemento se puede representar mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_m \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (1.2)$$

Por otro lado la convección de la concentración de un elemento, es el transporte que resulta del gradiente del flujo de masa de la sustancia, pudiendo describirse este proceso mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z C)}{\partial z} = 0 \quad (1.3)$$

Donde C es la concentración del elemento y v_x , v_y y v_z son las componentes del vector velocidad en las direcciones x , y , z respectivamente. El primer término de la ecuación toma en cuenta la variación temporal de la concentración mientras que los otros términos toman en cuenta la variación espacial de la misma.

En base a las ecuaciones (1.2) y (1.3) se tiene que la ecuación de transporte tridimensional viene dada entonces por la siguiente expresión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z C)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(e_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(e_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(e_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (1.4)$$

Donde e_x , e_y y e_z son los coeficientes de difusión turbulenta (Tucci 1978)

La forma unidimensional de esta ecuación fue desarrollada por Holley y Harleman (1965). Integrando sobre la sección transversal se promedia la velocidad longitudinal, la concentración y el coeficiente de difusividad turbulenta obteniéndose la ecuación de transporte unidimensional para flujo no permanente de una sustancia no conservativa, la cual queda representada de la siguiente manera:

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(QC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S_i \quad (1.5)$$

Donde E es el coeficiente longitudinal de dispersión el cual evalúa la distribución no uniforme de la velocidad (dispersión) así como el valor principal de la difusividad turbulenta.

En la ecuación (1.5) los términos del lado izquierdo de la ecuación toman en cuenta los efectos convectivos, mientras que el primer término del lado derecho toma en cuenta los efectos de la dispersión.

Igualmente se tiene que el término S_i conocido como término "*fuentes*" o "*sumideros*" toma en cuenta las "ganancias" o "pérdidas" del sistema.

En la figura 1.1 se muestra un esquema de la variación espacial de los términos de convección y dispersión a lo largo de un tramo de canal.

1.3 TERMINOS DE FUENTE Y SUMIDERO

Se dice que una sustancia es conservativa cuando su concentración no cambia debido a reacciones biológicas o químicas, y no conservativas a aquellas que sí experimentan cambios en su concentración a lo largo del tiempo. La sal y otros cloruros son ejemplos de sustancias conservativas, mientras que la Demanda Bioquímica de Oxígeno es un ejemplo de una no conservativa.

Para sustancias conservativas el término de “fuente” o “sumidero” se expresa de la siguiente forma:

$$S_l = q_l \cdot C_l \quad (1.6)$$

Donde q_l es la descarga por unidad de longitud ($m^3/m.s$), bien sea entrando o saliendo al sistema considerado, y C_l es la concentración de la sustancia en esta descarga (mg/l).

Un sistema hidráulico de ríos interconectados o un simple canal recto, pueden tener fuentes internas y externas de polución, las cuales pueden a su vez ser difusas o puntuales. Las fuentes puntuales son aquellas descargas cuyo flujo es transportado en un canal bien definido. Ejemplos típicos son las descargas municipales e industriales de aguas negras, descargas de alcantarillas que transportan aguas de lluvia, etc. Por otro lado las fuentes difusas o fuentes no puntuales tienen descargas extendidas lateralmente donde el flujo total de la descarga no puede ser medido o monitoreado directamente con observaciones en un punto.

Los cambios que afectan la calidad del medio pueden ser provocados intencionalmente (cuando las descargas con contaminantes son autorizadas) o pueden ser sin intención (cuando se altera el drenaje natural de un área), pudiéndose clasificar éstas últimas de acuerdo a la forma en que los poluentes son introducidos en el medio acuático y por la actividad o procesos que generan dichas descargas.

Los procesos mediante el cual estas descargas contaminan pueden ser discretos o puede extenderse dispersivamente sobre el cuerpo receptor. Hasta aquí, la diferencia esencial entre descargas puntuales y difusas (independientemente del mecanismo de polución) es la capacidad de remover el contaminante del primero.

Esto contrasta con los métodos de control disponibles para fuentes difusas las cuales solamente pueden ser reguladas mediante el control de la actividad que la genera, ya que si no es controlada puede elevar los niveles de contaminación.

En base a lo anterior las fuentes de polución se pueden clasificar como sigue:

1) Fuentes capaces de ser controladas en un punto (Fuentes Puntuales).

- Desechos domésticos.
- Desechos industriales, los cuales pueden orgánicos, inorgánicos, calóricos y sustancias radioactivas.
- Desechos superficiales provenientes de área impermeables, tales como aeropuertos, zonas industriales, etc.
- Sustancias radioactivas.
- Desechos provenientes de áreas con drenajes, entre las cuales se pueden mencionar; sitios donde se esté ejecutando alguna construcción, minas, canteras, etc.
- Agua de escorrentía proveniente de sitios tales como botaderos de basura.
- Agua de escorrentía utilizada en actividades mineras.
- Descargas ilegales (las cuales están teóricamente controladas mediante leyes, y que además deben ser continuamente monitoreadas).

2) Fuentes difusas.

- Acuíferos y drenajes naturales contaminados.
- Materia dispersa debido a la turbulencia generada por actividades navieras, las cuales ocasionan la resuspensión de material.
- Lluvias ácidas.

La extensión de cualquiera de éstas fuentes y su capacidad de contaminar, depende de la naturaleza del cuerpo receptor. Areas rurales con población dispersa y suelos pobremente cultivados poseen ríos limpios y la contaminación que allí se presenta es probablemente causada por fuentes difusas, mientras que las áreas urbanas con una densidad poblacional alta, tienen ríos contaminados donde las fuentes de polución son generalmente puntuales.

En general, la calidad del agua de un cuerpo se determina a través del análisis de sustancias escogidas de acuerdo a los objetivos del estudio que se esté haciendo de las fuentes de polución.

Algunos de los parámetros estudiados incluyen la temperatura, salinidad, cloruros, oxígeno disuelto, demanda bioquímica de oxígeno, formas nitrogenadas y concentración de coliformes.

1.3.1 Cinética Química.

La cinética química se refiere a la rapidez o velocidad de las reacciones. Muchas reacciones son propias de la biotransformación, crecimiento y muerte de microbios, aireación, desintegración por la radiactividad, desinfección, etc (Sawyer *et al.* 2000) y tienen velocidades que a una temperatura dada son proporcionales a la concentración de uno, dos, ó más reactivos, elevadas a una pequeña potencia integral.

En general, las reacciones de primer orden son las más comunes, aunque existen reacciones de otros órdenes o de una naturaleza más compleja.

A continuación se describirán muy brevemente los tipos de reacciones antes mencionadas.

Reacciones de orden cero: Son aquellas donde la velocidad de reacción es independiente de la concentración. Matemáticamente se representan mediante ecuaciones del tipo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = k \quad (1.7)$$

donde C es la concentración del reactivo y k es la constante de velocidad en unidades de concentración/tiempo. Ejemplos de este tipo de reacciones son la oxidación del amoníaco a nitrito y la oxidación de la glucosa por bacterias aeróbicas.

Reacciones de primer orden: En este tipo de reacciones la tasa de desintegración es directamente proporcional a la cantidad del material que no se ha desintegrado. El ejemplo más directo de este tipo de reacciones es la desintegración de un elemento radiactivo, así como la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO).

Matemáticamente se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\square \frac{\partial C}{\partial t} = KC \quad (1.8)$$

Si se integra la ecuación (1.8) se obtiene la siguiente ecuación:

$$C = C_0 * 10^{-KT} \quad (1.9)$$

Reacciones de segundo orden: Son aquellas en las que la velocidad de reacción es proporcional al cuadrado de la concentración de uno de los reactivos, o al producto de la concentración de dos reactivos diferentes, y matemáticamente pueden ser expresadas por una ecuación del tipo:

$$\square \frac{\partial C_a}{\partial t} = K_a C a^2 \quad (1.10)$$

1.4 SUSTANCIAS CONSERVATIVAS Y NO CONSERVATIVAS

Las sustancias que se van a analizar a través de un modelo de calidad del agua pueden ser clasificadas como conservativas y no conservativas.

Tal como se mencionó en el aparte 1.3, una sustancia se dice que es conservativa cuando su concentración no cambia debido a reacciones biológicas o químicas. La sal y otros cloruros son ejemplos de sustancias conservativas, teniéndose por otro lado que las sustancias no conservativas presentes en un cuerpo de agua pueden tener reacciones químicas o biológicas modificando así su concentración (ver aparte 1.3.1). Por lo general, algunas de estas sustancias tales como la Demanda Bioquímica de Oxígeno son simuladas mediante reacciones de primer orden.

Referente a las sustancias no conservativas, se puede afirmar que en descargas contaminadas pueden existir componentes nitrogenosos y carbonosos los cuales se oxidan bioquímicamente a velocidades diferentes, siendo usualmente representados los procesos carbonosos mediante reacciones de descomposición de primer orden, mientras que la demanda nitrogenada se debe a la oxidación del amonio en nitratos debido a la nitrificación por las bacterias.

Así como la ecuación (1.6) expresa matemáticamente a una sustancia conservativa, a continuación se presentan, sólo como referencia, los términos de fuente y sumidero utilizados para representar sustancias no conservativas tales como: la demanda bioquímica de oxígeno y el oxígeno disuelto, cuyas concentraciones son factores importantes en la evaluación y manejo de la calidad del agua una vez que las aguas contaminadas y sin tratar son descargadas a lo largo del cuerpo de agua, lo cual ocasiona que el equilibrio químico, biológico y físico de sus componentes se vea alterado.

El término fuente y sumidero utilizado para representar a la demanda bioquímica de oxígeno, está dado por la siguiente expresión:

$$S_i = \square(K_1 + K_3)AC + L_a + q_l C_l \quad (1.11)$$

Donde K_1 es la velocidad de reacción de la DBO carbononácea (por día), K_3 es el coeficiente de la velocidad de remoción del DBO por absorción o sedimentación (por día), L_a es la velocidad de adición de DBO a lo largo de un tramo (partes por millón al día, ppm/día), q_l es la descarga lateral (m²/s), A es el área de la sección transversal (m²) y C_l es la concentración de DBO en el flujo lateral (ppm).

La ecuación diferencial parcial con la que se representa la concentración de DBO es:

$$\frac{\partial(AC_{DBO})}{\partial t} + \frac{\partial(QC_{DBO})}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (EA \frac{\partial C_{DBO}}{\partial x}) \square (K_1 + K_3)AC_{DBO} + AL_a + q_l C_{l(DBO)} \quad (1.12)$$

Por otro lado se tiene que el término fuente y sumidero utilizado para representar al oxígeno disuelto es el siguiente:

$$S_i = \square K_1 AC_{DBO} + K_2 A(C_s \square C_{OD}) \square D_b A + q_l C_{l(OD)} \quad (1.13)$$

Donde C_{DBO} es la concentración de la Demanda Bioquímica de Oxígeno (ppm) de la demanda bioquímica de oxígeno, K_2 es el coeficiente de reareación (por día), C_s es la concentración de saturación del oxígeno disuelto (ppm) y D_B es el oxígeno removido por depósitos bentales, y el incremento del oxígeno a través de la fotosíntesis y respiración de las plantas (ppm/día).

La ecuación diferencial parcial con la que se representa el oxígeno disuelto (OD) es:

$$\frac{\partial(AC_{OD})}{\partial t} + \frac{\partial(QC_{OD})}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (EA \frac{\partial C_{OD}}{\partial x}) \square K_1 AC_{BOD} + K_2 A(C_s \square C_{OD}) \square D_B A + q_l C_{l(OD)} \quad (1.14)$$

La parte de este trabajo que involucra la simulación del transporte de sustancias, se limitará al tratamiento de sustancias conservativas por lo que en caso de que existan términos de fuente o

sumidero en el sistema considerado, los mismos se evaluarán a través de una ecuación del tipo presentado en (1.6).

1.5 ESTIMACION DE LOS VALORES DEL COEFICIENTE DE DISPERSION.

Cuando los contaminantes y efluentes son descargados en un río, se mezclan con el flujo de agua y son transportados aguas abajo, siendo entonces el efluente dispersado longitudinal, transversal y verticalmente por procesos de transporte convectivos y dispersivos.

Considérese que un efluente es descargado en un río tal como se muestra en forma esquemática en la figura 1.2. El proceso de mezcla del efluente en el río puede dividirse en tres (3) etapas:

- Una primera etapa donde la cantidad de movimiento inicial y la vivacidad de la descarga determina un porcentaje de dilución.
- Una vez que se disipan los efectos del impulso inicial, se comienza una segunda etapa en la cual el desecho se mezcla transversalmente en el canal receptor debido a la turbulencia.
- Finalmente, cuando el desecho está totalmente mezclado a lo largo del canal, el proceso de dispersión longitudinal tiende a eliminar las variaciones longitudinales de concentración. En ésta última etapa es en la cual se podría aplicar el análisis de dispersión longitudinal en tuberías de Taylor y se podría encontrar que hay un análisis equivalente para dispersión longitudinal en ríos.

En base a lo anterior, se puede decir que el coeficiente de dispersión longitudinal es el resultado de los efectos de la distribución no uniforme de velocidades y de la concentración a lo largo de la sección transversal, así como del efecto de la difusividad turbulenta, siendo el primer efecto el más importante.

En términos generales, cuando un poluente entra a un río, el proceso convectivo es inicialmente el que tiene más influencia y la nube del contaminante presenta inicialmente una forma similar al perfil de velocidades.

Todo esto trae como consecuencia que cuando se utiliza un modelo de dispersión longitudinal para predecir la variación de concentración de poluentes en canales naturales, la selección de un coeficiente de dispersión apropiado es lo más importante y a la vez es la tarea más difícil ya que

normalmente en ríos, donde las características de mezcla y de dispersión son desconocidas, el coeficiente de dispersión sólo puede ser estimado usando ecuaciones teóricas o empíricas.

En otras palabras, el poder calibrar el modelo mediante la selección apropiada de los valores del coeficiente de dispersión longitudinal, no es tarea fácil, por lo que encontrar el camino más expedito para lograr dicha calibración es imprescindible (ver aparte 1.6).

Dado el hecho de que el principal problema durante el proceso de calibración de un modelo de transporte es la obtención de un coeficiente de dispersión adecuado, los trabajos de investigación se han centrado desde hace tiempo en tratar de obtener fórmulas o relaciones matemáticas para la evaluación de dicho coeficiente.

Para que se tenga una idea de lo variable que puede ser el coeficiente de dispersión longitudinal en los diferentes sistemas fluviales, Won y Tae Sung (1998) presentan una tabla donde se resumen datos de mediciones hidráulicas y de dispersión en 26 ríos de los Estados Unidos de Norteamérica, y en la misma puede apreciarse que los valores del coeficiente de dispersión longitudinal varían entre 1,90 y 1486 m²/s.

Los conceptos básicos para los modelos unidimensionales de transporte fueron elaborados por Taylor (1954) siendo la ecuación unidimensional de dispersión derivada por Taylor ampliamente utilizada, obteniéndose resultados razonablemente buenos en cuanto a la variación de la dispersión longitudinal se refiere. Esta ecuación de dispersión unidimensional es:

$$\frac{\partial (AC)}{\partial t} = \square \frac{\partial}{\partial x} (UAC) + \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (1.15)$$

donde A es el área de la sección transversal, C es el promedio de la concentración en la sección transversal, U es la velocidad promedio en la sección transversal, K es el coeficiente de dispersión, t es el tiempo y x es la dirección principal del flujo.

Existen soluciones analíticas de la ecuación (1.15) que se pueden obtener si se tienen las condiciones iniciales y de borde, y además se asume que el flujo del río es uniforme y el coeficiente de dispersión es constante. Sin embargo, y debido a las suposiciones hechas, el uso de esta ecuación se limita a las localizaciones cercanas a la fuente, donde se logra el balance entre advección y difusión asumido por Taylor.

Normalmente el coeficiente de dispersión longitudinal depende de la profundidad del agua, de la forma de la sección transversal, de la rugosidad, y de la velocidad principal. Taylor (1954) en sus estudios del coeficiente longitudinal de dispersión, asumiendo una versión para flujo permanente de la ecuación (1.5) en una tubería larga y recta obtuvo la siguiente expresión:

$$E = 10,1aU^* \quad (1.16)$$

donde a es el radio de la tubería, U^* es la velocidad de corte y E es el coeficiente de dispersión.

Elder (1959) estudió el método de Taylor para flujo uniforme en un canal abierto de ancho infinito. Elder formuló una ecuación y asumió una distribución logarítmica de velocidades en la dirección vertical así como que los coeficientes de mezcla para la transferencia de masa y *momentum* en la dirección vertical son los mismos. La ecuación hallada por Elder es la siguiente:

$$E = 5,93yU^* \quad (1.17)$$

siendo y la profundidad del flujo.

Esta ecuación ha sido ampliamente utilizada debido a su simplicidad y al fuerte soporte teórico que tiene. Sin embargo, se ha dicho que esta ecuación no puede describir apropiadamente la dispersión en cauces naturales (Fischer 1979).

Fischer (1966,1968) mostró que la ecuación de Elder subestima la dispersión natural en cauces naturales debido a que no considera la variación transversal del perfil de velocidades a través del

río. A su vez Fischer postuló que en la mayoría de los ríos naturales, el perfil transversal de la velocidad es mucho más importante que el perfil vertical en cuanto a la generación de dispersión longitudinal.

Usando el perfil lateral de velocidades en lugar del perfil vertical, Fischer (1966,1968) obtuvo una relación integral para el coeficiente de dispersión en ríos naturales cuya relación ancho-profundidad es alta. Dicha expresión es la siguiente:

$$K = \frac{1}{A} \int_0^w \int_0^y \frac{1}{E_t h} \int_0^y u' dy dy \quad (1.18)$$

en la cual $h=h(y)$, u' es la desviación de la velocidad con respecto al promedio en la sección transversal, w es el ancho del canal, y = coordenada en la dirección lateral y E_t es el coeficiente transversal de difusión turbulenta

Fischer (1969) estudió el coeficiente de dispersión para flujo oscilatorio en una región de densidad constante de un estuario, y concluyó que el tiempo de mezcla transversal fue mucho más grande que el tiempo de mezcla vertical.

Harleman (1971) desarrolló una ecuación modificada de la ecuación de Taylor usando la relación entre el esfuerzo cortante y el coeficiente de resistencia. Dicha ecuación es la siguiente:

$$E = 77nvR^{5/6} \quad (1.19)$$

donde E está expresado en pies^2/s , n es el coeficiente de rugosidad de Manning, v es la velocidad y R es el radio hidráulico en pies.

Sooky (1969) estudió los efectos de la forma de la sección transversal y de la distribución de velocidades. Asumiendo un perfil de velocidades logarítmicas y una función del tipo potencial para el perfil de velocidades, Sooky desarrolló unas ecuaciones de dispersión longitudinal

adimensionales, las cuales eran función de la relación ancho/profundidad para un flujo uniforme en canales abiertos rectos los cuales tenían secciones triangulares y circulares. Por medio del análisis de los datos de campo de Godfrey y Frederick (1970), Sooky (1969) mostró que el coeficiente de dispersión adimensional aumentaba a medida que la relación ancho/radio hidráulico aumentaba. El trabajo de Sooky no describe adecuadamente la dispersión en cauces naturales debido a que la ecuación que desarrolló fue derivada asumiendo un canal de sección uniforme.

Bansal (1971) revisó y juntó todas las ecuaciones empíricas y teóricas que calculaban el coeficiente de dispersión . Usando los datos de dispersión obtenidos por el U.S Geological Survey, demostró que los coeficientes de dispersión adimensionales, aumentaban cuando la relación ancho/radio hidráulico aumenta.

McQuivey y Keefer (1974) presentaron un método basado en una analogía de la versión lineal de la ecuación de momento y la ecuación lineal de dispersión. La ecuación de momento fue linealizada usando un flujo permanente de descarga (Q_o) y las relaciones físicas características es decir, ancho, pendiente de la línea de energía y el número de Froude. De esta analogía resultó la siguiente relación lineal entre el coeficiente de dispersión y otros parámetros:

$$E = 0,058 \frac{Q_o}{S_o W_o} \quad (1.20)$$

Esta ecuación puede ser usada cuando el número de Froude (F) sea menor de 0,5 y tiene un error estándar estimado del 30% de acuerdo con los resultados de un estudio que comparó diferentes condiciones en 18 ríos.

Aunque el método propuesto por McQuivey y Keefer (1974) es simple, Fischer (1975) sugirió que la ecuación desarrollada por ellos carecía de fundamentos analíticos, puesto que deberían esperarse grandes diferencias entre el mecanismo de dispersión de la onda de flujo y el del contaminante disuelto.

Liu (1977) desarrolló una ecuación para el coeficiente de dispersión utilizando la ecuación de Fischer (1.18) y tomando en cuenta la influencia que el gradiente lateral de velocidades tiene en la dispersión que se presenta en cauces naturales. Dicha ecuación es:

$$K = \frac{\alpha U^2 W^2}{h U_*} \quad (1.21)$$

y en la misma, α es un parámetro que es función de la forma de la sección transversal del canal así como de la distribución de velocidades a través del río.

Liu sugirió que el parámetro α se puede determinar considerando la sinuosidad del río así como los cambios en el ancho de las secciones transversales (contracciones y expansiones) que se presenten en el río.

Ajustando por mínimos cuadrados los datos de campo obtenidos por Godfrey y Frederick (1970) y otros, Liu dedujo la siguiente expresión para el coeficiente α :

$$\alpha = 0,18 \left(\frac{U_*}{U} \right)^{1,5} \quad (1.22)$$

Chatwin y Sullivan (1982) investigaron los efectos de la relación ancho/profundidad en el coeficiente de dispersión en canales donde la sección transversal es aproximadamente rectangular y determinaron analíticamente el coeficiente de dispersión para flujo laminar, expandiéndolo luego para flujo turbulento en canales de fondo plano y altas relaciones de ancho/profundidad. Sin embargo en la práctica es dificultoso usar este método para predecir el coeficiente de dispersión debido a la detallada información que se necesita del perfil de velocidades y de la geometría de la sección transversal para poder calcular el coeficiente de dispersión.

Iwasa y Aya (1991) analizando en el laboratorio los datos de campo previamente recolectados por Nordin y Sabol (1974) y otros, desarrollaron una ecuación para predecir el coeficiente de dispersión en canales y ríos naturales, la cual es:

$$\frac{K}{h u_*} = 2,0 \left(\frac{W}{h} \right)^{1,5} \quad (1.23)$$

Sin embargo, debido a que los canales naturales son sinuosos, presentan contracciones y expansiones y zonas de aguas estancadas a lo largo de su cauce, el coeficiente de dispersión obtenido tiende a aumentar si se compara con el de un canal abierto recto.

Won y Tae Sung (1998) utilizando el método de Huber realizaron una regresión múltiple no lineal para predecir coeficientes de dispersión adimensionales como función del factor de fricción y la relación entre el ancho y la profundidad. Ellos compararon los resultados obtenidos con ecuaciones anteriormente desarrolladas y concluyeron que los valores obtenidos mediante esta nueva ecuación reproducían con mayor exactitud los datos de campo. Dicha ecuación es la siguiente:

$$\frac{K}{hU_*} = 5,915 \left(\frac{W}{h}\right)^{0,620} \left(\frac{U}{U_*}\right)^{1,428} \quad (1.24)$$

Una complicación adicional resulta de la solución numérica de muchas de éstas ecuaciones ya que los errores en el cálculo numérico, producto de la discretización de las derivadas parciales, pueden crear efectos disipativos y dispersivos en la solución que se obtenga, lo cual hace necesario calibrar el modelo dependiendo de los valores de Δx y Δt .

Además, dada la diversidad de factores presentes en los sistemas naturales, se dificulta la predicción de un coeficiente único de dispersión, para lo cual también se necesita la calibración. Lo anterior sirve de marco para presentar el objetivo básico de este trabajo, que es el de obtener el valor del coeficiente de dispersión que mejor reproduzca un conjunto de datos que se tengan en diferentes localizaciones del sistema fluvial estudiado.

1.6 CALIBRACION

Los problemas que involucran modelaje matemático son clasificados como problemas directos y problemas inversos. En los problemas directos todo acerca del modelo es conocido siendo el objetivo el encontrar una condición final del sistema a partir de un conjunto inicial de datos, mientras que los problemas inversos son clasificados como de identificación, detección y reconstrucción de estados de problemas.

La calibración es un problema inverso asociado con la identificación y es usado para determinar constantes ó parámetros desconocidos en un modelo (Wasantha 1995), lo cual es necesario para que el modelo sea capaz de: primero, reproducir las condiciones observadas en campo, y luego poder predecir condiciones o escenarios futuros.

Para la calibración del modelo se usan uno o más conjuntos de datos tanto de entrada como de salida, modificándose y ajustándose durante el proceso de calibración los parámetros del modelo, de tal forma que se reproduzcan lo más fielmente posible las condiciones reales de calidad del agua medidas en el campo (concentraciones de contaminantes) pudiéndose utilizar, como punto de partida para el ajuste, los valores de las constantes obtenidos a partir de análisis de laboratorio de muestras recolectadas durante campañas de mediciones realizadas y diseñadas para tal fin.

En el proceso de la estimación óptima de los parámetros de un modelo, bien sea de flujo, de transporte, o de calidad del agua, se han utilizado numerosos métodos a fin de “optimizar” dicho proceso tanto en lo referente a la calidad de los parámetros encontrados como al tiempo de cálculo invertido para encontrar los valores de los mismos, en particular, para la calibración de modelos de calidad del agua para ríos se han utilizado numerosos métodos, pasando por una diversidad de aproximaciones de mínimos cuadrados iterativos y recursivos.

Igualmente se han aplicado esquemas de estimación iterativas en los cuales cada punto de prueba corresponde a una simulación del modelo tales como en Shastry et al. (1973), quienes presentan una aplicación de estimación de parámetros no lineal. Beck y Young (1976) efectúan una revisión de metodologías y presentan una identificación sistemática de estructuras de modelos de BOD-

DO aplicando una estimación recursiva basada en el filtro de Kalman extendido. También se han aplicado otros enfoques tales como modelos de autocorrelación (Huck y Farquhar, 1976).

Wood *et al.* (1990) utilizan un sistema experto para la calibración automática de un modelo y para ayudar al usuario en la aplicación del mismo.

Khatibi *et al.* (1997) encontraron que los parámetros de calibración involucrados en las ecuaciones de flujo en canales abiertos normalmente son determinados usando datos que a menudo contienen “ruido Gaussiano”. Estos valores sufren subsecuentemente de errores ocasionados regularmente si ellos son determinados a través de métodos de optimización. Sus investigaciones mostraron que los parámetros identificados podrían ser afectados por factores tales como: errores de la base de datos, función objetivo seleccionada o los sitios de medición.

Se encontró que la selección de la función objetivo propiciaba preferencias impropias, afectando así la identificación de los parámetros.

Wang (1991) utilizó un algoritmo genético para calibrar el modelo de lluvia-escorrentía de Xinanjiang con los datos recolectados en el “*Bird Creek*”.

Duan *et al.* (1992) argumentan que la mayoría de los algoritmos de calibración automática son afectados por cinco problemas clave:

- 1) Múltiples regiones de atracción donde el óptimo local encontrado depende del valor inicial del parámetro utilizado para comenzar el algoritmo.
- 2) Óptimo local mínimo.
- 3) Robustez cuando la superficie analizada contiene puntos con derivadas discontinuas.
- 4) Sensibilidad, donde hay una pobre sensibilidad del modelo a variación de los parámetros en la proximidad de un óptimo e interacción no lineal entre los parámetros.
- 5) Forma, cuando la superficie analizada es no convexa y contiene largas curvas con lomos.

Algoritmos determinísticos tales como el método simplex de *Nelder and Mead* (1965) requieren intervención manual durante las etapas de inicialización y calibración para superar éstos problemas. Esto requiere un buen conocimiento de las características de los modelos conceptuales de lluvia-esorrentía (*Gan and Biftu*, 1996).

1.7 DESARROLLO DEL ALGORITMO GENETICO. GENERALIDADES

Los algoritmos evolutivos, tal como se conocen hoy en día, comenzaron a existir a finales de los años 60 y principios de los 70. Durante este período diversos investigadores comenzaron a trasladar los principios de la evolución a tareas de búsqueda o resolución de problemas provocando el desarrollo paralelo de distintos modelos que permiten una estructuración natural de los algoritmos evolutivos dentro de tres (3) grandes familias:

- Programación Evolutiva: Esta familia de algoritmos tiene su origen en el trabajo de Fogel *et al.* (1966) y ponen especial énfasis en la adaptación de los individuos, más que en la evolución del material genético de éstos. Tradicionalmente éstas técnicas emplean mecanismos de reproducción asexual y técnicas de selección mediante competición directa entre individuos.
- Estrategias de Evolución (ES): Comenzó a desarrollarse en Alemania y su objetivo inicial era servir de herramienta para optimización de parámetros en problemas de ingeniería (Rechenberg,1973) y se caracterizan por el manejo de vectores de números codificados en punto flotante, aunque también existen versiones de las mismas que se aplican a problemas discretos. Al igual que la programación evolutiva, basa su funcionamiento en el empleo de un operador de reproducción asexual o de mutación.
- Algoritmos Genéticos (Ags)

Muy brevemente un algoritmo genético puede definirse como una técnica de búsqueda/optimización “ciega”, heurística e intuitiva basada en los procesos “Darwinianos” de selección natural y “supervivencia del más apto”.

Según Koza (1992) un algoritmo genético “Es un algoritmo matemático altamente paralelo que transforma un conjunto de objetos matemáticos individuales con respecto al tiempo, usando operaciones modeladas de acuerdo al principio Darwiniano de reproducción de “supervivencia del más apto”.

En los últimos años ha habido un gran crecimiento en el desarrollo de procedimientos heurísticos para resolver problemas combinatorios. Esta aseveración se constata al examinar el gran número de artículos en revistas de Investigación Operativa en los que se proponen y estudian métodos heurísticos, al tiempo que también han surgido publicaciones específicas para el estudio y divulgación de dichos procedimientos tales como el *Journal of Heuristics*.

Este auge se debe sin duda a la necesidad de disponer de herramientas que permitan ofrecer soluciones rápidas a problemas reales. Se debe destacar el hecho de que los algoritmos heurísticos por sí solos no garantizan la optimalidad de la solución encontrada, aunque su propósito es encontrar una solución cercana al óptimo en un tiempo razonable. No obstante, la gran cantidad de publicaciones en donde problemas de gran dificultad son resueltos con mucha rapidez, avalan estos métodos.

Dentro de las técnicas heurísticas se pueden encontrar diversos métodos tales como: Métodos Constructivos, de descomposición, de reducción y de búsqueda local.

Tradicionalmente para resolver un problema dado se diseñaba un algoritmo específico que pertenecía a alguno de los métodos enumerados. Hoy en día el interés primordial es el diseño de métodos generales que sirvan para resolver clases o categorías de problemas. Dado que estos métodos generales sirven para construir el diseño de métodos que resuelvan problemas específicos se les ha dado el nombre de Metaheurísticos que son una clase de métodos aproximados que están diseñados para resolver problemas difíciles de optimización combinatoria, en los cuales los heurísticos clásicos no son efectivos ni eficientes.

Los metaheurísticos proporcionan el marco general para la creación de nuevos algoritmos híbridos combinando diferentes conceptos derivados de actividades como: inteligencia artificial, evolución biológica y mecanismos estadísticos (Osman y Kelly 1996).

Entre los procedimientos Metaheurísticos más utilizados están: “Simulated Annealing” que se puede considerar como una simplificación de los Algoritmos Genéticos y cuyo origen está en los procedimientos físicos de solidificación controlada, “Tabú Search” cuya aspiración básica es

encontrar una buena solución de un problema de optimización combinatorio a través del mejoramiento paso a paso de una función objetivo a partir de una solución inicial (no necesariamente una factible), “GRASP” y los algoritmos Genéticos.

El método de Simulated Annealing es una técnica que tiene una significativa atención debido a su conveniencia en la resolución de problemas a gran escala, especialmente aquellos donde el extremo global deseado está oculto en medio de muchos otros. Para efectos prácticos ésta técnica ha resuelto efectivamente el famoso problema del agente viajero (Traveling salesman problem) de encontrar el itinerario más corto para el viajero, el cual debe visitar en un ciclo cada una de las N ciudades y volver a la ciudad de partida. También ha sido utilizado para el diseño de complejos circuitos integrados.

Back y Schwefel (1993) dan una idea de estas técnicas entre las cuales la principal diferencia está en los tipos de mutación, recombinación y selección de operadores.

Hay varios trabajos donde se proponen estrategias de búsqueda que heredan algunos aspectos de diferentes métodos. Un ejemplo de esto es presentado por Fox (1993) donde las técnicas de “Tabu Search” y “Simulated Annealing” son combinados con algoritmos genéticos.

En cuanto a los algoritmos genéticos, que son los que se utilizarán en este trabajo, están basados en la ley de selección natural de Darwin (1859) y la representación digital de ADN, por lo que imitando este proceso, proveen una nueva herramienta en el campo de la información tecnológica para resolver con la ayuda de poderosos computadores complejos problemas de optimización, siendo la evolución de las soluciones generadas hacia valores óptimos del problema, dependiente en buena medida de una adecuada codificación de las mismas.

La mezcla de las propiedades estocásticas de los operadores genéticos junto con una clasificación determinística de aptitud o capacidad de cada candidato individual garantiza diversidad para códigos reales de algoritmos genéticos y ello hace posible escapar a mínimos o máximos locales que es donde los métodos tradicionales fallan, razón por lo que puede ser usado como un poderoso método de búsqueda y optimización.

En nuestro caso particular la calibración del modelo de transporte pasa necesariamente por obtener el valor del coeficiente de dispersión “E” que mejor reproduzca los valores de concentración de la sustancia que se vaya a modelar y que constituye el objetivo básico de este trabajo. Para ello se utilizará la técnica de los “Algoritmos Genéticos” dadas las numerosas ventajas que dicha técnica presenta con respecto a los métodos tradicionalmente utilizados.

Entre dichas ventajas destacan las siguientes:

- a) No trabajan ni necesitan derivadas de las funciones con las cuales se trabaja, por lo cual su desarrollo y eventual convergencia no está sujeta a requerimientos de continuidad de las funciones y de sus derivadas, las cuales en muchos casos no tienen solución analítica, lo que introduce un problema adicional al evaluar la función, que es el encontrar una formulación numérica de dicha derivada.
- b) Los métodos tradicionales convergen con mucha facilidad en óptimos locales, hecho que se minimiza al usar los “Algoritmos Genéticos”.

Para evidenciar este hecho y poner a prueba a la técnica de los Algoritmos Genéticos tómesese como ejemplo la función de Ackley. Se pide buscar el vector que maximiza dicha función la cual está definida según:

$$f(x_1 \dots x_{10}) = e^{\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} \cos(2\pi k_i)} + 20e^{-0.2 \sqrt{\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} x_i^2}} \quad \square e \quad \square 20 \quad (1.25)$$

Se trata de una función definida en el espacio euclídeo de 10 dimensiones, imposible de representar gráficamente. No obstante, una versión simplificada y reducida a 2 dimensiones tendría la siguiente forma:

$$f(x_1, x_2) = e^{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \cos(2\pi k_i)} + 20e^{-0.2 \sqrt{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 x_i^2}} \quad \square e \quad \square 20 \quad (1.26)$$

Si se graficara dicha función (veáse figura 1.3) se observaría que presenta múltiples máximos, sólo uno de los cuales es el máximo global mientras los otros son máximos locales.

Cualquier algoritmo clásico de optimización basado en la búsqueda del máximo gradiente se quedaría atascado en el primer máximo relativo que encontrase, no siendo este el caso si se utilizasen los Algoritmos Genéticos los cuales a diferencia de otros métodos de optimización, trabajan simultáneamente con un conjunto de puntos (individuos), lo cual le permite, manteniendo una población adecuada, reducir la probabilidad de alcanzar un falso óptimo. Es por esto que, frente a problemas donde la función a optimizar no sea lineal, o donde las variables que intervienen en el problema son múltiples, los algoritmos genéticos presentan ventajas frente a métodos como el Simplex, programación dinámica, cuadrática, etc.

- c) El operar de forma simultánea con varias soluciones, en vez de trabajar en forma secuencial como las técnicas tradicionales, permite su implementación en paralelo en varias computadoras con lo cual se pueden “correr” una multiplicidad de casos en mucho menos tiempo. Esto permitiría “desmenuzar” o dividir un programa en pequeños programas o tareas y que éstas sean ejecutadas simultáneamente por varios procesadores, pudiendo de ésta forma disminuirse notablemente el tiempo de ejecución total que le llevaría a un solo procesador poder completar todas las operaciones del programa original.

Sin embargo esto a su vez plantea otros problemas: el primero, es como dividir el programa en tareas que puedan ser ejecutadas simultáneamente. El segundo problema es la necesaria comunicación que en la mayoría de los casos debe haber entre los diferentes procesadores debido a que algunos resultados intermedios tienen que ser intercambiados entre los diferentes procesadores que estén trabajando simultáneamente. Por último está el problema del balance de la carga de trabajo en donde se trata de evitar que un procesador permanezca ocioso o esperando por los resultados de los otros.

- d) El algoritmo genético básico con pequeñas modificaciones (cambios por ejemplo en la función de evaluación de la calidad de cada individuo), puede ser utilizado para casi cualquier problema, a diferencia de los modelos tipo “black box” (caja negra) que no se pueden adaptar a otros métodos de optimización.

- e) Permiten identificar parámetros apropiados de ecuaciones aún cuando las mediciones de campo que se tengan disponibles, tengan errores considerables y las ecuaciones del modelo sean inexactas (Furukawa *et al.* 1997).

Los algoritmos Genéticos pueden tratar con éxito una gran variedad de problemas provenientes de diferentes áreas, incluyendo aquellos en los que otros métodos encuentran dificultades. Si bien no se garantiza que el Algoritmo Genético encuentre la solución óptima del problema, existe evidencia empírica de que se encuentran soluciones de un nivel aceptable, y en un tiempo competitivo con el resto de algoritmos de optimización combinatoria. No obstante, en el caso de que existan técnicas especializadas para resolver un determinado problema, lo más probable es que superen al Algoritmo Genético, tanto en rapidez como en eficacia.

Dado que el algoritmo genético opera con una población en cada iteración, se espera que el método converja de forma tal que al final del proceso la población sea muy similar, y en el infinito se reduzca a un solo individuo. A partir de esto, se desarrolla el teorema de los esquemas que garantiza el decaimiento exponencial de los genes menos aptos con cada nueva generación (Goldberg 1987).

El gran campo de aplicación de los Algoritmos Genéticos se relaciona con aquellos problemas para los cuales no existen técnicas especializadas. Incluso en el caso en que dichas técnicas existan, y funcionen bien, pueden efectuarse mejoras de las mismas, hibridándolas con los Algoritmos Genéticos.

Su uso es cada vez mayor en áreas como la Ingeniería, Economía, problemas sociales, inmunidad de sistemas etc, ya que aunque los métodos determinísticos tradicionales representan poderosas herramientas de trabajo a la hora de resolver problemas de optimización que presenten funciones objetivo suaves, diferenciales y unimodales, existen ocasiones en que es necesario hacer una evaluación de las funciones objetivo, cuando al compararlas con métodos de optimización estocásticos, surgen algunas dificultades al relacionarlas con funciones altamente multimodales o problemas de optimización no convexos.

Así se tiene por ejemplo, que problemas de ingeniería hidráulica como la remediación de aguas subterráneas o la utilización óptima de acuíferos, han sido abordados a través de algoritmos genéticos. En la última década varios métodos de optimización numérica han sido empleados en el diseño de sistemas de remediación. Wagner (1995) hace una extensa recopilación de los métodos de optimización aplicados a problemas de remediación de aguas subterráneas entre los cuales están:

Programación lineal (Atwood and Gorelick 1985), programación no lineal (Gorelick *et al.* 1984, Ahlfeld *et al.* 1988), redes neurales (Ranjithan and Eheart 1993), simulated annealing (Dougherty and Marryott 1991), algoritmos evolucionarios (McKinney and Lin 1996, Yoon y Shoemaker 1999), todas las cuales han probado ser herramientas efectivas para optimizar las acciones y políticas de remediación.

Cheng *et al.* (2000) investigó el problema hidráulico de optimizar el bombeo de pozos de agua salada en acuíferos ubicados en zonas costeras, y para problemas que envuelven bombes múltiples de pozos se utiliza un algoritmo genético para la búsqueda de la solución óptima.

En general, las principales diferencias de los algoritmos genéticos con el resto de los métodos de optimización son:

- a) Se trabaja con parámetros codificados, es decir, no trabajan directamente sobre el dominio de un problema sino en uno transformado.
- b) Conjunto de puntos: A diferencia de otros métodos de optimización trabajan simultáneamente con un conjunto de puntos (individuos) lo cual permite, manteniendo una población adecuada, reducir la probabilidad de alcanzar un falso óptimo.
- c) Se utilizan reglas de transición probabilística que son de naturaleza estocástica no haciéndose uso de información específica del problema como en otros métodos de optimización (búsqueda ciega).

Su mayor ventaja radica en su fuerza y simplicidad, ya que no están limitados por hipótesis restrictivas sobre el espacio de búsqueda (continuidad, existencia de derivadas, unimodalidad) (Périaux *et al.*,1998) además, el mecanismo de evolución y de selección en que se basan, es independiente del problema a resolver; sólo varían la función que descodifica el genotipo en una solución posible y la función que evalúa la calidad de la solución y no exige ningún conocimiento acerca de la manera más idónea de resolver el problema; sólo es necesario la capacidad de evaluar la calidad de una solución, por lo que representan una de las más poderosas alternativas estocásticas.

Los principios básicos de los Algoritmos Genéticos fueron establecidos por Holland (1975) y su descripción puede verse en varios textos como: Goldberg (1989), Davis (1991), Michalewicz (1992), Reeves (1993).

Una buena descripción del Algoritmo Genético Simple o Canónico, puede esquematizarse de la siguiente forma:

Generación de una población inicial

Se computa la función de evaluación de cada individuo (evaluación de la población inicial).

Comienza un proceso que se repite iterativamente hasta el número de generaciones máxima que se halla seleccionado.

BEGIN/*Ciclo Reproductivo*/

Se seleccionan dos individuos de la anterior generación (progenitores) para el cruce (probabilidad de selección proporcional a la función de evaluación del individuo).

Se procede a cruzar con cierta probabilidad los dos individuos previamente seleccionados obteniendo dos descendientes.

Se procede a mutar a los dos descendientes con cierta probabilidad.

Se computa la función de evaluación de los dos descendientes mutados

Se incorporan los dos descendientes mutados en la nueva generación y se evalúa a la nueva población.

Se seleccionan a los sobrevivientes, se evalúa la población y se vuelve a iniciar el ciclo de reproducción.

Como se verá a continuación, se necesita una codificación o representación del problema, que resulte adecuada a la naturaleza del mismo, así como una función de ajuste o adaptación al problema, la cual asigna un número real a cada posible solución codificada.

Durante la ejecución del algoritmo, los padres “más aptos” deben ser seleccionados para la reproducción, los cuales se cruzarán generando dos hijos sobre cada uno de los cuales actuará un operador de mutación. El resultado de la combinación de las anteriores funciones será un conjunto de individuos (posibles soluciones al problema), los cuales en la evolución del Algoritmo Genético formarán parte de la siguiente población.

1.8 OBJETIVOS DEL TRABAJO

Una vez que se ha desarrollado un modelo matemático, bien sea de flujo o de transporte, es necesario determinar en base a la comparación de los datos de campo y los datos aportados por dicho modelo, si constituye o no una buena aproximación del comportamiento observado en la realidad.

El proceso de calibración necesario para lograr esto involucra en algunos casos pruebas de laboratorio, ajuste de curvas por métodos gráficos y aproximaciones basadas en simple inspección de campo, con un alto grado de subjetividad, por lo cual el obtener la mejor representación numérica, utilizando series de datos observados puede resultar laboriosa, poco confiable y costosa.

Es perentorio entonces, en aras de facilitar la implementación y aplicación de dichos modelos, automatizar el proceso de calibración implementando y desarrollando procedimientos de optimización de parámetros.

La optimización de parámetros permite un mejor aprovechamiento de la información presente en los eventos medidos, constituyendo los llamados "Algoritmos Genéticos" una técnica novedosa para tal fin.

En consecuencia, se puede decir que el objetivo básico de este trabajo es;

- a) Desarrollo de un modelo unidimensional de transporte que en conjunto con un modelo de flujo existente permita obtener la distribución espacial y temporal de una sustancia en un sistema estuarino o fluvial interconectado.
- b) Obtener mediante la técnica de los "Algoritmos Genéticos" el valor del coeficiente de dispersión involucrado en la ecuación de convección-difusión, que mejor reproduzca un conjunto de datos.
- c) Desarrollar modificaciones del algoritmo genético básico de forma tal que permitan obtener soluciones rápidas para el problema de calibración.

- d) Verificar la funcionalidad del método utilizando para ello datos que se tienen en diferentes localizaciones distribuidas a lo largo de un sistema fluvial, que en este caso es el estuario del río San Juan.

2. DESCRIPCION DEL MODELO HIDRAULICO

Para el cálculo del transporte de la sustancia que se vaya a considerar, se requiere tener los valores de las velocidades del flujo al igual que las propiedades geométricas de las distintas secciones transversales que se han utilizado para caracterizar el sistema fluvial estudiado. Para lograr esto se requiere la aplicación de un modelo de flujo.

2.1 FORMULACION MATEMATICA

En este trabajo se utilizó un modelo de flujo ya existente, el cual ha sido desarrollado y utilizado anteriormente (Saavedra *et al.*, 2002). Este modelo será aplicado independientemente del modelo de transporte, suponiendo que las concentraciones de la sustancia simulada no afectan las propiedades y características del mismo. El modelo de flujo en cuestión será descrito a continuación en forma resumida.

2.1.1 Hipótesis

Las ecuaciones de flujo no permanente unidimensional en canales abiertos (Ecuaciones de Saint Venant) pueden obtenerse mediante la integración sobre una sección transversal de las ecuaciones tridimensionales de flujo no permanente, es decir, la ecuación de continuidad, la cual considera el balance de masa del fluido y cantidad de movimiento con la cual se toman en cuenta las características dinámicas del flujo, haciendo las siguientes hipótesis y consideraciones:

- La presión a lo largo de la columna de agua considerada es hidrostática, es decir, varía linealmente.
- Las pérdidas de energía debido a los efectos de fricción de los contornos del cauce son representados mediante fórmulas empíricas similares a las usadas en flujo permanente tales como la de Manning o la de Chezy.
- La pendiente promedio del fondo es pequeña y la curvatura de la superficie libre es suave, por lo que el flujo es esencialmente horizontal y presenta variaciones suaves en el tiempo.

2.1.2 Ecuaciones Básicas

El modelo de la onda dinámica para la simulación del tránsito de crecientes en canales abiertos se basa en las ecuaciones de Saint Venant para flujo no permanente gradualmente variado. Si se tiene un canal prismático con contribuciones o salidas laterales y se expresa la conservación de la masa y de la cantidad de movimiento entre dos (2) secciones transversales del canal cuyas coordenadas longitudinales son x_1 y x_2 y entre dos (2) instantes de tiempo t_1 y t_2 , estas ecuaciones tienen la siguiente forma:

Ecuación de Continuidad

$$\int_{x_1}^{x_2} (A_{t_2} - A_{t_1}) dx + \int_{t_1}^{t_2} (Q_{x_2} - Q_{x_1}) dt = q \quad (2.1)$$

Ecuación de Cantidad de Movimiento

$$\int_{x_1}^{x_2} (Q_{t_2} - Q_{t_1}) dx + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{Q^2}{A} + gM \right]_{x_2} - \left[\frac{Q^2}{A} + gM \right]_{x_1} dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} [gA(S_o - S_f) + gU] dx dt \quad (2.2)$$

En las cuales Q es el caudal, A es el área de la sección transversal de flujo, q es el caudal lateral, g es la aceleración de gravedad, S_o es la pendiente del fondo del canal, M es el momento de área de la sección transversal con respecto a la superficie libre, S_f es la pendiente de fricción, x es la distancia a lo largo del canal, t es el tiempo y U es el término no prismático.

2.1.3 Pendiente de Fricción

El término de fuerzas de fricción $\int \rho g A S_f dx dt$ involucra a la pendiente de fricción la cual se calcula a través de la fórmula de Manning de acuerdo a con la siguiente expresión:

$$S_f = \frac{Q|Q| n^2}{R^{4/3} A^2} \quad (2.3)$$

donde n es el coeficiente de fricción de Manning y $R=A/P$, siendo el área A y el perímetro mojado P , expresados como funciones de la profundidad y .

2.2 METODO NUMERICO

2.2.1 Integración en el tiempo

Las ecuaciones (2.1) y (2.2) conforman un sistema de ecuaciones integrales que sólo para determinadas condiciones tienen solución analítica, mientras que en la mayor parte de los casos se deben utilizar métodos numéricos para resolver dichas ecuaciones.

Para calcular las variables en un número determinado de secciones de la geometría del canal estudiado a lo largo del tiempo, se definen los valores de una función cualquiera H_{ij} en los nodos de una “*malla computacional*”, como funciones de las variables independientes x_i y t_j .

Según la discretización adoptada, la integral temporal de la función H en el intervalo de $j-1$ a j se puede expresar, de acuerdo a la aproximación definida por el esquema de Preissmann como,

$$\int_{t_{j-1}}^{t_j} H dt \approx \left[\omega H_j + (1 - \omega) H_{j-1} \right] \Delta t \quad (2.4)$$

donde $\Delta t = t_j - t_{j-1}$ y ω es un factor de ponderación, el cual conduce a resultados que pueden variar entre los de un método explícito ($\omega = 0$) y un método totalmente implícito ($\omega = 1$), y $H(t)$ es una función del tiempo, H_j es su valor en el tiempo t_j .

El esquema de Preissmann es utilizado comúnmente para generar soluciones de diversos regímenes de flujo, debido principalmente a la gran flexibilidad que tiene en la escogencia de la discretización espacial y temporal (dx y dt de cálculo).

Para el esquema utilizado se ha encontrado en la amplia literatura existente al respecto, que valores del factor de peso ω cercanos a $2/3$ son los que producen mejores soluciones, ya que minimizan las pequeñas oscilaciones producidas por la linealización de las ecuaciones de flujo.

Cunge (1966), Liggett y Cunge (1975) y Cunge *et al.* (1980) consideran que para que el esquema sea estable el factor de peso ω debe ser $\geq 1/2$.

Este valor del factor de peso necesario para garantizar la estabilidad del esquema, también es señalado en los trabajos de Basco (1977), Morton (1984) y Lyn y Goodwin (1987).

Samuels (1985) realizó un análisis de estabilidad del esquema y también concluyó que la única restricción en la estabilidad del esquema es que $\Delta \geq 1/2$.

Saavedra *et al.* (2002) en el trabajo realizado en el estuario del Río San Juan utilizaron un valor de $\Delta = 0,60$, el cual según su experiencia con soluciones analíticas y la de otros estudios, garantizan estabilidad y convergencia.

2.2.3 Condiciones Iniciales y de Contorno

En un canal donde el régimen de flujo sea subcrítico, son necesarias dos (2) condiciones de contorno, una en el extremo aguas arriba de la zona en estudio y otra en el extremo aguas abajo. Usualmente los tipos de condición de contorno aguas arriba son hidrogramas de caudales Q vs t e hidrogramas de profundidades y vs t , mientras que aguas abajo se suelen utilizar como condiciones de borde una curva de altura y vs caudal Q (conocida como curva de gasto), en la cual se supone una relación única entre cada par de valores de altura y caudal, descartándose los efectos de histéresis. También es usual usar una curva de altura y vs t suponiendo un flujo controlado por una compuerta o embalse

En cuanto a las condiciones iniciales se refiere, deben darse valores de caudales y niveles en todas las secciones transversales de cálculo seleccionadas.

2.2.4 Solución del Sistema de Ecuaciones No-Lineales

Para la solución del sistema de ecuaciones en cada intervalo de tiempo, se linealiza el sistema no lineal de ecuaciones expandiendo las funciones de las incógnitas ($A_{i,j}, Q_{i,j}$) en series de Taylor en torno a los valores conocidos de las variables en el paso de tiempo anterior ($A_{i,j-1}, Q_{i,j-1}$). Adicionalmente las condiciones de contorno también deben ser linealizadas con lo cual el sistema de ecuaciones obtenido a partir de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento entre cada par de secciones así como las condiciones de contorno en los extremos, conforman un sistema de $2(m+1)$ ecuaciones lineales con igual número de incógnitas. Dicho sistema puede expresarse en forma matricial como $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ donde:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix}
 a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & a_{5,3} & a_{5,4} & a_{5,5} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & a_{6,5} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{2n+1,2n} & a_{2n+1,2n+1} & a_{2n+1,2n+2} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{2n+2,2n+1} & a_{2n+2,2n+2}
 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

y el vector de incógnitas \mathbf{x} viene dado de la siguiente forma:

$$x = \begin{pmatrix} \square & \square & A_o & \square & \square \\ \square & \square & Q_o & \square & \square \\ \square & \square & A_1 & \square & \square \\ \square & \square & Q_1 & \square & \square \\ \square & \square & A_2 & \square & \square \\ \square & \square & Q_2 & \square & \square \\ \square & \square & \vdots & \square & \square \\ \square & \square & Q_n & \square & \square \\ \square & \square & A_n & \square & \square \\ \square & \square & Q_n & \square & \square \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Para la solución del sistema de ecuaciones se utiliza un método especial de solución, descrito en detalle en el trabajo antes mencionado (Saavedra *et al.*, 2002). No obstante, existen muchas técnicas que pueden ser utilizadas para resolver el sistema de ecuaciones previamente mencionado, bien sea mediante la utilización de métodos directos o métodos indirectos de solución.

Una amplia descripción de tales métodos se presenta en el aparte 3.5 conjuntamente con la conveniencia de utilizar unos u otros métodos dependiendo de las características que presente la matriz de coeficientes mostrada en (2.5).

2.3 ECUACIONES DE COMPATIBILIDAD EN LAS CONFLUENCIAS

Es usual tratar a las confluencias o difluencias como contornos interiores del sistema que se expresan en forma de condiciones de contorno en los extremos de cada ramal. Estas condiciones se obtienen haciendo cero la suma algebraica de los caudales en el punto de confluencia o nodo de la red, así como igualando las cotas de superficie de los tres (3) canales que se unen en el nodo. Para combinar estas ecuaciones de compatibilidad con las de continuidad y cantidad de movimiento en los ramales es necesario indicar a qué ramal pertenece cada una de las tres (3) secciones y en qué extremo se encuentra.

Para resolver el sistema de ecuaciones se linealizan las ecuaciones de compatibilidad en cada intervalo de tiempo, y la solución del sistema lineal de ecuaciones se realiza en dos (2) etapas. En la primera se traslada en cada ramal la condición del extremo aguas arriba (compatibilidad o hidrograma anexo) hacia el extremo aguas abajo y luego se repite el procedimiento hasta eliminar de todas las ecuaciones de los contornos, los términos con variables en los extremos aguas arriba. De esta manera, para una red con M ramales se obtiene un sistema de $2M$ ecuaciones con $2M$ incógnitas, el cual puede resolverse por un método de matrices llenas.

De igual forma, la segunda etapa consiste en trasladar la condición del extremo de aguas abajo de cada ramal hacia el extremo aguas arriba procediendo, una vez encontrados los valores de las variables en los extremos de cada ramal, a calcular los valores en las secciones internas.

2.4 SISTEMA FLUVIAL DONDE SE APLICÓ EL MODELO DE FLUJO

El sistema hidráulico donde se implementó el modelo de flujo desarrollado por Saavedra es el estuario del Río San Juan el cual se muestra en la figura 2.1.

El mismo posee una longitud aproximada de unos 140 Km., tiene forma de embudo, profundidades someras y baja pendiente y su comportamiento es el característico de un caño de marea, con una escasa descarga de agua dulce y con corrientes bidireccionales resultantes de la oscilación de las mareas. La mayor parte del estuario se desarrolla sobre una llanura aluvial con poca pendiente y fenómenos de derivación del flujo de los cuales el más importante es el que se presenta a la altura de Punta Marieta a través del caño Francés.

Este tipo de estuario presenta como característica una asimetría de la distribución de los niveles de marea en función del tiempo, teniéndose que los de llenante presentan una mayor pendiente con respecto a los de vaciante debido a la diferencia de velocidad de avance de la cresta y del valle de la onda de marea (Mc Dowell y O'Connor, 1977).

2.4.1 Propagación de la onda de marea en el estuario

En el estuario del Río San Juan, ya a la altura de Punta Gorda, ubicada aproximadamente a 30 Km. desde la boya de recalada en la Barra de Maturín, los efectos de fricción del fondo y de reflexión desde el final del estuario comienzan a apreciarse, de forma tal que la onda de marea no es propiamente progresiva, ocurriendo un desfase entre la ocurrencia de las pleamares y bajamares y de las velocidades máximas (Incostas, 1982), en donde se tiene que la ocurrencia de las velocidades máximas ocurren aproximadamente 2 horas después de la media marea para condiciones de marea viva, obteniéndose en la práctica una onda de marea intermedia entre progresiva y estacionaria que podría denominarse como marea mixta.

A medida que se está más cerca del límite “aguas arriba” del estuario, el efecto de la onda reflejada desde el final del estuario aumenta y la onda de marea adquiere características de onda estacionaria, en donde las velocidades máximas ocurren a media marea, teniéndose que en Caripito la relación entre velocidades de corrientes y niveles de marea para la marea viva indica la presencia de una

onda casi estacionaria con presencia de asimetría tanto en la distribución de niveles de marea como en las velocidades de corriente. (ver figuras 2.2 y 2.3).

Adicionalmente en las figuras 2.4 y 2.5 se presentan hidrogramas de caudales tanto a nivel de Terminal Portuario de Caripito en la parte alta del estuario como a nivel de Punta Gorda, cerca de la desembocadura del Río San Juan en el Golfo de Paria.

A partir de dichas figuras, donde se aprecia la alternabilidad de la dirección de la corriente en forma concomitante con la variación de los niveles de marea, se deduce que la simulación del régimen de flujo presente en este sistema fluvial es bastante complicada y que amerita una adecuada calibración de los modelos matemáticos que se pretendan implementar sobre dicho sistema.

3. DESARROLLO DEL MODELO DE CALIDAD DEL AGUA

3.1 ECUACIONES BASICAS

Considérese que C es la concentración de una sustancia conservativa, tal como la sal en un estuario. Si se exceptúan las pérdidas y ganancias del sistema y además se desprecia la difusividad molecular se obtiene la ecuación (3.1) la cual se puede resolver por métodos analíticos o numéricos si se conoce completamente el campo tridimensional de velocidades y las tres (3) difusividades e_x , e_y y e_z .

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial (v_z C)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(e_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(e_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(e_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3.1)$$

Por lo general, la difusividad turbulenta es mucho mayor que la molecular, por lo que para flujo turbulento se puede despreciar ésta última, ya que los valores más bajos de difusividad turbulenta están en el orden de cm^2/s mientras que los de difusividad molecular son del orden de $10^{-2} \text{cm}^2/\text{s}$.

Pero por lo general el campo de velocidades tridimensional casi nunca se conoce, además de que debido al hecho de que casi siempre la profundidad del río es pequeña en comparación con el ancho del mismo, una sustancia flotante neutra, puede llegar a mezclarse completamente a lo largo de toda la profundidad del flujo en un tiempo relativamente corto. En consecuencia, la distribución de la concentración en la dimensión vertical puede llegar a ser uniforme muy rápidamente y mucho antes de que se consiga una uniformidad en la dirección horizontal. Es por ello que es razonable considerar el promediar verticalmente la ecuación (3.1) sobre la profundidad del flujo. Dicha simplificación es análoga a ignorar la componente vertical de las ecuaciones hidrodinámicas de flujo, aún cuando al hacerlo no se pueda representar con exactitud la mezcla transversal en un río la cual está influenciada por el flujo helicoidal secundario del cual ya se habló, el cual de hecho no puede ser representado sin tomar en cuenta la componente vertical de la velocidad.

Se tendría entonces que la ecuación de transporte para una sustancia cualquiera, considerando que el flujo es unidimensional y no permanente es:

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(QC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3.2)$$

Donde E es el coeficiente longitudinal de dispersión el cual evalúa la distribución no uniforme de la velocidad (dispersión) así como el valor principal de la difusividad turbulenta.

Entre las suposiciones que se han hecho para obtener la ecuación (3.2) se tienen las siguientes:

a) A lo largo de la sección transversal se tiene un sólo valor de velocidad y de concentración debido a la unidimensionalidad de dicha ecuación. Es decir, que efectos debido a la circulación secundaria que va en sentido perpendicular a la dirección principal no son tomados en cuenta, siendo dicha circulación típica de cauces naturales con presencia de meandros en los cuales sus efectos no pueden ser despreciados.

En efecto, adicionalmente a la difusión debida al movimiento aleatorio de las moléculas y partículas del fluido, los contaminantes son también transportados por las velocidades convectivas. Es por ello que se debe tener un conocimiento preciso del campo de velocidades promedio a fin de determinar el destino de los poluentes introducidos dentro del cauce fluvial.

En ríos con cauces meandrosos se ha observado la presencia de una corriente en un plano perpendicular a la dirección del flujo, las cuales pueden transportar poluentes en el plano transversal a la sección transversal.

b) El coeficiente de dispersión longitudinal representa el producto de la velocidad y concentración longitudinales sobre la sección transversal más el valor principal de la difusividad turbulenta.

A la ecuación de transporte unidimensional (ecuación 3.2) se le puede agregar un término que tome en cuenta las “ganancias” o “pérdidas” del sistema. Dicho término se conoce como término “fuente” o “sumidero” y se identifica como S_i .

Una vez que se introduce el término “fuente” o “sumidero” se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial (AC)}{\partial t} + \frac{\partial (QC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S_i \quad (3.3)$$

Para sustancias conservativas el término de fuente o sumidero se expresa de la siguiente forma:

$$S_i = q_i \cdot C_i \quad (3.4)$$

Donde q_i es la descarga por unidad de longitud ($\text{m}^3/\text{m} \cdot \text{s}$), bien sea entrando o saliendo al sistema considerado, y C_i es la concentración de la sustancia en ésta descarga (mg/l).

En la ecuación (3.3) los términos del lado izquierdo de la ecuación toman en cuenta los efectos convectivos, mientras que el primer término del lado derecho toma en cuenta los efectos de la dispersión, acotándose además que la simulación del transporte de sustancias que se hará en este trabajo se limitará a sustancias conservativas, los cuales pueden ser evaluados según la ecuación (3.4).

3.2 SOLUCION NUMERICA

Dado que la solución por métodos analíticos de la ecuación (3.3) solo se puede hacer para casos especiales donde se admiten ciertas simplificaciones, y dado que la compleja geometría de la mayor parte de los sistemas fluviales naturales no admiten la posibilidad de dichas simplificaciones, la ecuación (3.3) que es una ecuación diferencial parcial del tipo parabólico y para cuya solución se requiere especificar tanto las condiciones iniciales como las condiciones de borde, debe ser resuelta mediante métodos numéricos (diferencias finitas, elementos finitos).

Para la resolución de la ecuación de transporte se utilizó un método implícito de diferencias finitas de acuerdo con el esquema propuesto por Preissman, el cual es muy utilizado debido principalmente a la facilidad para discretizar espacial y temporalmente las ecuaciones descriptivas del problema a estudiar. Este esquema fue utilizado por Tucci (1978) y aquí se implementó de la misma forma, salvo por el hecho de que el tratamiento que se hace a las confluencias o bifurcaciones es distinto.

3.2.1 Esquema Numérico

El modelo de transporte aquí desarrollado utiliza, tal y como se mencionó anteriormente, el esquema de Preissman el cual es un método implícito de diferencias finitas hacia adelante. Dicho método aproxima la función $f(x,t)$ y sus derivadas espaciales y temporales en el plano $x-t$, de acuerdo a las expresiones siguientes:

$$f(x,t) \approx \theta f_i^{t+1} + (1-\theta) f_i^t$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \theta \frac{(f_i^{t+1} - f_{i+1}^{t+1})}{\Delta x_{i+1}} + (1-\theta) \frac{(f_i^t - f_{i+1}^t)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\Delta t} (f_i^{t+1} - f_i^t)$$
(3.5)

Tucci (1978) adicionalmente desarrolló y utilizó la siguiente ecuación para definir a $\partial^2 f / \partial t$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{(f_{i+1}^{t+\Delta} - f_i^{t+\Delta})}{\Delta x} - \frac{(f_i^{t+\Delta} - f_{i-1}^{t+\Delta})}{\Delta x} \right] + (1 - \theta) \left[\frac{(f_{i+1}^t - f_i^t)}{\Delta x} - \frac{(f_i^t - f_{i-1}^t)}{\Delta x} \right] \quad (3.6)$$

Con $0 \leq \theta \leq 1$ se aplica el esquema anterior a la ecuación (3.3) y usando la siguiente notación $f^{t+\Delta} = f^{t+1} + (1-\theta) f^t$ se obtiene lo siguiente:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[(AC)_i^{t+1} - (AC)_i^t \right] + \frac{[(QC)_i - (QC)_{i-1}]^{t+\Delta}}{\Delta x_{i-1}} = \frac{2}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} \left[\frac{[(AE)_i + (AE)_{i+1}]}{2\Delta x_i} (C_{i+1} - C_i) - \frac{[(AE)_i + (AE)_{i+1}]}{2\Delta x_{i-1}} (C_i - C_{i-1}) \right]^{t+\Delta} \quad (3.7)$$

A partir de la ecuación (3.7) se obtiene que:

$$L_i C_{i-1}^{t+1} + M_i C_i^{t+1} + N_i C_{i+1}^{t+1} = R_i \quad (3.8)$$

Donde se tiene que los coeficientes L_i , M_i , N_i y R_i vienen dados por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
L_i &= \frac{Q_i}{\Delta x_i} + \frac{(AE)_i + (AE)_{i+1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \Delta t^{i+1} \\
M_i &= \frac{A_i^{i+1}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \frac{(AE)_i + (AE)_{i+1}}{\Delta x_i} \Delta t^{i+1} + \frac{Q_i}{\Delta x_i} \Delta t^{i+1} \\
N_i &= \frac{(AE)_i + (AE)_{i+1}}{\Delta x_i (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} \Delta t^{i+1} \\
R_i &= \frac{A_i^i C_i^i}{\Delta t} + (1 - \Delta t) \frac{1}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \frac{(AE)_i + (AE)_{i+1}}{\Delta x_i} (C_{i+1} - C_i) \Delta t^{i+1} \\
&\quad - \frac{(AE)_i + (AE)_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} (C_i - C_{i+1}) \Delta t^{i+1} + \frac{(QC)_i - (QC)_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \Delta t^{i+1} \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Nótese que en los términos de la ecuación (3.8) no se ha incluido el término de fuente o sumidero, lo cual obedece al hecho de que cada sustancia en particular tiene su propio término.

Para el caso estudiado (sal) no existen fuentes o sumideros por lo cual no serán incluidos en las ecuaciones con las cuales se implementó el modelo de transporte, no obstante y para el caso en que se quiera modelar el transporte de otras sustancias, conservativas o no, en las cuales existan fuentes o sumideros, su inclusión en la ecuación de transporte se puede realizar fácilmente.

3.2.2 Conservación de la masa

La ecuación (3.8) se aplica a cada sección que se haya tomado para caracterizar el sistema fluvial en estudio. Esto resulta en un sistema de ecuaciones que debe ser resuelto en cada instante de tiempo de cálculo.

Asumiendo un río sin confluencias o difluencias y con un Δx constante entre cada una de las secciones definidas, la conservación de la masa del sistema utilizando el esquema numérico planteado se cumple, tal como puede apreciarse en las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Delta t} \sum_{i=1}^{N-1} [(AC)_i^{i+1} - (AC)_i^i] + \frac{1}{\Delta x} \sum_{i=2}^N [(QC)_i - (QC)_{i-1}] \Delta t^{i+1} = \\
\frac{E}{2\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} [(AE)_i + (AE)_{i+1}] (C_{i+1} - C_i) \sum_{i=2}^N [(AE)_i + (AE)_{i+1}] (C_i - C_{i+1}) \Delta t^{i+1} + \sum_{i=1}^{N-1} S_i \Delta t^{i+1} \quad (3.10)
\end{aligned}$$

y asumiendo $\Delta t = 1/2$ la ecuación (3.10) toma la siguiente forma:

$$\Delta x \sum_{i=1}^{N-1} (AC)_i^{t+1} = \Delta x \sum_{i=1}^{N-1} (AC)_i^t - \frac{\Delta t}{2} [(QC)_n^{t+1} + (QC)_n^t] + \Delta t \frac{[(QC)_1^{t+1} + (QC)_1^t]}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} S_i^{t+1} + \sum_{i=1}^{N-1} S_i^t \frac{\Delta t \Delta x}{2} \quad (3.11)$$

La ecuación anterior muestra que el esquema planteado conserva la masa, teniéndose que el significado de cada término es el siguiente:

$$\Delta x \sum_{i=1}^{N-1} (AC)_i^t \quad \text{es la masa existente en el canal en el tiempo } t$$

$$\Delta x \sum_{i=1}^{N-1} (AC)_i^{t+1} \quad \text{es la masa existente en el canal en el tiempo } t + 1$$

$$\Delta t \frac{[(QC)_1^{t+1} + (QC)_1^t]}{2} \quad \text{masa que entra en la condición de contorno aguas arriba en } \Delta t$$

$$\Delta t \Delta x \left[\sum_{i=1}^{N-1} S_i^{t+1} + \sum_{i=1}^{N-1} S_i^t \right] \quad \text{es la variación del término fuente o sumidero en } \Delta t$$

$$\frac{\Delta t}{2} (Q_n^{t+1} + Q_n^t) \quad \text{es la masa que sale de la condición de contorno aguas abajo en } \Delta t$$

3.2.3 Ecuación numérica en las confluencias

En la ecuación unidimensional planteada se realiza un balance simplificado de los caudales de masa debidos a la velocidad del flujo del agua y a la dispersión, asumiendo que la concentración del poluente en el punto central de la confluencia, situado en el extremo de cada uno de los ramales en que se divide o converge el cauce fluvial, tanto confluencias como difluencias, es la misma. Esto es una simplificación de la problemática real que existe en estos casos donde existen pérdidas de energía y altas turbulencias, y con ello lo que se busca es “suavizar” las diferencias de concentraciones existentes en las zonas adyacentes a la confluencia, intentando reproducir la alta turbulencia presente en la misma.

3.3 ESTABILIDAD Y PRECISION DEL MODELO

Cuando un esquema numérico establece conservación de la masa, no existe garantía de que la solución sea estable y precisa siendo además el análisis de precisión y estabilidad de la ecuación de transporte compleja y de difícil evaluación.

Estabilidad

Keller (1960) desarrolló el principio para la estabilidad de un esquema numérico centrado. Lanna y Moretti (1977), usaron el trabajo de Keller y desarrollaron los criterios de estabilidad para los esquemas en diferencias finitas hacia delante y hacia atrás, siendo la ecuación de transporte utilizada en estos esquemas la siguiente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v(x,t) \frac{\partial C}{\partial x} = D(x,t) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - K(x,t) C \quad (3.12)$$

donde $D(x,t) > 0$ y C representa la concentración del componente. Se tiene entonces que la condición de estabilidad para un esquema de diferencias finitas como el utilizado en este trabajo es la siguiente:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{(1 - \theta)(2\theta D + \Delta x \cdot v + \Delta x^2 K)} \quad (3.13)$$

teniéndose que para un esquema totalmente implícito ($\theta=1$) el esquema es incondicionalmente estable.

Cuando la velocidad es negativa, existe más de una condición que se pudiera encontrar para este esquema,

$$\Delta x \leq \frac{D}{|v|} \quad (3.14)$$

en el cual el término $\Delta x \cdot v / D$ se denomina número de Reynolds de la celda (R_c) (Roache, 1972), siendo las condiciones de estabilidad cuando $v < 0$ en un esquema hacia atrás las mismas que se utilizan para los esquemas hacia delante cuando $v > 0$.

La condición de la ecuación (3.14) es más difícil de cumplir en la medida en que el coeficiente de dispersión es más pequeño ya que para cumplir irrestrictamente con la condición de estabilidad, la separación entre secciones Δx que habría que tomar sería pequeña.

Precisión

Los errores en el cálculo numérico, producto de la discretización de las derivadas parciales, pueden crear efectos disipativos y dispersivos en la solución que se obtenga.

Leendertse (1970) usó el método de Von Neumann para computar la razón entre la solución numérica y la solución analítica para una versión lineal de la ecuación (3.12) a fin de poder evaluar los efectos antes mencionados.

La solución analítica general para ésta ecuación diferencial parcial con coeficientes constantes y expandida utilizando las series de Fourier viene dada por la siguiente expresión:

$$C(x, t) = \sum_{m=1}^{m=\infty} C_m \text{EXP}[i(\Delta_m x - \Delta_m t)] \quad (3.15)$$

Donde C_m es el coeficiente constante para la m^{th} componente de la serie, Δ_m es el número de la ola ($\Delta_m = 2\pi/L_m$), L_m es la longitud de la ola y $i = (-1)^{0.5}$.

El efecto disipativo es usualmente evaluado según la siguiente relación:

$$R_1 = \frac{\text{Atenuación numérica de la onda}}{\text{Atenuación analítica de la onda}} \quad (3.16)$$

La razón dispersiva se define como:

$$R_2 = \frac{\text{Velocidad numérica de la onda}}{\text{Velocidad analítica de la onda}} \quad (3.17)$$

El efecto disipativo descrito por la relación R_1 indica que la atenuación numérica es más pequeña que la atenuación física para $R_1 > 1$ y la atenuación numérica es más grande que la atenuación física para $R_1 < 1$, y la relación R_2 que describe el efecto dispersivo debido a la velocidad de la solución numérica, indica que la velocidad numérica de la onda es más pequeña que la velocidad física para $R_2 < 1$ mientras que para $R_2 > 1$ la velocidad numérica es más grande que la velocidad física.

Debe destacarse que en general no se dispone de métodos exactos para estudiar la convergencia de esquemas de diferencias finitas, razón por la cual se necesita “experimentar numéricamente” para con ello determinar las condiciones bajo las cuales un esquema puede garantizar una mejor simulación de las condiciones reales de un flujo.

3.4 CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

La ecuación de transporte con los términos advectivos y dispersivos (ecuación 3.3) es una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico, por lo que para resolverla se necesita especificar las condiciones iniciales al comienzo del cálculo, en todas las secciones que se tomaron para definir el sistema así como dos (2) condiciones de borde para todos los pasos de tiempo, tanto para la sección de entrada como para la sección de salida. Si el sistema tiene tributarios o ramificaciones, que se traducen en entradas o salidas de flujo adicionales, también han de ser especificadas las condiciones iniciales y de contorno en esas secciones.

Existen dos tipos fundamentales de condiciones de borde utilizadas en modelos de calidad del agua, las cuales son:

- Condición de contorno de *Dirichlet* en la cual se especifica el valor de la concentración en el contorno.
- Condición de contorno de Neumann en la cual se especifica el valor de la derivada de la concentración en el contorno.

Como ya se mencionó, para poder dar inicio al cálculo y resolver el sistema de ecuaciones planteado, de donde se obtendrán las concentraciones de la sustancia estudiada para diferentes intervalos de tiempo, es necesario especificar las condiciones iniciales en cada una de esas secciones, las cuales vienen dadas en el caso del modelo de transporte, por concentraciones del poluente y caudales, teniéndose entonces que:

$$C(x,0) = C_i \quad \text{para } i=1,2,3,4,\dots,n$$

En principio éstas condiciones no son conocidas pero pueden estimarse valores obtenidos de una simulación hecha bajo condiciones de régimen permanente, en la cual se mantienen constantes las condiciones de borde con los valores apropiados según el caso, obteniéndose de ésta forma una condición estable de flujo, lo cual es deseable para el inicio del cálculo.

Para un estuario o caño de marea como es el caso estudiado en este trabajo, se tomará como condición de borde aguas abajo (cercana al océano) las concentraciones de la sustancia a simular y los niveles de la superficie libre en función del tiempo, mientras que en el río propiamente se deben conocer las descargas o caudales en función del tiempo.

3.5 SISTEMA DE ECUACIONES

Una vez que las ecuaciones han sido discretizadas de acuerdo con el esquema numérico planteado, y se han impuesto las condiciones iniciales y de contorno, el sistema resultante puede ser definido matricialmente de la siguiente forma:

$$F * S = E$$

donde F es la matriz de coeficientes, S es la matriz de concentraciones de la sustancia simulada para el tiempo t+1, y E es el vector de los términos independientes.

En un sistema fluvial donde no existan confluencias ni difluencias, la matriz de coeficientes es tridiagonal y puede ser resuelta fácilmente utilizando el algoritmo de Thomas.

En un sistema de canales interconectados, como lo es el caso estudiado, la matriz de coeficientes resulta en una matriz dispersa, en la cual solamente un pequeño número de los elementos de la matriz son diferentes de cero.

Para tales problemas, matrices grandes y dispersas, es una mala práctica el utilizar los métodos tradicionales o métodos directos de solución, tales como el de eliminación gaussiana, ya que son extremadamente costosos en memoria y tiempo de cálculo. Por ejemplo, el método de eliminación de Gauss encuentra una solución en un proceso de complejidad $O(n^3)$ y necesita todas las posiciones para hacerlo. En otras palabras, la memoria utilizada es proporcional al cuadrado de la dimensión del sistema (n^2), cuestión que es absurda de hacer si se tiene una matriz grande y altamente dispersa ya que solo una pequeña fracción de todos esos valores son distintos de cero.

En contraposición a esto, los métodos indirectos son métodos iterativos que producen una secuencia de vectores que idealmente convergen a una solución. Esta secuencia se basa únicamente en productos de matrices –vectores de la matriz original y por lo tanto no necesitan alterar el sistema original.

Las soluciones indirectas son en su mayor parte utilizadas como una opción para resolver grandes matrices dispersas donde los métodos directos como el de eliminación de Gauss son

extremadamente costosos tanto en memoria como en tiempo computacional ya que se necesitarían un número de operaciones aritméticas proporcional al cubo del tamaño de la matriz para resolver el sistema de ecuaciones.

Es por esto que a medida que se consideran problemas más grandes y el costo de la solución de la matriz empieza a dominar, se pueden obtener ciertas ventajas utilizando técnicas de solución indirectas: la primera es un posible mejoramiento en el tiempo de solución en comparación con los métodos directos en el caso de que se logre una buena convergencia. De hecho, teóricamente métodos indirectos como el CG (Gradientes Conjugados) producirán una solución en menos pasos de cálculo y en un problema bien condicionado lo harán en muchos menos pasos que el orden del sistema, y la segunda reside en el gran consumo de memoria que puede ahorrarse si se evita la manipulación explícita de la matriz completa.

Para el caso estudiado la matriz de coeficientes resultante es tridiagonal dispersa, lo que sumado a su extensión, motivó a utilizar un método de solución indirecto que consistió en transformar la matriz no tridiagonal, en una tridiagonal, pasando los términos dispersos al vector de términos independientes, y resolviendo el sistema resultante mediante el algoritmo de Thomas. Esta solución inicialmente no es la correcta, pero si se aplica este método en forma iterativa hasta que la diferencia en los valores de los términos independientes en la iteración $n+1$ sea igual o menor a un error de tolerancia (por ejemplo 10^{-5}) en la iteración n , el sistema es resuelto una vez que se haya satisfecho ésta condición.

Esquemáticamente el método podría expresarse de la siguiente manera.

La forma inicial del sistema sería;

$$\begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} \square & \square \\ \square & \square \\ \square & \square \\ \square & \square \end{bmatrix} B \quad \text{donde la matriz de coeficientes } A \text{ puede dividirse en :}$$

$$A = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} C \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} D \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} \quad \text{donde } [D] \text{ son los términos de las tres diagonales principales}$$

Para la iteración $k=0$, $X_1=X_2=X_3=X_4=X_5\dots=0$ con lo cual la formulación anterior toma la siguiente forma:

$C X^k + D X^{k+1} = B$ El cual representa un sistema tridiagonal ya que $X^0=0$ y se resuelve utilizando el algoritmo de Thomas.

Para las siguientes iteraciones se tiene que $D X^{k+2} = B - C X^{k+1}$

Donde en general el sistema a resolver es tridiagonal y donde se guardan las soluciones de la iteración anterior y se comparan con las de la nueva iteración hasta que la diferencia entre ellas es menor a un valor de tolerancia preestablecido. Es decir;

$$\|X^k - X^{k-1}\| \leq \epsilon$$

Los resultados de las concentraciones obtenidas para cada paso de tiempo serán luego introducidas a un algoritmo genético, con el cual se pretende encontrar el valor del coeficiente de dispersión E que mejor reproduzca la serie de datos de concentración que se tienen en otras localizaciones del sistema fluvial.

4. APLICACIÓN DEL ALGORITMO GENETICO

Como se dijo en la introducción, el algoritmo genético trabaja en base a una población inicial escogida aleatoriamente y simula la evolución de la misma utilizando para ello los procesos naturales de selección y supervivencia del individuo más apto, junto con otros procesos como los de cruces y mutaciones. De ésta manera se obtienen generaciones de individuos sucesivamente mejoradas al tiempo que se explora, no un individuo o solución, sino simultáneamente un conjunto de puntos lo cual reduce la probabilidad de alcanzar un falso óptimo, siendo ésta una característica que lo diferencia de otros métodos de optimización y que queda suficientemente evidenciada cuando se hace el análisis a una función como la de Ackley (ver aparte 1.6).

Dadas las ventajas para obtener óptimos globales y no necesitar más resultados del modelo que una función de aptitud, se utilizan los Algoritmos Genéticos en este trabajo para obtener el valor del coeficiente de dispersión que mejor reproduzca un conjunto de datos que se tengan en diferentes localizaciones del sistema fluvial estudiado.

El objetivo de la calibración (optimización de parámetros) de cualquier modelo de un sistema físico, es identificar los valores de algunos parámetros en el modelo, y cuyos valores no son conocidos a priori. Esto se consigue alimentando al modelo con datos, y comparando los datos de salida procesados con los valores de las variables medidas en el sistema físico. Las diferencias encontradas pueden ser minimizadas mediante técnicas de optimización aún cuando los parámetros del modelo sean desconocidos. Existen métodos tradicionales para tratar estos problemas, entre ellos, la programación lineal o método simplex, la programación dinámica, la programación no lineal, la cuadrática, la convexa etc. En estos métodos deben resolverse un conjunto de ecuaciones para encontrar una sucesión de soluciones básicas factibles, cada una mejor que la anterior, hasta que se llega a la solución óptima, pero si el problema es no lineal, y/o las variables que intervienen son múltiples, el problema se puede complicar enormemente debiendo emplearse un número considerable de horas hombre y de computadora para llegar a soluciones óptimas.

En casos como éstos es donde la técnica de los algoritmos genéticos se convierte en una poderosa herramienta. No obstante dicha técnica no es recomendable usarla para cualquier situación ya que aunque la aplicación más común que se le ha dado es a solucionar problemas de optimización, en donde ha demostrado ser eficiente y confiable, no todos los problemas pudieran ser susceptibles de ser resueltos mediante esta técnica, recomendándose evaluar las siguientes características del problema a resolver antes de intentar resolverlo:

- Su espacio de búsqueda, el cual debe estar delimitado dentro de un cierto rango.
- Debe poderse definir una función de aptitud que nos indique qué tan buena o mala es una cierta respuesta. Una característica que debe tener esta función es que tiene que ser capaz de "castigar" a las malas soluciones y de "premiar" a las buenas, de forma tal de que estas últimas se propaguen con mayor rapidez.
- Las soluciones deben codificarse de una forma que resulte relativamente fácil de implementar en una computadora. La codificación más común de las soluciones es la binaria.

En el caso específico de este trabajo, se utilizará la técnica de algoritmo genético para encontrar el valor del coeficiente de dispersión longitudinal que mejor reproduzca los datos medidos en campo en varias localizaciones del sistema estudiado. En el capítulo siguiente se hablará del problema concretamente estudiado y de sus características.

4.1 ALGORITMO GENETICO BASICO

En la sección 1.7 se esquematizó la estructura básica de un Algoritmo Genético. A continuación se explicarán brevemente cada uno de los componentes de dicha estructura:

Cromosoma y Función de Aptitud. Para la codificación se supone que cada individuo (posible solución del problema), puede ser representado como un conjunto de parámetros, los cuales agrupados forman una ristra de valores, referida como cromosoma. En términos biológicos, el conjunto de parámetros representando un cromosoma particular se denomina fenotipo, por lo que dado un cromosoma particular, la función de adaptación le asigna un número real que se supone refleja el nivel de adaptación al problema del individuo representado por el cromosoma, debiendo diseñarse dicha función de adaptación de manera específica para cada problema.

Selección de Padres. Es el elemento más importante en todo algoritmo genético ya que durante la fase reproductiva se seleccionan los individuos de la población para cruzarse y producir descendientes, que constituirán, una vez mutados, la siguiente generación de individuos. La selección de los padres se efectúa aleatoriamente usando un procedimiento que favorece a los individuos mejor adaptados, ya que a cada individuo se le asigna una probabilidad de ser seleccionado que es proporcional a su función de adaptación. Este procedimiento sigue los mismos principios de selección natural postulados por Darwin (1859), es decir, el individuo mejor adaptado tiene las mayores posibilidades de sobrevivir y “*perpetuar*” la especie y sus características propias, mientras que el menos adaptado tiene mayores probabilidades de no sobrevivir, tendiendo entonces a desaparecer.

Cruce y mutación. Una vez realizada la selección aleatoria de individuos de la población original (favoreciendo como ya se dijo, el proceso de selección de los individuos mejor adaptados) éstos se cruzarán, produciendo descendientes que conformarán una vez mutados la siguiente generación de individuos.

Una vez seleccionados dos padres, sus cromosomas (material genético) es combinado, utilizándose para simular este proceso natural los llamados operadores de cruce y mutación, los cuales se describirán a continuación.

El *operador de cruce*, toma dos padres seleccionados y corta sus ristas de cromosomas en una posición escogida al azar (punto de cruce), produciendo de ésta forma dos subristras iniciales y dos subristras finales, luego de lo cual se intercambian las subristras finales (véase la figura 4.1), generándose entonces dos nuevos individuos con un código genético diferente, lo cual queda evidenciado por las diferencias presentes en las ristas de cromosomas de los nuevos individuos (descendientes).

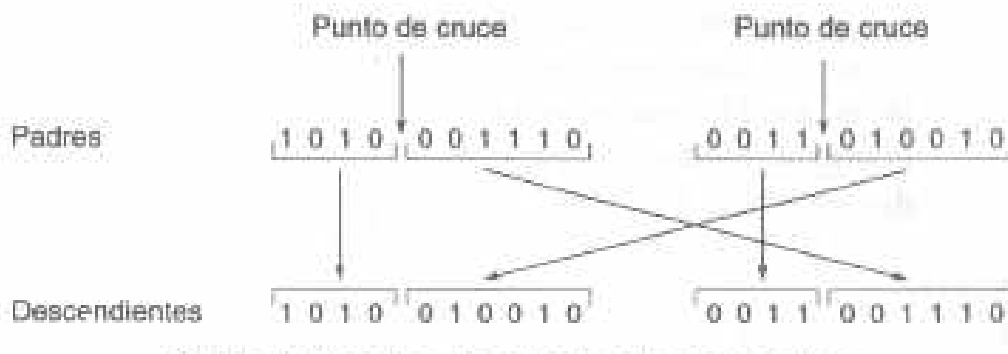


Figura 4.1 Operador de cruce basado en un punto

Ambos descendientes heredan genes de cada uno de los padres. Este operador se conoce como operador de cruce basado en un punto, y por lo general se aplica de manera aleatoria, y no a toda la población seleccionada, debiendo favorecerse en lo posible el cruce de los individuos más aptos a fin de que tengan oportunidad de "transmitir" sus características genéticas a los nuevos individuos que conforman la siguiente generación, existiendo de hecho una técnica desarrollada hace algunos años en la que el individuo más apto a lo largo de las distintas generaciones no se cruza con nadie, manteniéndose intacto hasta que surge otro individuo mejor que él, que lo desplazará. Esta técnica se conoce como "*Elitismo*".

El *operador de mutación* consiste en la alteración aleatoria (normalmente con probabilidad pequeña) de cada gen componente del cromosoma y es aplicado a cada hijo en forma individual. En la Figura 4.2 es esquematiza el proceso de mutación de un gen del código genético, en este caso del quinto gen del cromosoma.

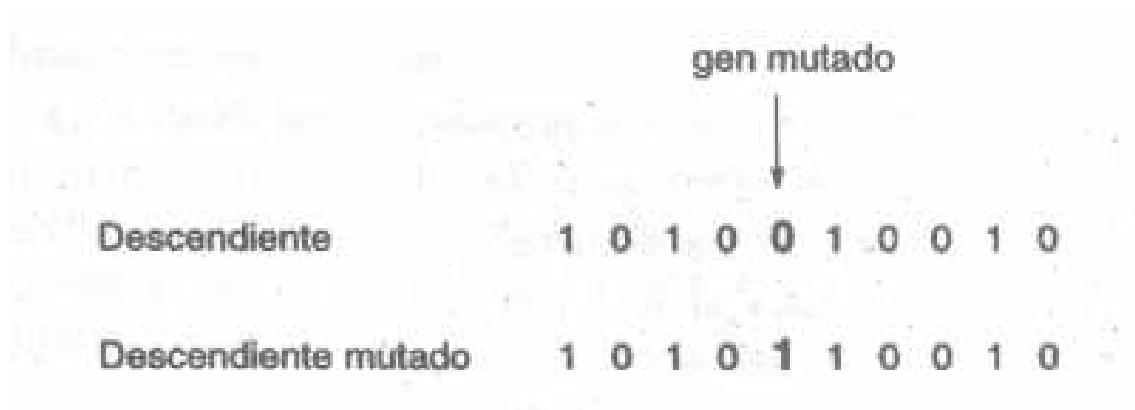


Figura 4.2 Operador de mutación.

En cuanto al tamaño idóneo de la población a ser analizada, pareciera intuitivo que las poblaciones pequeñas corren el riesgo de no cubrir adecuadamente el espacio de búsqueda, pero por otro lado el trabajar con poblaciones excesivamente grandes trae problemas debido al aumento en cuanto al costo computacional se refiere.

4.2 MODIFICACIONES, ANTECEDENTES Y MEJORAMIENTO DEL ALGORITMO GENETICO

La estructura básica del algoritmo genético fue descrita en la sección 4.1. La misma ha sido objeto con el tiempo de cambios de sus componentes (características y representación de la población, función objetivo, operadores de cruce y de mutación) a fin de ajustarlos a la optimización del problema que se pretenda realizar.

Goldberg (1989) efectuó un estudio teórico obteniendo como conclusión que el tamaño óptimo de la población para ristra de longitud L , con codificación binaria, crece exponencialmente con el tamaño de la ristra, hecho que implicaría que la aplicabilidad de los algoritmos genéticos en problemas reales sería muy limitada ya que no resultaría competitivo con otros métodos de optimización combinatoria.

Alander (1992) basándose en experiencia empírica sugiere que un tamaño adecuado de población comprendida entre 1 y 21 es suficiente para acometer exitosamente los problemas por él planteados.

Reeves (1993) plantea la generación de la población inicial mediante un proceso pseudoaleatorio que asegura que todos los posibles valores de cada gen se hallan presentes en la misma (Inicialización Sistemática).

Es importante destacar que la población inicial también podría ser obtenida como resultado de alguna técnica heurística o de optimización local pero dicho proceso puede acelerar la convergencia del Algoritmo Genético hacia un óptimo local y no global.

En lo que se refiere a los operadores de selección, cruce y mutación también se han desarrollado diversas técnicas tendientes a mejorar el comportamiento del algoritmo genético básico. En cuanto al operador de selección se han desarrollado los siguientes mecanismos:

En Baker (1987) se introduce un método denominado Muestreo Universal Estocástico, el cual utiliza un único giro de la ruleta siendo los sectores circulares proporcionales a la función objetivo,

y donde cada componente de la población seleccionada para reproducirse es escogido de la población actual de manera independiente.

En la forma del algoritmo genético básico el operador de cruce se basa en un punto, en el cual los dos individuos seleccionados para ejercer el rol de padres son recombinados por medio de la selección de un punto de corte para luego intercambiar las secciones que se encuentran a la derecha de dicho punto. No obstante se han investigado otros operadores de cruce que tienen en cuenta más de un operador de cruce. De Jong (1975) investigó el comportamiento del operador de cruce basado en múltiples puntos, concluyendo que el cruce basado en dos puntos, representaba una mejora mientras que añadir más puntos de cruce no mejoraba el comportamiento del algoritmo. La ventaja de tener más de un punto de cruce radica en que el espacio de búsqueda puede ser explorado más fácilmente, pero por otro lado presenta la desventaja de que aumenta la probabilidad de ruptura de buenos esquemas.

Michalewicks (1992) introduce un algoritmo que denomina Algoritmo Genético Modificado (MOD sub GA), en el cual para llevar a cabo el reemplazamiento generacional, selecciona al azar r_1 individuos para la reproducción, así como r_2 individuos (distintos de los anteriores) destinados a morir. Estas selecciones aleatorias toman en consideración el valor de la función objetivo de cada individuo, de forma tal de que cuanto mayor es la función objetivo, mayor es la probabilidad de que sea seleccionado para la reproducción y menor es la probabilidad de que dicho individuo fallezca.

Koza (1992) desarrolló una técnica de cruce que permite evolucionar expresiones-S de un programa en LISP, lo cual constituye una forma innovadora de programación automática que puede aplicarse a un sinnúmero de problemas.

También se tiene el llamado operador de cruce uniforme (Syswerda 1991) donde cada gen de la descendencia se crea copiando el correspondiente gen de uno de los dos padres, escogidos de acuerdo a una “máscara de cruce” generada aleatoriamente. Cuando existe un 1 en la “máscara de cruce” el gen es copiado del primer padre, mientras que cuando exista un 0 en la “máscara de cruce”, el gen se copia del segundo padre.

Otros métodos de cruce estudiados son: la recombinación intermedia y la recombinación lineal (Muhlenbein *at el* 1993).

El uso de los códigos de Gray y la codificación dinámica han superado algunos de los problemas asociados con la representación de valores reales mediante cadenas binarias. Otras innovaciones notables son los algoritmos genéticos distribuidos y los algoritmos genéticos paralelos, Srinivas *et al.* (1994) hace una buena recopilación al respecto.

En referencia al operador de mutación, diversos experimentos efectuados por varios investigadores indican que el mismo va ganando importancia a medida que la población de individuos va convergiendo (Davis 1991).

Si bien es muy frecuente encontrar que la mayor parte de las implementaciones de algoritmos genéticos utilizan operadores de cruce y de mutación constantes, algunos autores han obtenido mejores resultados modificando la probabilidad de mutación a medida que aumenta el número de iteraciones. (Ackley 1987, Bramlette 1991, Fogarty 1989 y Michalewicz y Janikow 1991).

4.3 METODO DE CALIBRACION MEDIANTE ALGORITMO GENETICO

La calibración de un modelo pasa por realizar una exhaustiva evaluación de la función objetivo que se halla seleccionado para poder evaluar la calidad de las soluciones que se obtenga, producto del análisis de un problema determinado.

En lo referente a la función objetivo, existe un rango tan amplio como métodos de optimización.

Becker y Yeh (1972), Yeh y Becker (1973) y Wormleaton y Karmegam (1980) utilizaron el algoritmo de coeficientes de influencia. El criterio de error en este método puede ser formulado a través del criterio de la suma de cuadrados o del método de mínimax. En el criterio de la suma de cuadrados los parámetros son expresados mediante ecuaciones recursivas en términos de los coeficientes de influencia los cuales fueron definidos como errores de gradiente con respecto a los parámetros. La función objetivo es entonces minimizada iterativamente.

Wiggert *et al.* (1976) empleó un método de gradiente conjugado y formuló la función objetivo usando el criterio de error de la suma de cuadrados basados en las diferencias absolutas entre los valores observados y medidos. Fread y Smith (1978) usaron la misma función objetivo pero identificando los parámetros con una técnica de Newton-Raphson modificada.

Wormleaton y Karmegam (1984) formularon la función objetivo en términos de errores relativos usando tanto los valores de caudal medidos como los de niveles e identificaron los parámetros con el algoritmo de coeficientes de influencia así como con una técnica de mínimos cuadrados no lineales.

Wang (1991) calibró un total de siete (7) parámetros mediante la minimización de la varianza residual F^2 definida como la suma de los cuadrados de las diferencias entre los caudales medidos y los calculados.

Mohan (1997) utilizó un algoritmo genético para estimar los dos parámetros no lineales del modelo de Muskingum, mostrando la eficacia de ésta técnica para la obtención de dichos parámetros que tradicionalmente han sido obtenidos a través de otras técnicas como la del

gradiente conjugado. La función objetivo utilizada por Mohan fue la de minimizar la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores medidos y los calculados.

Dado que en muchas ocasiones se han obtenido buenas estimaciones de una distribución de parámetros cuando se utiliza el procedimiento de estimación de máxima verosimilitud (*Maximum-likelihood-estimation*), en este trabajo se decidió utilizar dicho procedimiento

Sea $\{X_1, \dots, X_n\}$ una muestra aleatoria de una distribución con función (densidad) de probabilidad $f(x; \theta)$, y sea $L(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta)$ la verosimilitud de la muestra como función de θ . Si $t = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ es el valor de θ para el cual el valor de la función de verosimilitud es máxima, entonces $T = u(X_1, X_2, \dots, X_n)$ es el estimador de máxima verosimilitud de θ , y t es el estimador de máxima verosimilitud.

Numerosos trabajos se han hecho sobre el estudio de las propiedades del estimador de parámetros de máxima verosimilitud. Bajo ciertas condiciones generales los parámetros estimados asintóticamente son normalmente distribuidos, no sesgados y tienen la menor varianza posible de un estimador no sesgado

Se tiene entonces que la función de aptitud (función de *likelihood*) utilizada para evaluar la mayor o menor calidad de los individuos que conforman cada población es la siguiente:

$$\text{función aptitud} = e^{-f/2} \quad (4.1)$$

Donde f es la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores observados y los valores medidos.

4.4 MODIFICACIONES DEL ALGORITMO GENETICO REALIZADAS EN ESTE TRABAJO

En este trabajo se formularon modificaciones a la estructura básica del algoritmo genético presentada en el aparte 1.7, introduciéndose una combinación de generaciones consecutivas permitiendo “competencia”, lo cual es cierta forma similar a la estrategia de elitismo mencionada en el aparte 4.1, compartiendo a su vez ciertas propiedades con la estrategia de sustitución parcial.

Al escoger los mejores entre dos generaciones para obtener una tercera, se favorece la convergencia cuando las funciones tienen un solo punto máximo, corriéndose no obstante, el riesgo de caer en máximos locales en casos de funciones que presenten varios máximos como es el caso de la función presentada en la figura 1.3.

Es de esperarse que la función de *Likelihood* no presente múltiples máximos aunque pueden ocurrir “lomos” en casos en que por incompatibilidades o irregularidades en la geometría, el modelo presente inestabilidades que pueden aumentar la desviación al tiempo que disminuyen la aptitud. En otros casos pueden presentarse largos “lomos” que dan origen a problemas de mal condicionamiento en mínimos cuadrados.

Para evitar algunos de éstos problemas, se introduce una probabilidad de mutación variable la cual aumenta cuando la aptitud de la población es muy uniforme, y que además se espera que sirva de ayuda para escapar de máximos locales.

4.4.1 Probabilidades de cruce y de mutación.

Para representar matemáticamente a los operadores de cruce y de mutación se pueden utilizar diversas expresiones matemáticas, cuya complejidad va desde considerarlos como constantes hasta funciones más complejas.

En este trabajo se consideraron en principio las siguientes expresiones para representar a las probabilidades de cruce y de mutación:

$$\begin{aligned}
 Pr\ cruce &= 1 - [(prob(i).prob(j) + prob(i).prob(j))] \\
 Pmutación &= 1 - [(1 - prob(i).prob(i)) + (1 - prob(j).prob(j))]/2
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

Donde $prob(i)$ y $prob(j)$ son las probabilidades de selección que tienen los individuos (soluciones) i y j , luego de lo cual y con la finalidad de mejorar y acelerar la convergencia del algoritmo genético utilizado, se pasó a definir las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
 Pr\ cruce &= 1 - [(i - j)/(npeopl)]^2 \\
 Pmutación &= i.j.(2/npeopl)^3
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

Donde i y j es la posición relativa de los individuos que se van a cruzar o a mutar y $npeopl$ representa el tamaño total de la población inicial.

La diferencia más importante entre el grupo de ecuaciones mostradas (4.2) y las presentadas en (4.3) es que el primer grupo trabaja con las probabilidades de los individuos i y j , mientras que en el segundo grupo se trabaja con las posiciones relativas de los individuos y no con probabilidades de los mismos, además de lo mencionado al principio del aparte 4.4 en cuanto a *elitismo* se refiere.

En las figuras 4.3 y 4.4 se presentan las probabilidades de cruce y mutación planteadas en la ecuación 4.2 mientras que en las figuras 4.5 y 4.6 se presentan las planteadas en la ecuación 4.3.

4.5 PRUEBA DEL ALGORITMO GENETICO PARA LA CALIBRACIÓN DE UN MODELO SIMPLE.

Una forma de cuantificar los resultados obtenidos luego de la aplicación del algoritmo genético, es el de comparar dichos resultados contra los resultados reales que en este caso, dada la naturaleza del problema estudiado, son de fácil obtención al evaluar la función estudiada.

4.5.1 Prueba del esquema de calibración con parámetros conocidos.

A fin de evaluar el esquema de estimación, se verifica que los parámetros conseguidos mediante la técnica de los algoritmos genéticos sean iguales o muy similares a los que se utilizaron para la obtención de las soluciones analíticas.

Se analizaron dos (2) casos:

4.5.1.1 Función con dos parámetros de estimación

Para este caso se utilizó una función exponencial del tipo $C(t) = A*(1-\exp(-B*t))$, típica del consumo de oxígeno de la demanda bioquímica de oxígeno y que se muestra en la figura 4.7, donde $C(t)$ es la concentración de la sustancia considerada y t es el tiempo.

Como datos iniciales de entrada para el algoritmo genético se generó una curva cuya estructura era similar a la solución analítica de la función exponencial, pero modificándola con “ruido” generado aleatoriamente, el cual consistió en afectar los datos iniciales con un error cuya desviación estándar fue fijada en 0,01.

En la figura 4.7 pueden verse tanto la solución analítica de la función como los datos iniciales que utilizó el algoritmo genético, siendo fijados los valores de los parámetros A y B , para efectos de la estimación, en 1,00 y 0,05 respectivamente. Esta función fue seleccionada como caso de prueba entre otras cosas por el hecho de que no tiene máximos ni mínimos (es asintótica), lo cual se traduce en una mayor dificultad para encontrar los coeficientes mencionados, que si se tratara de una función con un máximo o mínimo “evidente” como pudiera serlo una función del tipo: $f(x,y)= 1/(x^2+ y^2)$.

Sobre la función $C(t)$ se hicieron los análisis iniciales de prueba de la calidad y robustez del algoritmo genético como “método de optimización” para encontrar en este caso el par de valores de los coeficientes A y B.

En las figuras 4.8 y 4.9 se presentan los resultados obtenidos luego de aplicar el algoritmo genético para dos poblaciones distintas, una población inicial de ocho (8) individuos y otro caso cuya población inicial de análisis fue de diez y seis (16) individuos, utilizando las dos (2) funciones de probabilidad de cruce y de mutación distintas (ecuaciones 4.2 y 4.3), mientras que en las figuras 4.10 y 4.11 se muestra la convergencia de los parámetros A y B hacia sus verdaderos valores. Por último, en la figura 4.12 se muestra la evolución de la función de aptitud, calculados de acuerdo a las funciones de cruce y de mutación expresadas en 4.3.

De los resultados obtenidos y mostrados en estas figuras se puede decir lo siguiente:

- a) A medida que se reproducen nuevos individuos (nuevas generaciones), la calidad individual de los individuos que conforman dicha población va mejorando así como los de la población como tal, ello se manifiesta al observar como el promedio de “aptitud” de la población va mejorando con el paso de las nuevas generaciones. Esto se observa con claridad en las figuras 4.8 y 4.9 en las cuales, para poblaciones similares de 8 y 16 individuos, pero funciones de cruce y mutación distintas, el valor de la función de aptitud va evolucionando progresivamente hacia el valor de 1.
- b) Tanto en la figura 4.8 como la 4.9 se puede apreciar la influencia del tamaño inicial de la población. Para la población de ocho (8) individuos, si bien la población mejoró en general a medida que se reproducían nuevas generaciones, su “calidad” siempre fue inferior a la mostrada por la población de diez y seis (16) individuos, siendo también más lento el proceso de convergencia de los parámetros hacia sus verdaderos valores.
- c) De la figura 4.8 también puede extraerse el hecho de que si la población es muy reducida, además de ser más lento su proceso de convergencia también lo es la calidad de los resultados finales, ya que la población de ocho (8) individuos convergió hacia valores bastante discretos si se compara con la población de diez y seis (16) individuos.

d) Si bien el proceso de convergencia de los parámetros hacia sus valores reales es más lento en el caso de la población de ocho (8) individuos, tanto si se utilizan los operadores de cruce y mutación de las ecuaciones 4.2 como los de la 4.3, también es notorio el hecho de que cuando se utilizaron operadores de cruce y mutación donde se permitía “competencia” entre generaciones (ecuaciones 4.3), se obtuvieron valores de los parámetros más cercanos a los reales, lo cual se evidencia por los mejores valores de la función de aptitud obtenidos.

e) De éstos resultados podemos concluir que tanto el tamaño de la población inicial como los operadores de cruce y de mutación son factores fundamentales en el comportamiento y evolución del algoritmo genético.

4.5.1.2 Función con tres parámetros de estimación

Una aplicación práctica para evaluar la calidad de los datos obtenidos luego de aplicar el algoritmo genético es la de reproducir el hidrograma de una creciente o avenida a través de un cuerpo de agua, siendo dicho hidrograma parte fundamental en cualquier modelo hidrológico que se pretenda implementar.

El procedimiento de tránsito ó circulación de caudales se emplea para determinar el tiempo y la magnitud (hidrograma) en un punto determinado de un curso de agua utilizando hidrogramas conocidos en puntos determinados.

El método del hidrograma unitario ha sido utilizado desde 1932 como un concepto clave para el análisis de respuesta de una cuenca a la lluvia. El hidrograma unitario se define como la respuesta de la cuenca a una capa unitaria de exceso de precipitación uniformemente distribuida sobre la cuenca. Esta técnica se basa en la hipótesis de que el sistema lluvia neta-escorrentía sea un sistema lineal invariante en el tiempo, y en las consecuencias que de la misma se derivan, ya que puede introducir errores considerables debido a que la velocidad de desplazamiento del flujo depende de la magnitud de los caudales circundantes y por tanto de la intensidad de la lluvia neta.

Clark (1945) propuso un hidrograma unitario que es el resultado de una combinación de un proceso de tránsito por traslación pura, seguido por un proceso de almacenamiento puro.

Dado que en una cuenca se pueden distinguir conceptualmente varios tipos de almacenamiento como el de la nieve, intercepción, áreas impermeables, aguas subterráneas, etc., Nash (1957) propuso un modelo en el cual el hidrograma unitario es la respuesta de una cascada de embalses lineales idénticos ante un impulso unitario.

Para este caso se utilizó una función exponencial del tipo $C(t) = C * [(exp(-B*t)) - exp(-A*t)]$, que simula un hidrograma tipo Nash, quien propuso un modelo en el cual el hidrograma unitario es la respuesta de una cascada de embalses lineales idénticos. Al igual que en el caso de la función de dos parámetros, como datos iniciales de entrada para el algoritmo genético se generó una curva cuya estructura era similar a la solución analítica de la función $C(t)$, pero modificándola con “ruido” generado aleatoriamente, el cual consistió en afectar los datos iniciales con un error cuya desviación estándar fue fijada en 0.01. En este caso se utilizaron únicamente los operadores de cruce y mutación definidos según (4.3).

En la figura 4.13 pueden verse tanto la solución analítica de la función como los datos iniciales que utilizó el algoritmo genético, siendo fijados los valores de los parámetros A, B y C, para efectos de la estimación, en 0,80, 0,075 y 0,50 respectivamente.

Una vez aplicado el algoritmo genético para estimar los valores de los parámetros A, B y C se obtuvieron los siguientes valores de los mismos: $A=0,75$, $B= 0,073$ y $C=0,50$.

En las figuras 4.14, 4.15 y 4.16 se presenta la evolución para cada nueva generación del valor de cada uno de los parámetros que se desean estimar, mientras que en la figura 4.17 se muestra la evolución de la función de aptitud.

Los resultados obtenidos demuestran la utilidad y confiabilidad del algoritmo genético utilizado para la calibración de los casos estudiados, permitiendo su utilización para casos más complejos.

5. APLICACIÓN DEL MODELO DE TRANSPORTE Y SU CALIBRACION MEDIANTE ALGORITMOS GENETICOS.

A fin de constatar que los resultados obtenidos a través de los modelos matemáticos pueden luego reproducir con fidelidad al fenómeno natural que se vaya a estudiar, se estudian situaciones particulares que tienen soluciones analíticas. Dichas soluciones analíticas son comparadas con las soluciones numéricas obtenidas a través del modelo matemático utilizado, pudiendo de esta forma evaluarse la precisión del modelo.

5.1 CASOS ESTUDIADOS

Para el caso del modelo de transporte se consideró el caso del transporte longitudinal de una sustancia conservativa que es inyectada instantáneamente en un canal recto. Después del período convectivo, el transporte de masa de la sustancia puede ser descrita a través de la siguiente ecuación que considera que el balance de masa sobre una sección transversal:

$$C(x,t) = \frac{M}{A} \frac{1}{\sqrt{4Et}} \exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right] \quad (5.1)$$

Donde M es la masa de la sustancia introducida en el cauce fluvial y A es la sección transversal del canal.

La ecuación fue resuelta suponiendo que la sustancia es inyectada en un medio estático donde el flujo no se mueve ($u=0$).

En las figuras, 5.1 a la 5.6 se muestra la comparación de los resultados obtenidos, tanto la solución analítica como la solución obtenida utilizando el modelo.

Se presentan los resultados para un “ dt ” de cálculo de 5 seg y para otro “ dt ” de cálculo de 25 seg. los cuales muestran la similitud existente entre ambas series de datos. Si dichas curvas se comparan se obtiene que el error medio cuadrático en el cálculo de las concentraciones fue de 1mg/lit para concentraciones máximas del orden de 60 mg/lit.

El caso real analizado fue el del estuario del Río San Juan, donde, y basándose en la información de campo disponible, se procedió a encontrar el valor del coeficiente E de dispersión que mejor reprodujera la variación espacial y temporal de la sustancia no conservativa que se modeló que fue la concentración salina.

Seguidamente se presentan los resultados obtenidos, al tiempo que se hace una descripción detallada de las características hidráulicas del sistema estudiado, así como de la data disponible y de la discretización que se hizo para poder correr tanto los modelos de flujo como de transporte, cuyos insumos sirvieron para la aplicación del algoritmo genético, y con cuya aplicación se obtuvo el coeficiente de dispersión (o rango del mismo) que mejor reprodujo la serie de datos medidos que se tiene.

5.2 APLICACIÓN AL ESTUARIO DEL RÍO SAN JUAN

5.2.1 Descripción del Area de Estudio

El estuario del Río San Juan, mostrado en la figura 2.1 posee una longitud aproximada de unos 140 Km., tiene forma de embudo, profundidades someras y baja pendiente. Su comportamiento es el característico de un caño de marea, con una escasa descarga de agua dulce y con corrientes bidireccionales resultantes de la oscilación de las mareas. La mayor parte del estuario se desarrolla sobre una llanura aluvial con poca pendiente y fenómenos de derivación del flujo de los cuales el más importante es el que se presenta a la altura de Punta Marieta a través del caño Francés.

Desde el punto de vista de la marea, el estuario puede ser clasificado como mesotidal a macrotidal (Hayes, 1979), con amplitudes máximas de marea en Punta Gorda del orden de los 2,5 m y en Caripito del orden de los 4,5 m.

Este tipo de estuario presenta como característica una asimetría de la distribución de los niveles de marea en función del tiempo, teniéndose que los de llenante presentan una mayor pendiente con respecto a los de vaciante debido a la diferencia de velocidad de avance de la cresta y del valle de la onda de marea (Mc Dowell y O'Connor, 1977).

Desde el punto de vista de la salinidad, el estuario del Río San Juan tiene que ser clasificado como mezclado (Dyer, 1973), tal como lo indica la ausencia de estratificación vertical de densidades en la columna de agua, evidenciada por la distribución vertical de las salinidades medidas en Caripito (Incostas, 1987).

Adicionalmente puede afirmarse que la distribución temporal de la salinidad en Caripito, demuestra el carácter estuarino del Río San Juan, dado que se observa una variación desde 300 p.p.m (partes por millón) en bajamar hasta 900 p.p.m en la pleamar, además de que la variación en el tiempo de la salinidad ocurre en fase con la variación de los niveles de marea (Incostas, 1987).

Esta variación temporal de la salinidad está estrechamente relacionada con las variaciones de los niveles de marea y con las velocidades de corriente, y se presenta a lo largo de todo el estuario del

Río San Juan, desde sectores cercanos a su desembocadura en el Golfo de Paria, a nivel de la confluencia entre el Río San Juan y el Caño La Brea, hasta Caripito en la parte alta del estuario.

En las figuras 5.7, 5.8 y 5.9 se presentan mediciones de salinidad en los sectores de: Caño La Brea, Caño Guanoco y en el muelle #3 del Terminal Portuario de Caripito, las cuales fueron realizadas casi en forma simultánea en Junio del año 1997 por la empresa *Incostas, S.C* para la empresa *Lagovén S.A*, pudiendo también en dichas figuras observarse la poca variabilidad de la concentración salina con la profundidad.

5.2.2 Discretización del sistema estudiado

Para tener una buena representación de la zona en estudio, se definieron sesenta y ocho (68) secciones transversales (ver figura 5.10) ubicadas lo suficientemente cerca como para poder obtener a partir de los modelos de flujo y de transporte, una buena predicción tanto de los niveles y caudales, en el caso del modelo de flujo, como de la concentración de la sustancia modelada, en el caso del modelo de transporte.

Como condiciones de borde se tienen los siguientes datos:

- a) En el caso del modelo de flujo se tiene aguas abajo la variación de los niveles de la superficie libre en el tiempo. Dichos datos fueron medidos por Incostas, S.C como parte de las labores que dicha empresa realizó en el Río San Juan para Lagoven, S.A.
- b) En los ramales que van hacia Caño Guanoco y aguas arriba de Caripito, se imponen condiciones de caudal al final de cada ramal, tanto el del Caño Guanoco como el del Río San Juan.

Las condiciones iniciales, tanto del modelo de flujo como del modelo de transporte fueron asignadas arbitrariamente, dado el hecho de que se tiene una serie de datos lo suficientemente larga que permite hacer esto, sin perjuicio de que el sistema alcance después de cierto tiempo su condición final estable según las condiciones de borde a las cuales sea sometido.

Para el caso del Río San Juan, y en base a la información de campo disponible se procedió entonces a implementar primero el modelo de flujo. Aguas arriba (sección 1), a unos 28 Km del terminal petrolero de Caripito se colocó un hidrograma de caudal constante con rangos que variaban entre los 200 y 450 m³/s.

Aguas abajo, en Punta Gorda (sección 68) se dispone de mediciones continuas de la variación de los niveles, y en la otra condición de contorno representada por el ramal del Caño Guanoco, a unos 8,3 Km aguas arriba de la confluencia de este caño con el río San Juan se colocó un hidrograma de caudal constante con rangos que variaban entre 40 y 60 m³/s.

En el caso del modelo de transporte, se cuentan con series de datos de mediciones simultáneas de salinidad en tres (3) sitios distintos: uno ubicado cerca de la desembocadura del Río San Juan (condición de borde aguas abajo). Una segunda serie de mediciones se tiene a nivel del Terminal de Caripito, que aunque corresponde a la sección ubicada más aguas arriba sirvió para definir dicha condición de borde, suponiéndose que ya en esa parte del estuario la variación de la concentración salina es prácticamente inexistente.

La tercera serie de mediciones de salinidad se tiene en la confluencia entre el Caño Guanoco y el Río San Juan. Precisamente, lo que se busca es que el modelo de transporte pueda reproducir la variación espacial y temporal de la concentración salina en la confluencia entre los Caños Guanoco y el Río San Juan, basándose para ello en las condiciones de borde y las condiciones iniciales impuestas.

En la figura 5.10 se muestran todas las localizaciones donde se tienen datos de concentración salina, así como la variación de los niveles de marea en el sector aguas abajo del Río San Juan.

5.2.3 Aplicación del algoritmo genético a la calibración.

El problema consiste en que basándose en la información del modelo de flujo y de las mediciones de concentración salina, pueda estimarse un valor del coeficiente de dispersión longitudinal E que introducido luego en el modelo de transporte, represente adecuadamente las variaciones temporales y espaciales de la sustancia que se esté simulando.

Utilizando la técnica del algoritmo genético se hicieron simulaciones (durante 9 generaciones) para evaluar los diferentes valores del coeficiente E que mejor representaran la variación de la concentración salina.

Debe recordarse que en el sistema fluvial estudiado los niveles de marea oscilan continua y periódicamente, fenómeno al cual también va asociado la variación de la dirección y velocidad del flujo y el caudal de marea. Para el momento en que se hizo este trabajo no se disponía de mediciones de caudal lo suficientemente largas a lo largo del río, no así de los niveles de marea, de los cuales se dispone de muchas y confiables mediciones.

Para el sistema del Río San Juan, además de tener que considerar el caudal de marea se deben tener en cuenta los caudales fluviales de tributarios tales como: el Río Caripe que confluye aguas arriba del terminal petrolero de Caripito, y del Caño Guanoco cuya confluencia con el Río San Juan ocurre a unos 15 kilómetros aguas abajo del terminal petrolero. Como no se disponía de una data confiable al respecto se procedió a simular con la información disponible varios casos, tomando en cuenta las contribuciones de los tributarios antes mencionados.

Adicionalmente y con la finalidad de ver como se comportaba el algoritmo genético, se incluyeron algunos casos con valores de caudales que se sabía estaban muy lejos de la realidad.

La totalidad de los casos antes mencionados se presentan en la figura 5.11 donde se hicieron diferentes combinaciones de caudales para secciones ubicadas aguas arriba del terminal de Caripito (Ca) y para el Caño Guanoco.(Gu), obteniéndose los mejores resultados para una combinación de caudales de 200 m³/s aguas arriba del terminal petrolero de Caripito (condición de borde aguas arriba) y de 50 m³/s como condición de borde en el ramal del Caño Guanoco.

Cuando se aumentaron excesivamente los caudales aguas arriba de Caripito (casos con caudales constantes de 400 y 450 m³/s) se observa como la calidad de la función de aptitud disminuye notablemente con respecto al resto, encontrándose por otro lado que para valores del coeficiente de dispersión E comprendidos entre 350 y 500 se obtienen las soluciones de mejor calidad.

Para un valor de $E= 450 \text{ m}^2/\text{s}$, para el cual se encontró el mejor valor de la función de aptitud, se presenta en la figura 5.12 la comparación entre la serie de concentración salina medida en la confluencia entre el Río San Juan y el Caño Guanoco, y la serie de datos calculados con el modelo.

En la figura 5.12 se muestran los resultados luego de haber transcurrido tres (3) ciclos de marea, período en el cual los resultados de los modelos, están influenciados por las condiciones iniciales. Una vez desaparecida la influencia de las condiciones iniciales, las diferencias entre las curvas medidas y calculadas es bastante pequeña, lo que evidencia la calidad del valor del coeficiente de dispersión que se utilizó para correr el modelo de transporte y generar resultados.

En las figuras 5.13 y 5.14 se muestra la “evolución de la población”, desde una población inicial aleatoria hasta una población o conjunto de soluciones de mayor calidad, lo cual se evidencia por:

- a) En la figura 5.13 se observa como el valor promedio de la función de aptitud de la población va mejorando en cada nueva generación.
- b) En la figura 5.14 se aprecia como el rango de los valores aleatorios iniciales de los coeficientes de dispersión, va disminuyendo y convergiendo hasta un rango comprendido entre 300 y 500 m^2/seg , rango donde se encuentran los valores de los coeficientes de dispersión que mejor reproducen las mediciones de campo.

6. RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

A través del desarrollo de este trabajo quedaron en evidencia algunas de las ventajas de la utilización de los algoritmos genéticos como herramienta para la resolución de problemas de optimización de parámetros. Entre dichas ventajas se destacan

a) Si bien los métodos determinísticos tradicionales representan poderosas herramientas de trabajo a la hora de resolver problemas de optimización que presenten funciones objetivo suaves, diferenciales y unimodales, existen ocasiones en que es necesario hacer una evaluación de las funciones objetivo, cuando al compararlas con métodos de optimización estocásticos, surgen algunas dificultades al relacionarlas con funciones altamente multimodales o problemas de optimización no convexos. He aquí uno de los grandes poderes que tienen los algoritmos genéticos.

b) Su mayor ventaja radica en su robustez y simplicidad, ya que no están limitados por asunciones restrictivas sobre el espacio de búsqueda y además, el mecanismo de evolución y de selección en que se basan, es independiente del problema a resolver, variando solamente la función que descodifica el genotipo en una solución posible y la función que evalúa la calidad de la solución. Esto se suma al hecho de que no trabajan ni necesitan derivadas de las funciones con las cuales se trabaja, por lo cual su desarrollo y eventual convergencia no está sujeta a que la derivada sea continua y no tenga discontinuidades, además de que normalmente dichas derivadas no tienen solución analítica lo que introduce un problema adicional antes de evaluar la función, que es el encontrar una formulación numérica de dicha derivada

c) Una de las grandes ventajas que en nuestro caso representa la utilización de los algoritmos genéticos es que una vez se tengan los resultados del modelo de flujo (corrida que se hace una sola vez a menos que se quieran modelar diferentes condiciones hidráulicas) dichas condiciones entran al modelo de transporte quien le suministra a su vez al algoritmo genético la información que este necesita para la estimación del (o los) parámetros que se estén tratando de optimizar, pudiendo hacerse ésta última operación en varios procesadores en forma simultánea, con lo cual el tiempo total de ejecución se puede disminuir notablemente.

- d) El operar de forma simultánea con varias soluciones, en vez de trabajar en forma secuencial como las técnicas tradicionales, permite su implementación en paralelo en varias computadoras con lo cual se pueden “correr” una multiplicidad de casos en mucho menos tiempo que con las primeras. Aun en caso de no poder realizar dicha implementación con procesadores en paralelo, el algoritmo genético presenta la ventaja de poder utilizar los resultados de corridas simultáneas, cosa que no puede hacerse con un esquema secuencial, donde cada corrida debe necesariamente esperar el resultado de la anterior.
- e) Al no resolver sistemas de ecuaciones, no hay que preocuparse de si dicho sistema está bien o mal condicionado, hecho que se presenta cuando se tratan de resolver problemas utilizando mínimo cuadrados.
- f) Si bien, los resultados obtenidos pueden considerarse satisfactorios, la búsqueda del valor del coeficiente de dispersión E , podría mejorarse si se tuvieran, por ejemplo, más mediciones simultáneas en otros sectores del Río, las cuales desafortunadamente no se tienen.
- g) El modelo de transporte que se implementó aquí fue para sustancias conservativas, pero muy bien podría expandirse y ser modificado a fin de que pueda simular también sustancias no conservativas.
- h) En este trabajo se ha supuesto que el valor del coeficiente E es constante, temporal y espacialmente en cada sección, sin embargo, se sabe que el mismo depende en mayor o menor medida de la geometría del cauce donde quiera ser evaluado. Podría entonces incorporarse la influencia de la variación temporal de la geometría al momento de calcular a través del modelo de transporte, el valor del coeficiente E .
- i) Esta técnica, dada su estructura, permite que el algoritmo genético básico con pequeñas modificaciones (cambios por ejemplo en la función de evaluación de la calidad de cada individuo), pueda ser utilizado para casi cualquier problema. Para problemas en los cuales ya existan técnicas especializadas, las mismas pueden ser mejoradas al hibridarlas con los algoritmos genéticos.

j) Se encontró que las modificaciones hechas a las probabilidades de cruce y mutación utilizadas, aceleraron notablemente la convergencia de los parámetros del modelo, sin necesidad de alterar la estructura básica del modelo, por lo cual el método presentado se pueden aplicar directamente para calibrar modelos ya existentes comúnmente utilizados en la práctica de la ingeniería hidráulica.

7. BIBLIOGRAFÍA

- Ackley, D.H. (1987) A connectionist Machine for Genetic Hillclimbing, Kluwer Academic Publishers.
- Ahlfeld, D.P., J.M. Mulvey, G.F. Pinder and E.F. Wood (1988) Contaminated groundwater remediation design using simulation, optimization, and sensitivity theory, 1, Model development, Water Resour, Res., 24, 431-441.
- Alander, J.T. (1992) On optimal population size of genetic algorithms, en proceedings compEuro 1992, Computer systems and software engineering, 6th annual European computer conference, 65-70.
- Atwood, D.F., and S.M. Gorelick (1985) Hydraulic gradient control for groundwater contaminant removal, J Hydrol., 70, 85-106.
- Back, T. and Schwefel. H.P (1993) An overview of evolutionary algorithms for parameter optimization. Evolutionary Computation, 1(1):1-23.
- Bansal, M.K. (1971) Dispersion in natural streams. J. Hydr. Div., ASCE, 97(11),1867-1886.
- Basco, D.R. (1977) On numerical accuracy in computational hydraulics, Proc. Hydr. '77, ASCE, 179.
- Baker, J.E. (1987) Reducing bias and inefficiency in the selection algorithm, en Proceedings of the Second International Conference of Genetic Algorithms and their applications, 14-21.
- Beck, M. B., and P.C Young (1976). Systematic identification of DO-BOD model structure. Proceedings of American Society of Civil Engineers, Journal of Environmental Engineering Division 102(EE5).
- Becker, L., and Yeh, W. W-G (1972). Identification of parameters in unsteady open channels flows. Water Resour. Res., 9(2), 326-335.

- Bramlette, M.F (1991) Initialization, mutation and selection methods in genetic algorithms for function optimization. Proceedings of fourth international conference on genetic algorithms, 100-107.
- Chatwin, P.C., and Sullivan, P.J (1982) The effect of aspect ratio on longitudinal diffusivity in rectangular channels. *J. Fluid Mech.*, Cambridge, U.K., 120, 347-358.
- Cheng A.H.D, Halhal, A, Naji A and Ouazar D, (2000) Pumping optimization in saltwater-intruded coastal aquifers. *Water Resour.* Vol. 36, No 8, 2155-2165.
- Clark. C.O (1945) Storage and the Unit Hydrograph, *Trans. ASCE*, vol 110: 1419-1488.
- Cunge, J. A. (1966) Etude d'un schema de differences finites applie a l'integration numerique d'un certain type d'equation hyperbolique d'ecoulement. Thesis presented to Grenoble University, al Grenoble, France, in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (in French).
- Cunge, J. A., Holly, F.M., and Verwey, A. (1980). Practical aspects of computational river hydraulics. Pitman, London, England.
- Darwin, C. (1859) On the origin of species by means of natural selection, Murray, London.
- Davis, L. (ed.) (1991) Handbook of Genetic Algorithms, Van Nostrand Reinhold, New York.
- De Jong, K.A (1975) An analysis of the behaviour of a class of genetic adaptive systems, Tesis Doctoral, University of Michigan.
- Dougherty, D.E., and R.A. Marryott, (1991) Optimal groundwater management, 1, Simulated Annealing, *Water Resour. Res.*, 27, 2493-2508.
- Duan, Q, S, S. Sorooshian y V.K. Gupta. (1992) Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models, *Water Resour. Res.* 24(7), 1163-1173.
- Dyer, K, R. (1973) Estuaries: A physical introduction. Wiley, London.

- Elder, J.W (1959). The dispersion of a marked fluid in turbulent shear flow. J. Fluid Mech, Cambridge, U.K.
- Fick, A., (1855). Ann, PHYS. Lpz., vol 170, No 59.
- Fischer, B.H., (1966). Longitudinal dispersion in laboratory and natural streams. Rep. KH-R-12, Keck Lab. of Hydr, and Water Resour., California Institute of Technology, Pasadena, Calif.
- Fischer, B.H., (1968). Dispersion predictions in natural streams. J. Sanit. Engrg. Div., ASCE, 94(5), 927-943.
- Fischer, B.H., (1969). Cross-Sectional Time Scales and Dispersion in stuaries, Proceedings 13 th Congress IAHR3, pp. 173-180, Kyoto.
- Fischer, B.H., (1975). Discussion of simple method for predicting dispersion in streams, by R.S. McQuivey and T.N. Keefer. J. Envir. Engrg. Div., ASCE 101(3), 453-455.
- Fischer, B.H., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J., and Brooks, N.H, (1979). Mixing in inland and coastal waters. Academic Press, Inc., New York, N.Y.
- Fogarty, T.C (1989) Varying the probability of mutation in the genetic algorithm, Proceedings of the third international conference on genetic algorithms, 104-09.
- Fogel, L.J.; Owwns, A.J. y Walsh, M.J. (1966) Artificial Intelligence through Simulated Evolution, Wiley, New York.
- Fourier, J.B., (1822). Theorie analytique de la chaleur, Oeuvres de Fourier.
- Fox, L.B, (1993) Integrating and accelerating tabu search, simulated annealing, and genetic algorithms. Annals of operations research, 41(1-4), 47-67.
- Fread, D.L, and Smith, G.F (1978) Calibration technique for 1.D unsteady flow models. ASCE Proc., J. Hydr. Div., 04(7), 1027-1044.

- Furukawa, T. and Yagawa G., (1997) Inelastic constitutive parameter identification using an evolutionary algorithm with continuous individuals. *International Journal for numerical methods in engineering*, vol. 40, 1071-1090.
- Gan, Y.G., and G.F. Biftu, (1996) Automatic calibration of conceptual rainfall-runoff models. Optimization algorithms, catchment conditions, and model structure. *Water Resour. Res.*, 32(12), 3513-3524.
- Godfrey, R. G., and Frederick, B.J. (1970) Stream dispersion at selected sites. U.S Geological Survey Prof. Paper 433-K, Washington, D.C.
- Goldberg, D.E y Richardson, J.T. (1987) Genetic algorithms in search, Optimization and Machine Learning, Addison-Wesley, Reading, MA.
- Goldberg D.E (1989) Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning, Addison-Wesley, Reading, MA.
- Golub H.G, Van Loan C.F (1996) Matrix Computations. Third edition, Chapter 10, pp 508-509.
- Gorelick, S.M., C.I.Voss, P.E. Gill, W. Murray, M.A. Saunders and M.H. Wright (1984) Aquifer reclamation design: The use of contaminant transport simulation combined with nonlinear programming, *Water Resour. Res.*, 20, 415-427.
- Harleman, D.R.F., (1971), One Dimensional Models, chapter III of Estuarine Modeling; An Assessment, Environmental Protection Agency.
- Hayes, M.O (1979), Barrier island morphology as a function of tidal and wave regime, In: S.P. Leatherman ed.: Barrier Islands, Academic Press, New York.
- Holland, J. (1975) Adaptation in natural and artificial systems, University of Michigan Press, Ann Arbor.

- Holley, E.R., Jr. and D.F. Harleman (1965), Dispersion of Pollutant in Estuary Type Flow, Technical Report number 74, Hydrodynamics Laboratory, Department of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology.
- Huck, P.M and G.T. Farquhar (1976) Water quality models using the Box-Jenkins method. Proceedings of American Society of Civil Engineers, Journal of Environmental Engineering. Division, 100, 733-751.
- Incostas, S.C (1982) Proyecto de dragado de la Barra de Maturín. Informe a Lagoven, S.A. Caracas.
- Incostas, S.C, (1987), Estudios hidrosedimentológicos preliminares del Río San Juan, Edo. Monagas. Informe a Lagoven, S.A. Caracas.
- Iwasa, Y., and, Aya, S. (1991) Predicting longitudinal dispersion coefficient in open-channels flows. Proc., Int. Symp. On Envir. Hydr., Hong Kong, 505-510.
- Khatibi, R., Williams, J.R and Wormleaton, R (1997). Identification problem of open channel friction parameters. Journal of Hydraulic Engineering, pp 1078-1088.
- Keller, H., (1960). The numerical solution of parabolic differential equations, in Ralston A, and Wilf H. Mathematical methods for digital computers, volume 1, John Wiley and Sons, New York, pp. 35-143.
- Koza, John R (1992) Genetic programming on the programming of computers by means of natural selection”, The MIT press, p 819.
- Leendertse, J.J., (1970), A water quality simulation model for well mixed estuaries and coastal seas, volume I, principles of computation, the rand corp., Rm-6230-RC.
- Liggett, J. A., and Cunge, J. A. (1975) Numerical methods of solution of the unsteady flow equations. Unsteady flow in open channels, Vol 1, Water Resources Publications, Fort Collins, Colo.

- Liggett, J. A., (1977) Location of free surface in porous media, Journal of the hydraulics division, ASCE, Vol 103, No HY4, pp 353-365.
- Loucks, D, Stedinger, J and Haith, D, (1981) Water Resource systems planning and analysis.
- Liu, H. (1977) Predicting dispersion coefficient of stream. J. Envir. Engrg. Div., ASCE, 103(1), 59-69.
- Lyn, D. A., and Goodwin, P. (1987). Stability of a general Preissmann scheme. J. Hydr. Engrg., ASCE, 13(1), 16-28.
- Mc Dowell, D.M y O'Connor, B.A. (1977): Hydraulic behavior of estuaries. Mac Millan, London.
- McKinney, D.C and M.D. Lin (1996) Pump and treat groundwater remediation system optimization, J Water Res. Plann. Manage., 122, 128-136.
- McQuivey, R.S., and Keefer, T. N (1974) Simple method for predicting dispersion in rivers. J. Envir. Engrg. Div., 100(4),997-1011.
- Michalewicz, Z. (1992) Genetic Algorithms+Data structures= Evolution Programs, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Michalewicz, Z, Janikow C.Z (1991) Handling constraints in genetic algorithms. Proceedings of the fourth international conference on genetic algorithms, 151-157.
- Mohan, S, (1997) Parameter estimation of nonlinear Muskingum models using genetic algorithm. Journal of Hydraulics Engineering, Vol. 123, No 2, 137-142.
- Morton, K. W. (1984). A preliminary analysis of the box scheme for open channel flow. UCINA project report for HRR Ltd., Oxford University Computing Lab., Oxford, England.
- Muhlenbein H and Schierkamp-Voosen D (1993) Predictive models for the breeder genetic algorithm. Evolutionary Computation, Vol. 1, No 1, pp 25-49.

- Nash, J.E. (1957) The form of the instantaneous unit hydrograph, Int. Assoc. bci. Hydrol. Gen. Ass. Toronto Ontario. Vol 3: 114-121.
- Nelder, J.A. and R. Mead (1965) A simplex method for function minimization, Comput. J., 7, 308-313.
- Nordin, C. F, and Sabol, G.V. (1974). Empirical data on longitudinal dispersion in rivers. U.S. Geological Survey Water Resour. Investigation 20-74, Washington, D.C.
- Osman, I. H, and Kelly, J.P. (1996). Metaheuristics, Theory and Applications, Kluwer Academic Publishers, Norwell, MA
- Périaux, J., Sefrioui, M., Mante, B., and Marco, N. (1998). Evolucionary CFD design optimization problems using genetic algorithms. Simulación con métodos numéricos: Nuevas tendencias y Aplicaciones.
- Ranjithan, S., J. W. Eheart and J.H. Garrett Jr (1993) Neural network based screening for groundwater reclamation under uncertainty, Water Resour. Res., 29, 563-574.
- Rechenberg, I. (1973) Optimierung Technischer Systeme Nach Prinzipien de Biologischer Information, Frommann Verlag, Stuttgart.
- Reeves, C. (1993) Modern Heuristic techniques for combinatorial problems, Blackwell Scientific Publications.
- Roache, P.J, (1972), Computational fluid dynamics, Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico.
- Saavedra I., López J.L. y García Martínez, R. (2002) Dynamic wave study of flow in the tidal channel system of the San Juan river, Journal of Hydraulic Engineering (ASCE) (to appear).
- Samuels, P. G. (1985), Modelling open channel flow using Preissmanns scheme. 2nd International Conference on the hydraulics of floods and flood control, British hydraulics research association, Sep.

- Sawyer, C, McCarty P, and Parkin G (2000) *Química para Ingeniería Ambiental*, Mc Craw Hill, cuarta edición.
- Shastry, J.S, L.T. Fan, and L.E. Erickson (1973). Nonlinear parameter estimation in water quality modeling. *Proceedings of American Society of Civil Engineers, Journal of Environmental Engineering Division* 99 (EE).
- Sooky, A. A. (1969) Longitudinal dispersion in open channels. *J. Hydr. Div., ASCE*, 95(4), 1327-1346.
- Srinivas, M., and Patnaik, L.M., *Genetic Algorithms: A Survey*, IEEE Computer, June 1994, pp 17-26.
- Syswerda, G (1991) Schedule optimization using genetic algorithms, en Davis, L (ed) *Handbook of Genetic Algorithms*, Van Nostrand Reinhold, New York, 332-349.
- Taylor, G.I (1954). Dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proc., Royal Soc., London, U.K., Ser. A*,
- Tucci, C. E. (1978). Hydraulic and water quality model for a river network.
- Unesco, (1982) Dispersion and self-purification of pollutants in surface water systems. *Technical papers in hydrology*.
- Wagner, B.J (1995) Recent advances in simulation-optimization groundwater management modeling, *U.S Natl, Rep. Int. Union Geod. Geophys., 1991-1994, Rev Geophys.,33*, 1021-1028.
- Wang J.Q (1991) The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models. *Water Resources research*, vol. 27, No 9, 2467-2471.
- Wasantha M.A (1995) Calibration of Riverbed Roughness. *ASCE Journal of Hydraulics Engineering*, Vol. 121, No 9.

- Wigger J.M., Taylor, M.R and Contractor, D.N (1976) Optimization of an implicit flow routing model. Int Symp. On Unsteady Flow in open channels, University of Newcastle-On-Tyne, BHRA Fluid Engineering, Cranfield, Bedford, England
- Wood, D.M., Houck, M.H., and Bell, J.M. (1990) Automated Calibration and use of stream-quality simulation model, ASCE J. Environ. Eng. ,116, 236-249.
- Won Seo and Tae Sung Cheong (1998) Predicting Longitudinal Dispersion Coefficient in Natural Streams. Journal of Hydraulic Engineering, 25-32.
- Wormleaton, P.R. and Karmegam, M. (1980) Model parameter identification for routing floods in natural rivers. Asian and Pacific Regional Div. of the Int. Assoc. for Hydr. Res. Conf. In Water Resour. Devel., Taipei, Taiwan, 681-689.
- Wormleaton, P.R. and Karmegam, M. (1984) Parameter optimization in flood routing. ASCE Proc., J Hydr. Div., New York, N.Y., (12), 1799-1810.
- Yeh, W. W-G and Becker, L.(1973). Linear programming and channel flow identification. ASCE Proc., J. Hydr. Div., 99(11), 2013-2021.
- Yoon, J.H and C.A. Shoemaker (1999) Comparison of optimization methods for groundwater remediation, J. Water Resour, Plann, Manage., 125, 54-63.