



UNIVERSIDAD MICHOACANA  
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

“MAT. LUIS MANUEL RIVERA GUTIÉRREZ”

DOCTORADO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA

TESIS:

MODELADO DE TRANSPORTE DE SEDIMENTOS CON  
DIFERENCIAS Y ELEMENTOS FINITOS EN PROBLEMAS  
INVERSOS: CASO LAGO DE ZIRAHUÉN

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

***Doctora en Ciencias en Ingeniería Física***

PRESENTA:

*Maestra en Ciencias en Hidrometeorología*

***Tzitali Gasca Ortiz***

ASESOR:

*Doctor en Ciencias Matemáticas*

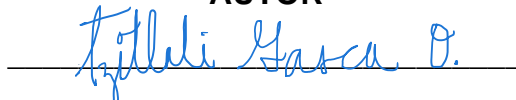
***Francisco Javier Domínguez Mota***

Morelia, Michoacán. Agosto 2021.

## **Declaración de responsabilidad**

- Declaro que esta tesis denominada “Modelado de transporte de sedimentos con diferencias y elementos finitos en problemas inversos: Caso Lago de Zirahuén” es un trabajo original de mi investigación y ha sido escrito en su totalidad por mí.
- Declaro que esta tesis de investigación no constituye en ninguna de sus partes un plagio del trabajo material o intelectual de ningún otro autor.
- Declaro que esta tesis es prácticamente en su totalidad mi propio trabajo, la contribución colaborativa ha sido indicada claramente y reconocida. Y que la fuente a conocimiento por otros autores ha sido debidamente citada y referenciada en el escrito de la tesis.
- Declaro que esta tesis no contiene material que haya sido aceptado o presentado para obtener cualquier otro grado académico, otro título o diploma en una universidad u otra institución de educación superior diferente a la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.
- Declaro que el trabajo de la tesis y su escritura está desarrollado siguiendo principios de ética científica.

**AUTOR**



M.C. Tzitzali Gasca Ortiz

Morelia, Michoacán. Agosto 2021.

## **Agradecimientos**

Es un placer agradecer a todos los que de manera directa o indirecta hicieron posible y contribuyeron en la realización de esta tesis.

A mi director de tesis el **Dr. Francisco Javier Domínguez Mota** por ser guía y soporte fundamental en mi formación profesional.

A los doctores **José Gerardo Tinoco Ruiz, Héctor Igor Pérez Aguilar, Petr Zhevandrov Bolshakova** y a la doctora **Sonia Tatiana Sánchez Quispe**, por sus comentarios, preguntas, sugerencias y correcciones que me ayudaron a mejorar este trabajo.

Al **Dr. Diego Pantoja González** de la Universidad de Guadalajara por el gran equipo de trabajo que hemos formado hasta el momento y por lo cual se han logrado excelentes resultados.

A profesores y estudiantes del Posgrado en Hidrometeorología de la Universidad de Guadalajara, por el apoyo recibido para llevar a cabo el trabajo de campo en el Lago de Zirahuén.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca recibida durante mis estudios.

A la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo por permitirme continuar con mis estudios.

A mis nuevos y viejos amigos.

Además, un agradecimiento infinito a las personas que siempre han estado conmigo: mi familia, en especial a Sebastián y Diego por su apoyo y comprensión durante este proceso.

## **Financiamiento**

Se agradece el apoyo recibido de:

Proyecto de investigación científica básica del CONACyT A1-S-55176.

Y de Aula CIMNE-Morelia.

*“Modeling is a little like art in the words of Pablo Picasso. It is never completely realistic; it is never the truth. But it contains enough of the truth, hopefully, and enough realism to gain understanding about environment systems.”*

*(Ji, 2017)*

## ÍNDICE GENERAL

Resumen .....	1
Abstract .....	2
1.INTRODUCCIÓN .....	3
2.ECUACIÓN DE TRANSPORTE .....	6
2.1.Planteamiento del problema .....	7
2.1.1.Condiciones Iniciales .....	7
2.1.2.Condiciones de Frontera.....	7
2.2.Dificultades numéricas para la ecuación de transporte .....	8
2.3.Discretización por diferencias finitas .....	9
2.3.1.Algunos ejemplos .....	10
2.4.Análisis de Consistencia, estabilidad y convergencia.....	11
2.4.1.Consistencia .....	11
2.4.2.Estabilidad .....	12
2.4.3.Convergencia .....	12
2.5.Análisis de estabilidad para la ecuación de transporte .....	14
2.5.1.Estabilidad de von Neumann .....	15
2.6.Método de elementos finitos .....	21
2.6.1.Aproximación por elementos finitos. El modelo estacionario.....	21
2.6.2.Método de Galerkin .....	24
2.6.3.Funciones de interpolación $\gamma_{je}$ y coeficientes $\phi_{je}$ .....	26
2.6.4.Ejemplo de una región rectangular con nueve nodos para evaluar la estabilidad .....	27
2.6.5.Análisis de estabilidad .....	28
3.PROBLEMA INVERSO .....	29
3.1.El problema inverso .....	29
3.1.1.Identificación de parámetros .....	31
3.1.2.Problema no lineal de mínimos cuadrados .....	32
3.1.3.Método de Newton.....	33
3.1.4.Método de Gauss-Newton .....	34
3.1.5.Método de Levenberg-Marquardt.....	36
3.1.6.Rutina lsqnonlin (nonlinear least-squares) .....	39
3.1.7.Ejemplo de aplicación de la rutina lsqnonlin.....	40

4.PROBLEMAS INVERSOS PARA LA ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS FÍSICOS EN EL LAGO DE ZIRAHUÉN.....	43
4.1.Experimento de trazador y el problema inverso para estimar la concentración .....	44
4.2.Problema directo e inverso de la ecuación de transporte .....	49
4.2.1.Campo de velocidad .....	50
4.3.Modelo matemático de la ecuación de transporte .....	52
4.4.Características generales de la distribución del colorante .....	54
4.5.Estimación del Coeficiente óptimo de difusión .....	54
4.5.1.Caso $C_c$ .....	54
4.5.2.Caso $C_e$ .....	60
4.6.Discusión y Conclusiones .....	65
5.MODELO HIDRODINÁMICO PARA EL LAGO DE ZIRAHUÉN, CONFIGURACIÓN DE MODELO DELFT3D.....	68
5.1.Zona de estudio .....	69
5.2.Observaciones .....	71
5.2.1.Estación meteorológica.....	71
5.2.2.CTD y cadena de termistores .....	73
5.2.3.Datos de CTD .....	76
5.2.4.Perfilador de corrientes (Correntómetro).....	78
5.3.Modelo Hidrodinámico Delft3D.....	78
5.3.1.Configuración del modelo Delft3D .....	79
5.4.Resultados de modelo hidrodinámico .....	80
5.4.1.Problema inverso para estimar $C_d$ .....	81
5.5.Validación del modelo .....	85
5.6.Optimización para $a$ y $b$ del coeficiente de dispersión ( $D = at^b$ ) .....	89
5.6.1.Problema inverso de dispersión.....	90
5.7.Conectividad .....	94
5.8.Conclusiones para la modelación numérica del Lago de Zirahuén.....	98
Bibliografía.....	100

## LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 1. Esquema para cuatro elementos con nueve nodos.....</i>	<i>24</i>
<i>Figura 2. Esquema para un elemento bilineal .....</i>	<i>26</i>
<i>Figura 3. Elipse óptima para el conjunto de datos <math>(\eta_i, \zeta_i)</math>.....</i>	<i>40</i>
<i>Figura 4. Esquema de experimento de trazador.....</i>	<i>45</i>
<i>Figura 5. Procesamiento de imágenes.....</i>	<i>45</i>
<i>Figura 6. Experimento de trazador.. .....</i>	<i>48</i>
<i>Figura 7. Contornos seleccionados para calcular el campo de velocidad,.....</i>	<i>51</i>
<i>Figura 8. Dominio rectangular con tamaño del elemento = 1 y 0.5 m .....</i>	<i>53</i>
<i>Figura 9. Función objetivo y número de iteraciones. ....</i>	<i>55</i>
<i>Figura 10. Distribución de la concentración. Contornos de concentración obtenida con coeficiente de difusión óptimo <math>K_1 = K_2</math> .....</i>	<i>57</i>
<i>Figura 11. Contornos de concentración obtenida con coeficiente de difusión óptimo <math>K_1 = K_2</math> .....</i>	<i>58</i>
<i>Figura 12. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos con <math>K_1 \neq K_2</math> .....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 13. Función objetivo y número de iteraciones .....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 14. Distribución de la concentración. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos <math>K_1 \neq K_2</math> y <math>K_{12} = K_{21}</math>.....</i>	<i>63</i>
<i>Figura 15. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos para <math>K_1 = K_2</math> y <math>K_1 \neq K_2</math> .....</i>	<i>64</i>
<i>Figura 16. Localización geográfica y batimetría del Lago de Zirahuén. Malla utilizada para modelo numérico.....</i>	<i>70</i>

<i>Figura 17. Rosa de viento.</i> .....	72
<i>Figura 18. Datos de estación meteorológica.</i> .....	73
<i>Figura 19. Esquema de cadena de termistores y de ADP.</i> .....	74
<i>Figura 20. Serie de tiempo de la cadena de termistores.</i> .....	75
<i>Figura 21. Transectos de datos de CTD.</i> .....	77
<i>Figura 22. Promedio mensual de la distribución vertical de la temperatura del agua.</i> .....	80
<i>Figura 23. Calibración del modelo se basa en la optimización del coeficiente del esfuerzo del viento (<math>C_d</math>).</i> .....	83
<i>Figura 24. Comparación de las mediciones y resultados de la simulación numérica.</i> .....	87
<i>Figura 25. El promedio de la termodinámica en la superficie del lago.</i> .....	88
<i>Figura 26. Áreas con diferentes <math>a</math> y <math>b</math> iniciales.</i> .....	92
<i>Figura 27. Distribución espacial y temporal del trazador.</i> .....	94
<i>Figura 28. Distribución espacial y temporal de las partículas en el Lago de Zirahuén.</i> .....	96
<i>Figura 29. Distribución de partículas.</i> .....	97

## LISTA DE TABLAS

<i>Tabla 1. Clasificación de la ecuación de transporte. ....</i>	<i>8</i>
<i>Tabla 2. Datos de tiempo y centro geométrico entre cada contorno, para obtener u y v.....</i>	<i>51</i>
<i>Tabla 3. Condición inicial para casos Cc y Ce. ....</i>	<i>52</i>
<i>Tabla 4. Características de malla triangular .....</i>	<i>53</i>
<i>Tabla 5. Parámetros y estimación del coeficiente de difusión para el caso áreas Cc.....</i>	<i>56</i>
<i>Tabla 6. Parámetros y estimación del coeficiente de difusión para el caso áreas Ce. ....</i>	<i>62</i>
<i>Tabla 7. Estudios con diferentes valores para el coeficiente de difusión. ....</i>	<i>66</i>
<i>Tabla 8. Parámetros considerados para configuración del modelo .....</i>	<i>79</i>
<i>Tabla 9. Valores óptimos obtenidos de a y b.....</i>	<i>93</i>

## Resumen

En el presente trabajo de tesis se presenta una primera aproximación de la modelación numérica de la hidrodinámica del Lago de Zirahuén y sus procesos de transporte. Se presenta una aproximación general para resolver de manera numérica los problemas inversos y cómo éstos se utilizan para la estimación de parámetros.

Este trabajo se divide en tres partes principales. En la primera parte se presenta la ecuación de transporte; la formulación matemática del problema directo y los esquemas de discretización que se utilizan, así como las condiciones que se consideran o que se deben de cumplir para poder resolver el problema.

La segunda parte consiste en la obtención de parámetros óptimos mediante el método de mínimos cuadrados no lineales. Se presenta un panorama general de cómo se plantea o se resuelve un problema inverso. Se resuelven dos problemas inversos uno para estimar la concentración y otro para encontrar los coeficientes de difusión óptimos de la ecuación de transporte.

En la última parte se hace una breve descripción de las observaciones y tratamiento de los datos obtenidos en el Lago de Zirahuén y se presenta una configuración, calibración y resultados del modelo hidrodinámico y de transporte.

**Palabras Clave:** *Elemento finito, diferencias finitas, métodos numéricos, advección-difusión, modelo hidrodinámico.*

## Abstract

This thesis presents a first approximation of the numerical modeling of the hydrodynamics and the transport processes of Lake Zirahuén. A general approach to solve numerically inverse problems and how inverse problems are solved for estimating parameters is presented.

This work is divided into three main parts. In the first part the transport equation is presented; the mathematical formulation (of the direct problem) and the discretization schemes that are used, as well as the conditions that are considered or that must be fulfilled to solve the problem.

The second part is about finding optimal parameters using the non-linear least squares method. A general description of how inverse problems are posed or solved. Two inverse problems are solved, one to estimate the concentration and the other to find the optimal diffusion coefficients of the transport equation.

In the last part, a brief description of the observations and treatment of the data obtained in Lake Zirahuén is made, and a configuration, calibration and results of the hydrodynamic and transport model are presented.

**Keywords:** *Finite element, finite differences, numerical methods, advection-diffusion, hydrodynamic model.*

# 1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de algoritmos nuevos y más sofisticados para obtener la solución de ecuaciones diferenciales se determina al aumentar la complejidad dada por los procesos involucrados, ya sean: cambios locales, advectivos, difusivos, de reacción, de fuentes/sumideros, de cambios de fase, etc. Para resolver estos problemas se han desarrollado métodos como diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, entre otros. Además, existen los modelos híbridos que se pueden dividir en dos categorías: (i) híbrido entre diferentes tipos de modelos matemáticos e (ii) híbridos entre un modelo matemático y un modelo físico (Liu & Cao, 2011). Por ejemplo, se puede combinar la flexibilidad de los elementos finitos con la eficiencia de las diferencias finitas, o también se pueden combinar los diferentes esquemas de diferencias con volúmenes finitos, todos ellos con el objetivo de resolver numéricamente sistemas de ecuaciones diferenciales (Beilina, 2010; Cushman-Roisin & Beckers, 2010; Hirsch, 2007a, 2007b).

El uso y valor de los modelos computacionales para la restauración y manejo de cuerpos de agua ha aumentado con el tiempo como resultado de los avances en la modelación numérica y computacional. La simulación numérica de la hidrodinámica brinda información de las variaciones espaciales y temporales que se pueden utilizar para mejorar la comprensión de los procesos de transporte de sedimento, que son de gran interés para problemas ambientales y de ingeniería, ya que éstos pueden ser de gran utilidad para el manejo adecuado y la conservación de cuerpos de agua (Jian et al., 2014; Zijlema M, 2015).

La parte de la hidrodinámica usualmente se modela numéricamente utilizando las ecuaciones de aguas someras, ya que estas permiten simular problemas en la naturaleza relacionados con cuerpos de agua en donde una de las características básicas que ayudan a simplificar la formulación matemática del sistema de ecuaciones, es suponer que las escalas horizontales son mayores que la profundidad, por ejemplo, en la dinámica de algunos procesos del océano en la zona costera, y en general en la hidrodinámica en estuarios, ríos y lagos, es decir, en sistemas de aguas superficiales. En estos lugares las leyes que gobiernan y que

son la base de los procesos hidrodinámicos son la conservación de la masa, la energía y el momento (Cushman-Roisin & Beckers, 2010; Ji, 2017; Vreugdenhil, 1994).

Cuando una sustancia se transporta hacia los cuerpos de agua uno de los principales factores que modifican la concentración de esa sustancia son los procesos de transporte los cuales pueden ser de advección, difusión, dispersión y mezcla vertical. La ecuación que ayuda a comprender o modelar estos procesos es la ecuación de transporte o de advección-difusión.

Debido a los escasos estudios y simulaciones numéricas que se han hecho en el Lago de Zirahuén y tomando en cuenta que no se estudian en su totalidad los procesos dinámicos del lago, es de gran importancia llevar a cabo un estudio de simulación numérica con la integración de datos para analizar, comprender y reproducir (al menos numéricamente) los procesos hidrodinámicos y de transporte de sedimento en el lago de Zirahuén.

En este trabajo se plantea como hipótesis que debido a los cambios que ocurren en las corrientes y la hidrografía, se espera que los patrones del transporte en el interior de lago cambien conforme a los parámetros que gobiernan la ecuación de transporte en particular el coeficiente de difusión.

La metodología propuesta, consiste en adaptar un esquema de diferencias-elementos finitos para la modelación del transporte de sedimento para obtener la distribución de la concentración de algún trazador y posteriormente resolver el problema inverso de la ecuación de transporte con el fin de encontrar el coeficiente de difusión óptimo. Además, obtener parámetros óptimos para lograr tener una configuración adecuada del modelo hidrodinámico para el Lago de Zirahuén que será validada mediante el empleo de mediciones in situ de diferentes campañas hidrodinámicas y meteorológicas que se han realizado en el lago, y así obtener la circulación general y su variabilidad espacio temporal.

Los resultados de este estudio servirán para estimar el comportamiento de las principales variables físicas y se espera que los resultados a largo plazo ayuden a

establecer mejores prácticas y toma de decisiones para el manejo y conservación del Lago de Zirahuén, ya que la falta de planeación y control de las actividades humanas conllevan a la pérdida irreparable de los recursos naturales.

## 2.ECUACIÓN DE TRANSPORTE

La ecuación de transporte de una sustancia tiene muchas aplicaciones tales como predecir la transferencia de calor en una placa, el transporte del agua en el suelo, el flujo en medios porosos, el esparcimiento o dispersión de contaminantes en ríos, lagos, océanos o la atmosfera, etc., (Brodkey R. E., 1988; Hasanoğlu & Romanov, 2017; Holzbecher, 2012; Hundsdorfer & Verwer, 2003). En la naturaleza, el transporte que ocurre en estos procesos es a través de la combinación de los términos advectivos y difusivos de la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = K_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + S, \quad (1)$$

donde el primer término indica cómo cambia una sustancia  $\varphi$  con respecto al tiempo; el segundo y tercer término con derivadas espaciales y componentes de velocidad promedio  $u$  y  $v$ , representan el transporte con el flujo (advección); mientras que el otro grupo de términos del lado derecho de la ecuación (el primero y segundo), son los términos de difusión que representan el esparcimiento a lo largo y a través del fluido, con  $K_1$  y  $K_2$  los coeficientes de difusión en las direcciones  $(x, y)$ , respectivamente, y  $S$  es el término donde se agregan fuentes o sumideros (Cushman-Roisin & Beckers, 2010; Kuzmin, 2010).

Tradicionalmente esta ecuación se discretiza mediante el método de diferencias finitas, donde el flujo difusivo se calcula mediante una discretización centrada, mientras que para el flujo advectivo que es un poco más problemático, se considera un esquema no centrado donde se tiene que hacer una reconstrucción lineal. Sin embargo, se pueden implementar otros métodos dependiendo de los fenómenos que se consideren estudiar (Hundsdorfer & Verwer, 2003; Kuzmin, 2010).

El proceso de advección está gobernado por la velocidad. Si la velocidad es grande entonces la advección domina el transporte de la sustancia. De lo contrario, si la velocidad es muy pequeña, entonces el proceso difusivo determinará el movimiento de la sustancia. La proporción por la cual la advección o la difusión contribuye al transporte se puede definir en términos del número de Péclet.

Una vez que se ha planteado la ecuación que gobiernan el transporte de una sustancia y se han mencionado los procesos que intervienen de manera directa en este fenómeno, es necesario que el problema matemático sea completo, es decir, que el problema de un sistema físico esté bien planteado.

## 2.1.Planteamiento del problema

Se dice que un problema de valores iniciales y condiciones de frontera está bien planteado si cumple lo siguiente:

- i) Existe una y sólo una solución, y
- ii) ésta depende de manera continua de las condiciones iniciales y de frontera del problema (Hirsch, 2007a; T. & Strikwerda, 1990).

De manera general, las condiciones iniciales y de frontera que son esenciales para definir un problema bien planteado son:

### 2.1.1.Condiciones Iniciales

$\varphi(x, y, 0) = \varphi_0(x, y)$ , la cual expresa el valor de la función al tiempo  $t = 0$ .

### 2.1.2.Condiciones de Frontera

a) Condiciones tipo Dirichlet

$\varphi(x, y, t) = f(x, y)$  especifica los valores que la función  $\varphi(x, y, t)$  toma en la frontera.

b) Condiciones tipo Neumann

$\frac{\partial \varphi(x, y, t)}{\partial \mathbf{n}} = g(x, y)$  aquí se conoce el valor de la derivada de la función  $\varphi(x, y, t)$  con respecto a la normal  $\mathbf{n}$  a lo largo de la frontera.

La ecuación de transporte puede representar una gran variedad de problemas. Si la derivada temporal o la advección o la difusión se eliminan, la ecuación resultante puede ser más simple, aunque puede resultar más difícil de trabajar numéricamente. A continuación, se presenta una tabla resumida del tipo de problemas que se pueden generar al modificar la ecuación de transporte.

Tabla 1. Clasificación de la ecuación de transporte.

Tipo de EDP	multidimensional	Una dimensión
elíptica	$\nabla \cdot (\mathbf{u}\varphi - \mathbf{K}\nabla\varphi) = s,$ $-\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla\varphi) = s$	$u \frac{\partial\varphi}{\partial x} - K_1 \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = s,$ $-K_1 \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = s$
hiperbólica	$\nabla \cdot (\mathbf{u}\varphi) = s,$ $\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\varphi) = s$	$u \frac{\partial\varphi}{\partial x} = s,$ $\frac{\partial\varphi}{\partial t} + u \frac{\partial\varphi}{\partial x} = s$
parabólica	$\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla\varphi) = s,$ $\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\varphi - \mathbf{K}\nabla\varphi) = s$	$\frac{\partial\varphi}{\partial t} - K_1 \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = s,$ $\frac{\partial\varphi}{\partial t} + u \frac{\partial\varphi}{\partial x} - K_1 \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = s.$

donde

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k},$$

$\mathbf{u} = (u, v, w)$  componentes de velocidad,

$\mathbf{K} = (K_1, K_2, K_3)$  coeficientes de difusión en las direcciones  $(x, y, z)$ , respectivamente.

## 2.2. Dificultades numéricas para la ecuación de transporte

La modelación numérica de la ecuación de transporte juega un papel muy importante en las ciencias e ingenierías. Esta ecuación se puede clasificar como una ecuación diferencial parcial hiperbólica-parabólica. La presencia de la primera derivada espacial (término advectivo) en la ecuación usualmente causa gran dificultad para la modelación numérica.

Para una ecuación hiperbólica, los esquemas numéricos convencionales, tales como: el método central, el método de segundo orden, el método Lax-Wendroff, el método Beam-Warming, etc., tendrán algunas dificultades computacionales, ya que darán oscilaciones no físicas en la solución (también llamadas oscilaciones numéricas), a pesar de que son menos disipativas en las regiones de la solución.

Por otra parte, los métodos de primer orden, como esquemas: upstream o de Lax-Friedrichs, pueden dar soluciones de oscilación libre, pero usualmente poseen una difusión numérica fuerte que causa inexactitudes considerables (Kuzmin, 2010). Más adelante se presentan algunos ejemplos de algunas de las dificultades numéricas.

### 2.3. Discretización por diferencias finitas

Tradicionalmente el análisis que se hace es la implementación de esquemas mediante diferencias finitas (Iserles, 2008; LeVeque, 2007).

Para pasar de una ecuación diferencial a una ecuación discretizada en diferencias finitas se parte de considerar una serie de Taylor al proponer una expansión hacia adelante y hacia atrás de la siguiente manera:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + f''(x) \frac{\Delta x^2}{2!} + \dots, \quad (2)$$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - f'(x)\Delta x + f''(x) \frac{\Delta x^2}{2!} + \dots, \quad (3)$$

donde al truncar la ecuación hasta la primera derivada se obtiene el esquema de diferencias finitas hacia adelante:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}, \quad (4)$$

mientras que del esquema de diferencias finitas hacia atrás se obtiene:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x}. \quad (5)$$

La siguiente aproximación es una representación de las diferencias centradas de la primera derivada donde el error de truncamiento es de orden de  $(\Delta x)^2$ , que contrasta con las aproximaciones hacia adelante o hacia atrás que fueron del orden de  $\Delta x$ . La aproximación centrada es una representación más exacta de la derivada:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}. \quad (6)$$

De manera similar, la aproximación para la segunda derivada resulta en

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2}. \quad (7)$$

### 2.3.1. Algunos ejemplos

Para ejemplificar algunas de las dificultades numéricas antes mencionadas considere la ecuación de advección

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x},$$

al hacer la discretización con base en (4) para la parte temporal y (6) para la parte espacial se tiene

$$\varphi_i^{n+1} = \frac{1}{2}(\varphi_{i+1}^n + \varphi_{i-1}^n) - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}(\varphi_{i+1}^n - \varphi_{i-1}^n),$$

donde

$$\varphi_i^n := \varphi(x_i, t_n)$$

con

$$\begin{aligned} t_n &= t_0 + n\Delta t; & n &= 0, \dots, T \\ x_i &= x_0 + i\Delta x; & i &= 0, \dots, M. \end{aligned}$$

Al reescribir la expresión

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{2}\varphi_i^{n+1} + \frac{1}{2}\varphi_i^{n+1}}_{\varphi_i^{n+1}} - \underbrace{\frac{1}{2}\varphi_i^{n-1} + \frac{1}{2}\varphi_i^{n-1}}_0 &= \frac{1}{2}(\varphi_{i+1}^n + \varphi_{i-1}^n) + \underbrace{\varphi_i^n - \varphi_i^n}_0 - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}(\varphi_{i+1}^n - \varphi_{i-1}^n) \Leftrightarrow \\ \frac{1}{2}(\varphi_i^{n+1} + \varphi_i^{n-1}) &= \frac{1}{2}(\varphi_{i+1}^n - 2\varphi_i^n + \varphi_{i-1}^n) - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}(\varphi_{i+1}^n - \varphi_{i-1}^n) - \frac{1}{2}(\varphi_i^{n+1} - 2\varphi_i^n + \varphi_i^{n-1}), \end{aligned}$$

y al volver a aplicar el límite, se tiene que:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - u \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (8)$$

A pesar de que el último término de (8) tiende a cero cuando  $\Delta t \rightarrow 0$ , el comportamiento del primer término de la derecha depende de  $\Delta x$  e inversamente de  $\Delta t$ . Esto quiere decir que el método elegido para resolver la ecuación de

advección no es el adecuado ya que resulta en algo no consistente. Esto se puede ver también si se calculan las derivadas parciales para obtener

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}.$$

Al sustituir esta expresión en (8) da como resultado, además del término advectivo, un término difusivo,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + K \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2},$$

donde

$$K = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} - u^2 \frac{\Delta t^2}{2},$$

es un coeficiente de difusión constante positivo. Es decir, ha aparecido un término difusivo extra en la ecuación original, por lo que se debe considerar otro método numérico para resolver la ecuación de advección.

Problemas de este tipo se analizan con base en la consistencia, estabilidad y convergencia de las ecuaciones diferenciales, las cuales se abordarán a continuación.

## 2.4. Análisis de Consistencia, estabilidad y convergencia

En el análisis de los esquemas numéricos, se deben revisar la consistencia, estabilidad y la convergencia, para poder utilizar una aproximación numérica con fiabilidad ya que en algunas ocasiones las aproximaciones que se obtienen por medio de métodos numéricos difieren de la solución exacta. A continuación, se describen dichos conceptos.

### 2.4.1. Consistencia

La ecuación resultante de la discretización es consistente con la ecuación gobernante si al tomar el límite cuando  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ , el error local de truncamiento tiende a cero.

## 2.4.2. Estabilidad

La mayoría de las aproximaciones numéricas se suponen que están bien condicionadas de tal modo que la existencia y unicidad de la solución se garantiza bajo supuestos físicamente razonables. La estabilidad y exactitud de algún método empleado para resolver un problema está relacionado directamente con la convergencia del método numérico.

La estabilidad de un esquema numérico se relaciona con la propagación del error numérico. Un esquema de diferencias finitas es estable si el error permanece constante o disminuye conforme el proceso iterativo continúa. Si el error crece con el tiempo, se dice que el esquema es inestable (Cushman-Roisin & Beckers, 2010; Hirsch, 2007a; Smith, 1985).

## 2.4.3. Convergencia

Un método numérico es convergente si la solución numérica se aproxima a la solución exacta de la ecuación diferencial en cualquier punto  $x_i = i\Delta x$  y  $t_n = n\Delta t$  cuando  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ . Esta condición de convergencia de la solución numérica a la solución exacta de la ecuación diferencial expresa que el error:

$$\tilde{E}_i^n = \varphi_i^n - \tilde{\varphi}(i\Delta x, n\Delta t),$$

satisface la siguiente condición de convergencia:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0} |\tilde{E}_i^n| = 0,$$

con  $x_i = i\Delta x$  y  $t_n = n\Delta t$ , fijos.

En general, la convergencia es un problema difícil de tratar ya que la expresión final del error de discretización depende de la resolución de la malla y del número de términos considerados que se utilizan para aproximar la derivada. Sin embargo, la convergencia de ecuaciones en diferencias se puede investigar en términos de la estabilidad y consistencia.

La importancia de las condiciones de consistencia, estabilidad y convergencia, y su relación entre ellas se encuentra contenida en el **teorema de equivalencia de Lax**, (Lax & Richtmyer, 1956) el cual menciona que, para un problema bien condicionado con valor inicial, en el cual su aproximación de diferencias finitas satisface las condiciones de consistencia y estabilidad, entonces estas serán las condiciones necesarias y suficientes para la convergencia, es decir,

$$\textit{Consistencia} + \textit{estabilidad} \leftrightarrow \textit{convergencia}$$

Cabe mencionar que en la práctica cuando se utilizan modelos numéricos, la convergencia se puede verificar al ejecutar la misma simulación con distintos refinamientos de malla y variar el tamaño de paso del tiempo, si los errores numéricos son pequeños y la solución se aproxima lo suficiente a la solución exacta entonces se dice que el método es convergente (Hirsch, 2007a; Iserles, 2008; LeVeque, 2007; Smith, 1985).

## 2.5. Análisis de estabilidad para la ecuación de transporte

En esta sección se presenta la estabilidad numérica para la ecuación de transporte bidimensional.

Se parte de un esquema de diferencias finitas hacia adelante para el caso la parte temporal y diferencias centradas para la parte espacial (FTCS, forward in time, centered in space). Se analiza la estabilidad por el método de ***von Neumann*** ya que en general es una de las mejores técnicas para analizar la estabilidad de esquemas numéricos, además de que en la literatura se sugiere que aunque se utilice otra técnica, también es recomendable emplear este método (Hindmarsh et al., 1984).

En este caso, para la ecuación de transporte se supone que se tiene suficiente suavidad en las fronteras, además de que los coeficientes también son suaves y por el teorema de Cauchy-Kovalevskaya (o Kowalewski), se garantiza la existencia y unicidad de la solución de la ecuación de transporte (Buske et al., 2012; Courant & Hilbert, 2008; Mouamba et al., 2020).

Entonces se considera la ecuación de transporte (1) con coeficientes constantes y sin término fuente o sumidero:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = K_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}, \quad (9)$$

en la región  $0 \leq X < 1$ , con  $t \geq 0$  y  $K_1 \geq 0, K_2 \geq 0, u, v$ , constantes, con condiciones de frontera  $\varphi_x(0, y, t) = 0, \varphi_y(x, 0, t) = 0, \varphi_x(1, y, t) = 0, \varphi_y(x, 1, t) = 0$ , e inicial  $\varphi(X, 0)$  arbitraria.

Se considerará la discretización de diferencias finitas FTCS, es decir:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\Delta t} + u \frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + v \frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \\ = K_1 \frac{\varphi_{i+1,j}^n - 2\varphi_{i,j}^n + \varphi_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + K_2 \frac{\varphi_{i,j+1}^n - 2\varphi_{i,j}^n + \varphi_{i,j-1}^n}{\Delta y^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

## 2.5.1. Estabilidad de von Neumann

Para el análisis de estabilidad se seguirá el análisis del método de von Neumann para determinar las condiciones necesarias y suficientes de estabilidad (Hindmarsh et al., 1984; Hirsch, 2007a; Hundsdorfer & Verwer, 2003; LeVeque, 2007; Tinoco-Guerrero et al., 2020) (Hindmarsh et al., 1984; Hirsch, 2007a; Hundsdorfer & Verwer, 2003; LeVeque, 2007), que además es una de las metodologías más conocidas y clásicas que se basa en el análisis de los modos de Fourier, en donde se propone que la función  $\varphi_{i,j}^n$  se puede desarrollar de la siguiente manera:

$$\varphi_{i,j}^n = L^n e^{i(k\Delta x + j\ell\Delta y)},$$

o

$$\varphi_{i,j}^n = L^n e^{i(\theta_i + \theta_j)}, \quad (11)$$

$$\text{con } \theta_i = ik\Delta x, \theta_j = j\ell\Delta y,$$

donde  $L^n$  es la amplitud del armónico,  $\theta_i$  y  $\theta_j$  son los ángulos de fase con  $k$  y  $\ell$  los números de onda para  $-\pi \leq \theta_i \leq \pi$  y  $-\pi \leq \theta_j \leq \pi$ .

Al sustituir (11) en (10) se obtiene

$$\begin{aligned} & \frac{L^{n+1} e^{i(\theta_i + \theta_j)} - L^n e^{i(\theta_i + \theta_j)}}{\Delta t} + u \frac{L^n e^{i(\theta_i + k\Delta x + \theta_j)} - L^n e^{i(\theta_i - k\Delta x + \theta_j)}}{2\Delta x} \\ & + v \frac{L^n e^{i(\theta_i + \theta_j + \ell\Delta y)} - L^n e^{i(\theta_i + \theta_j - \ell\Delta y)}}{2\Delta y} \\ & = K_1 \frac{L^n e^{i(\theta_i + k\Delta x + \theta_j)} - 2L^n e^{i(\theta_i + \theta_j)} + L^n e^{i(\theta_i - k\Delta x + \theta_j)}}{\Delta x^2} \\ & + K_2 \frac{L^n e^{i(\theta_i + \theta_j + \ell\Delta y)} - 2L^n e^{i(\theta_i + \theta_j)} + L^n e^{i(\theta_i + \theta_j - \ell\Delta y)}}{\Delta y^2}, \end{aligned} \quad (12)$$

y al reordenar términos

$$\begin{aligned} & e^{i(\theta_i + \theta_j)} \left[ \frac{L^{n+1} - L^n}{\Delta t} + \frac{uL^n}{2\Delta x} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) + \frac{vL^n}{2\Delta y} (e^{i\ell\Delta y} - e^{-i\ell\Delta y}) \right] \\ & = \frac{K_1 L^n}{\Delta x^2} (e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} - 2) + \frac{K_2 L^n}{\Delta y^2} (e^{i\ell\Delta y} + e^{-i\ell\Delta y} - 2) \Big], \end{aligned}$$

y simplificar, se tiene que

$$L^{n+1} = L^n \left[ \frac{\Delta t}{\Delta t} - \frac{C_1}{2} 2i\text{sen}(k\Delta x) - \frac{C_2}{2} 2i\text{sen}(\ell\Delta y) + \frac{\alpha_1}{2} 2 \cos(k\Delta x) + \frac{\alpha_2}{2} 2 \cos(\ell\Delta y) - \alpha_1 - \alpha_2 \right], \quad (13)$$

donde se pueden definir los parámetros de difusión como

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 2K_1 \frac{\Delta t}{\Delta x^2}; \\ \alpha_2 &= 2K_2 \frac{\Delta t}{\Delta y^2}, \end{aligned} \quad (14)$$

los números de Courant como

$$\begin{aligned} C_1 &= u \frac{\Delta t}{\Delta x}; \\ C_2 &= v \frac{\Delta t}{\Delta y}, \end{aligned} \quad (15)$$

y los números de Péclet como

$$\begin{aligned} P_1 &= u \frac{\Delta x}{2K_1} = \frac{C_1}{\alpha_1}; \\ P_2 &= v \frac{\Delta y}{2K_2} = \frac{C_2}{\alpha_2}. \end{aligned} \quad (16)$$

Se dice que el esquema de diferencias finitas (10) es estable en el sentido de Lax-Richtmyer si  $|L| \equiv \left| \frac{L^{n+1}}{L^n} \right| \leq 1$  para todo  $\theta_1, \theta_2$ . Se conoce como estabilidad fuerte si  $|L| \leq 1$  y débil si  $|L| \leq 1 + \gamma\Delta t$  (Smith, 1985).

### **Teorema**

El esquema (10) junto con (13) es estable en el sentido de von Neumann si y solo si

$$\alpha_1 + \alpha_2 \leq 1, \quad (17)$$

y

$$\frac{C_1^2}{\alpha_1} + \frac{C_2^2}{\alpha_2} \leq 1. \quad (18)$$

### Observaciones

- Estas condiciones implican las condiciones de Courant-Friedrich-Lewy  $|C_1| \leq 1$  y  $|C_2| \leq 1$ , pero esto no es suficiente para la estabilidad.
- Una forma equivalente de (17) es  $C_1 P_1 + C_2 P_2 \leq 1$ , otra es  $P_1^2 \alpha_1 + P_2^2 \alpha_2 \leq 1$ , de esta última desigualdad se puede ver que la desigualdad (17) permanece (más restrictiva) cuando los  $P_1, P_2 < 1$ , y (18) permanece cuando  $P_1, P_2 > 1$ . De otra manera ambas expresiones (17) y (18) son requeridas.

### Demostración

Primero se requiere el uso de identidades trigonométricas en (13), es decir, reescribir esta expresión como:

$$|L|^2 = [C_1 \text{sen}(k\Delta x) + C_2 \text{sen}(\ell\Delta y)]^2 + [1 - \alpha_1(1 - \cos(k\Delta x)) - \alpha_2(1 - \cos(\ell\Delta y))]^2, \quad (19)$$

o

$$|L|^2 = [C_1 \text{sen}(k\Delta x) + C_2 \text{sen}(\ell\Delta y)]^2 + \left[1 - 2\alpha_1 \text{sen}^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - 2\alpha_2 \text{sen}^2\left(\frac{\ell\Delta y}{2}\right)\right]^2.$$

Ahora para la condición **Necesaria**, es decir que  $|L|^2 \leq 1$  para todo  $\theta$ , a partir de (19) al hacer expansión en series de Taylor de la función seno, ésta se puede escribir como:

$$\begin{aligned} |L|^2 &= [C_1(k\Delta x + \mathcal{O}^3) + C_2(\ell\Delta y + \mathcal{O}^3)]^2 + \left[1 - 2\alpha_1\left(\frac{k\Delta x}{2} + \mathcal{O}^3\right)^2 - 2\alpha_2\left(\frac{\ell\Delta y}{2} + \mathcal{O}^3\right)^2\right]^2 \\ &= \left[C_1 k\Delta x + C_2 \ell\Delta y + \mathcal{O}^3\right]^2 + \left[1 - \alpha_1 \frac{k^2 \Delta x^2}{2} - \alpha_2 \frac{\ell^2 \Delta y^2}{2} + \mathcal{O}^6\right]^2, \end{aligned}$$

Ahora al aplicar la aproximación

$$(1 \pm x)^n \approx 1 \pm nx, \quad (20)$$

en la expresión anterior, se obtiene

$$\begin{aligned} |L|^2 &= (C_1 k\Delta x + C_2 \ell\Delta y)^2 + 1 - \alpha_1 k^2 \Delta x^2 - \alpha_2 \ell^2 \Delta y^2 + \mathcal{O}^6 \\ &= C_1^2 k^2 \Delta x^2 + C_2^2 \ell^2 \Delta y^2 + 2C_1 C_2 k\Delta x \ell\Delta y + 1 - \alpha_1 k^2 \Delta x^2 - \alpha_2 \ell^2 \Delta y^2 + \mathcal{O}^6 \end{aligned}$$

La cual también se puede describir en forma matricial como:

$$|L|^2 = 1 - \boldsymbol{\theta}^T(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T)\boldsymbol{\theta} + \mathcal{O}^6, \quad (21)$$

donde

$$\boldsymbol{\theta} = (k\Delta x, \ell\Delta y)^T, \mathbf{C} = (C_1, C_2)^T, \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 \\ 0 & \alpha_2 \end{pmatrix},$$

ya que

$$\mathbf{C}\mathbf{C}^T = \begin{pmatrix} C_1^2 & C_1C_2 \\ C_1C_2 & C_2^2 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T = \begin{pmatrix} \alpha_1 - C_1^2 & -C_1C_2 \\ -C_1C_2 & \alpha_2 - C_2^2 \end{pmatrix},$$

$$(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T)\boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} k\Delta x(\alpha_1 - C_1^2) & -\ell\Delta yC_1C_2 \\ k\Delta x(-C_1C_2) & \ell\Delta y(\alpha_2 - C_2^2) \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}^T(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T)\boldsymbol{\theta} &= k^2\Delta x^2(\alpha_1 - C_1^2) - k\Delta x\ell\Delta yC_1C_2 - k\Delta x\ell\Delta yC_1C_2 + \ell^2\Delta y^2(\alpha_2 - C_2^2) \\ &= C_1^2k^2\Delta x^2 + C_2^2\ell^2\Delta y^2 + 2C_1C_2k\Delta x\ell\Delta y + \alpha_1k^2\Delta x^2 - \alpha_2\ell^2\Delta y^2. \end{aligned}$$

Entonces para que  $|L|^2 \leq 1$  para  $\theta_1, \theta_2$ , falta verificar que  $\boldsymbol{\theta}^T(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T)\boldsymbol{\theta} > 0$ , por lo que la matriz simétrica  $\beta \equiv \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{C}\mathbf{C}^T$ , debe ser definida positiva; en particular, los elementos de la diagonal  $\alpha_1 - C_1^2$  y  $\alpha_2 - C_2^2$  deben ser positivos, entonces,  $C_1^2 \leq \alpha_1$  y  $C_2^2 \leq \alpha_2$ , y si algún  $\alpha = 0$ , entonces  $C = 0$ , por lo que se debe suponer que  $\alpha_1, \alpha_2 > 0$ , entonces si se define

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha}^{-1/2} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{-1/2} & 0 \\ 0 & \alpha_2^{-1/2} \end{pmatrix},$$

por lo que

$$\beta = \boldsymbol{\alpha}^{1/2}(I - \boldsymbol{\gamma}\mathbf{C}\mathbf{C}^T\boldsymbol{\gamma})\boldsymbol{\alpha}^{1/2},$$

y

$$\beta' = I - \gamma \mathbf{C} \mathbf{C}^T \gamma = I - (\gamma \mathbf{C})(\gamma \mathbf{C})^T = I - \mathbf{d} \mathbf{d}^T; \quad \mathbf{d} = \gamma \mathbf{C},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \alpha_1^{-1}(1 - C_1^2 \alpha_1^{-1}) & \alpha_1^{-1} \alpha_2^{-1} C_1 C_2 \\ -\alpha_1^{-1} \alpha_2^{-1} C_1 C_2 & \alpha_2^{-1}(1 - C_2^2 \alpha_2^{-1}) \end{pmatrix},$$

$$\beta' = \begin{pmatrix} 1 - C_1^2 \alpha_1^{-1} & \alpha_1^{-1/2} \alpha_2^{-1/2} C_1 C_2 \\ -\alpha_1^{-1/2} \alpha_2^{-1/2} C_1 C_2 & 1 - C_2^2 \alpha_2^{-1} \end{pmatrix},$$

de la forma cuadrática asociada,

$$\mathbf{z}^T \beta' \mathbf{z} = \mathbf{z}^T \mathbf{z} - (\mathbf{d}^T \mathbf{z})^2,$$

$$\mathbf{z}^T \beta' \mathbf{z} = x^2(1 - C_1^2 \alpha_1^{-1}) + 2xy(\alpha_1^{-1/2} \alpha_2^{-1/2} C_1 C_2) + y^2(1 - C_2^2 \alpha_2^{-1}).$$

Esto es cierto si y solo si  $\mathbf{d}^T \mathbf{d} \leq 1$ , ya que

$$\mathbf{d}^T \mathbf{d} = C_1^2 \alpha_1^{-1} + C_2^2 \alpha_2^{-1},$$

y por lo tanto la desigualdad (18) se cumple.

**Suficiente:** ahora al suponer que (17) y (18) se cumplen. Si  $\alpha_1, \alpha_2 > 0$ , al utilizar la desigualdad de Cauchy-Schwartz para el primer término de (19) se tiene

$$\begin{aligned} (C_1 \sen(k\Delta x) + C_2 \sen(\ell\Delta y))^2 &\leq (|C_1 \sen(k\Delta x)| + |C_2 \sen(\ell\Delta y)|)^2 \\ &\leq \left( |C_1 \sen(k\Delta x)| \frac{\sqrt{\alpha_1}}{\sqrt{\alpha_1}} + |C_2 \sen(\ell\Delta y)| \frac{\sqrt{\alpha_2}}{\sqrt{\alpha_2}} \right)^2 \\ &\leq \left( \frac{C_1^2}{\alpha_1} + \frac{C_2^2}{\alpha_2} \right) (\alpha_1 \sen^2(k\Delta x) + \alpha_2 \sen^2(\ell\Delta y)) \\ &\leq \alpha_1 \sen^2(k\Delta x) + \alpha_2 \sen^2(\ell\Delta y). \end{aligned} \tag{22}$$

Si algún  $\alpha_1, \alpha_2 = 0$ , entonces de (18) implica que  $C_1 = 0$  y  $C_2 = 0$ , entonces (22) se cumple al considerar únicamente los primeros términos para los que  $\alpha_1, \alpha_2 > 0$ . Ahora al sustituir (22) en (19) y considerar que

$$z_1 = 1 - \cos(k\Delta x); \quad z_2 = 1 - \cos(\ell\Delta y),$$

$$\text{sen}^2(k\Delta x) = 1 - \cos^2(k\Delta x) \Rightarrow \cos^2(k\Delta x) = (1 - z_1)^2,$$

entonces

$$\begin{aligned}
|L|^2 &\leq (1 - \alpha_1 z_1 - \alpha_2 z_2)^2 + \alpha_1 \text{sen}^2(k\Delta x) + \alpha_2 \text{sen}^2(\ell\Delta y) \\
&= (1 - \alpha_1 z_1 - \alpha_2 z_2)^2 + \alpha_1 (1 - \cos^2(k\Delta x)) + \alpha_2 (1 - \cos^2(\ell\Delta y)) \\
&= 1 - 2\alpha_1 z_1 - 2\alpha_2 z_2 + \alpha_1^2 z_1^2 + \alpha_2^2 z_2^2 + 2\alpha_1 \alpha_2 z_1 z_2 + \alpha_1 (1 - (1 - z_1)^2) + \alpha_2 (1 - (1 - z_2)^2) \\
&= 1 - 2\alpha_1 z_1 - 2\alpha_2 z_2 + \alpha_1^2 z_1^2 + \alpha_2^2 z_2^2 + 2\alpha_1 \alpha_2 z_1 z_2 + 2\alpha_1 z_1 - \alpha_1 z_1^2 + 2\alpha_2 z_2 - \alpha_2 z_2^2 \\
&= 1 - 2\alpha_1 \alpha_2 z_1 z_2 + \alpha_1^2 z_1^2 + \alpha_2^2 z_2^2 - \alpha_1 z_1^2 - \alpha_2 z_2^2 \\
&= 1 - \alpha_1 z_1^2 - \alpha_2 z_2^2 + (\alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2)^2.
\end{aligned} \tag{23}$$

Nuevamente al aplicar la desigualdad de Cauchy-Schwartz en el último término de (23) se tiene

$$\begin{aligned}
(\alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2)^2 &\leq (|\alpha_1 z_1| + |\alpha_2 z_2|)^2 \\
&= (\sqrt{\alpha_1} \sqrt{\alpha_1} z_1 + \sqrt{\alpha_2} \sqrt{\alpha_2} z_2)^2 \\
&= (\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 z_1^2 + \alpha_2 z_2^2) \\
&\leq \alpha_1 z_1^2 + \alpha_2 z_2^2,
\end{aligned} \tag{24}$$

y de (17) se tiene entonces que  $|L|^2 \leq 1$ .

Por lo tanto, el teorema queda demostrado y el esquema (10) junto con (13) es estable en el sentido de von Neumann, (Hindmarsh et al., 1984; Hirsch, 2007a).

## 2.6. Método de elementos finitos

El método de elementos finitos es una de las técnicas numéricas principales para calcular la solución de ecuaciones diferenciales. La idea central de este método es generar funciones de interpolación requeridas para resolver alguna ecuación diferencial. En este método, esto se realiza dividiendo el dominio dado en un conjunto de subdominios llamados elementos finitos. La frase elementos finitos frecuentemente se refiere tanto a la geometría como al orden de la aproximación utilizada para la variable del problema sobre el elemento (Gockenbach, 2006; Hirsch, 2007a; Kuzmin, 2010; Kwon & Bang, 2018; Oñate, 2013; Pozrikidis, 2014).

### 2.6.1. Aproximación por elementos finitos. El modelo estacionario.

Aunque en este trabajo se realizó la implementación para el modelo no estacionario, por simplicidad en esta sección solo se presenta el esquema estacionario, ya que es la base para estudiar e implementar el no estacionario y la discretización para la parte temporal consiste en agregar la implementación dada por la aproximación mediante diferencias finitas (sección anterior).

Ahora se desarrollará el esquema de la ecuación (1) para el problema estacionario y se obtendrá la forma débil de la ecuación (25) sobre un elemento del dominio  $\Omega^e$ .

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = K_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}. \quad (25)$$

Al ser  $\varphi(\vec{x}) \approx \varphi^e(\vec{x})$  una aproximación, la ecuación (25) no se satisface por completo, por ende, se define un residuo  $R$  de la siguiente manera:

$$u \frac{\partial \varphi^e}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi^e}{\partial y} - K_1 \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial x^2} - K_2 \frac{\partial^2 \varphi^e}{\partial y^2} = R,$$

que generalmente no es cero. El residuo  $R$  depende de las funciones de interpolación  $\gamma_j^e$  y de los coeficientes  $\varphi_j^e$ , donde

$$\varphi(\vec{x}) \approx \varphi^e(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e(\vec{x}), \quad (26)$$

con

- $\varphi^e(\vec{x})$  representa la aproximación de  $\varphi(\vec{x})$  sobre el elemento  $\Omega^e$ ,
- $\varphi_j^e$  representa los valores de la función  $\varphi^e(\vec{x})$  en  $(\vec{x}_j)$ , un selecto numero de puntos llamados nodos del elemento, en el elemento  $\Omega^e$ ,
- $\gamma_j^e(\vec{x})$  son las funciones de aproximación asociadas al elemento,
- $\vec{x} = (x, y)$ .

Se aplica entonces el método de los residuos ponderados, donde  $\phi$  es una función de peso (Hirsch, 2007a; Reddy & Gartling, 2010), lo que resulta en:

$$u \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \phi d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \phi d\Omega = K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \phi d\Omega + K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \phi d\Omega, \quad (27)$$

y mediante la propiedad del producto de la derivada y del teorema de la divergencia, se obtiene la llamada forma débil del esquema. La forma débil de una ecuación diferencial es una ecuación integral, que es equivalente a la ecuación diferencial gobernante, así como a sus respectivas condiciones naturales de frontera, pero con un orden menor en su derivada para este caso, es decir:

$$u \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \phi d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \phi d\Omega = -K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega - K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} d\Omega, \quad (28)$$

Al sustituir la aproximación (26) se tiene que:

$$\begin{aligned} u \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e \right) \phi d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left( \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e \right) \phi d\Omega \\ = -K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e \right) \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega - K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left( \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e \right) \frac{\partial \phi}{\partial y} d\Omega, \end{aligned} \quad (29)$$

y como la suma es finita, se obtiene el modelo de elementos finitos:

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j^e \left\{ u \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \phi d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \phi d\Omega + K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega + K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y} d\Omega \right\} = 0, \quad (30)$$

o de manera compacta

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j^e A_{ij}^e, \quad (31)$$

donde

$$A_{ij}^e = u \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \phi_i d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \phi_i d\Omega + K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} d\Omega + K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} d\Omega.$$

Nótese que el desarrollo explícito de la ecuación (31) es

$$\varphi_1^e A_{i1}^e + \varphi_2^e A_{i2}^e + \varphi_3^e A_{i3}^e + \dots + \varphi_n^e A_{in}^e = 0, \quad (32)$$

es decir, se obtiene una ecuación con  $n$  incógnitas  $(\varphi_1^e, \varphi_2^e, \varphi_3^e, \dots, \varphi_n^e)$ .

## 2.6.2. Método de Galerkin

Si se eligen  $n$  funciones  $\phi$  linealmente independientes, las cuales en el método de Galerkin se propone que sean las mismas funciones de interpolación, entonces se determina un sistema de  $n$  ecuaciones con  $n$  incógnitas (Gockenbach, 2006). Por ejemplo, un esquema para cuatro elementos con nueve nodos se muestra en la

Figura 1.

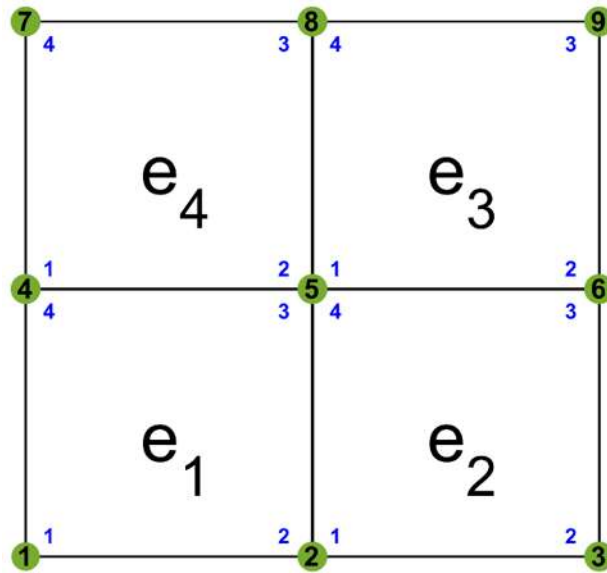


Figura 1. Esquema para cuatro elementos con nueve nodos, en azul los nodos locales para cada elemento. La numeración de los nodos locales con dirección positiva.

Al realizar el desarrollo para cuatro elementos con nueve nodos y al tomar en cuenta la correspondencia entre nodos locales y globales se llega al siguiente sistema para cada elemento en el nodo local:

$e_1$	$e_2$
$\varphi_1 A_{11} + \varphi_2 A_{12} + \varphi_5 A_{13} + \varphi_4 A_{14} = 0, [1]$	$\varphi_2 A_{11} + \varphi_3 A_{12} + \varphi_6 A_{13} + \varphi_5 A_{14} = 0, [2]$
$\varphi_1 A_{21} + \varphi_2 A_{22} + \varphi_5 A_{23} + \varphi_4 A_{24} = 0, [2]$	$\varphi_2 A_{21} + \varphi_3 A_{22} + \varphi_6 A_{23} + \varphi_5 A_{24} = 0, [3]$
$\varphi_1 A_{31} + \varphi_2 A_{32} + \varphi_5 A_{33} + \varphi_4 A_{34} = 0, [5]$	$\varphi_2 A_{31} + \varphi_3 A_{32} + \varphi_6 A_{33} + \varphi_5 A_{34} = 0, [6]$
$\varphi_1 A_{41} + \varphi_2 A_{42} + \varphi_5 A_{43} + \varphi_4 A_{44} = 0 [4]$	$\varphi_2 A_{41} + \varphi_3 A_{42} + \varphi_6 A_{43} + \varphi_5 A_{44} = 0 [5]$

$$\begin{array}{cc}
e_3 & e_4 \\
\varphi_5 A_{11} + \varphi_6 A_{12} + \varphi_9 A_{13} + \varphi_8 A_{14} = 0, [5] & \varphi_4 A_{11} + \varphi_5 A_{12} + \varphi_8 A_{13} + \varphi_7 A_{14} = 0, [4] \\
\varphi_5 A_{21} + \varphi_6 A_{22} + \varphi_9 A_{23} + \varphi_8 A_{24} = 0, [6] & \varphi_4 A_{21} + \varphi_5 A_{22} + \varphi_8 A_{23} + \varphi_7 A_{24} = 0, [5] \\
\varphi_5 A_{31} + \varphi_6 A_{32} + \varphi_9 A_{33} + \varphi_8 A_{34} = 0, [9] & \varphi_4 A_{31} + \varphi_5 A_{32} + \varphi_8 A_{33} + \varphi_7 A_{34} = 0, [8] \\
\varphi_5 A_{41} + \varphi_6 A_{42} + \varphi_9 A_{43} + \varphi_8 A_{44} = 0 [8] & \varphi_4 A_{41} + \varphi_5 A_{42} + \varphi_8 A_{43} + \varphi_7 A_{44} = 0, [7]
\end{array}$$

donde el número que aparece a la derecha entre corchetes [#] corresponde a la posición global.

Al agrupar cada ecuación que tiene en común los nodos globales, esto para cumplir con el balance de la variable secundaria del ensamble de elementos finitos, se obtiene lo siguiente:

$$\begin{array}{r}
\varphi_1 A_{11} + \varphi_2 A_{12} + \varphi_5 A_{13} + \varphi_4 A_{14} = 0, [1] \\
\varphi_1 A_{21} + \varphi_2 A_{22} + \varphi_5 A_{23} + \varphi_4 A_{24} + \varphi_2 A_{11} + \varphi_3 A_{12} + \varphi_6 A_{13} + \varphi_5 A_{14} = 0, [2] \\
\varphi_2 A_{21} + \varphi_3 A_{22} + \varphi_6 A_{23} + \varphi_5 A_{24} = 0, [3] \\
\varphi_1 A_{41} + \varphi_2 A_{42} + \varphi_5 A_{43} + \varphi_4 A_{44} + \varphi_4 A_{11} + \varphi_5 A_{12} + \varphi_8 A_{13} + \varphi_7 A_{14} = 0, [4] \\
\varphi_1 A_{31} + \varphi_2 A_{32} + \varphi_5 A_{33} + \varphi_4 A_{34} + \varphi_2 A_{41} + \varphi_3 A_{42} + \varphi_6 A_{43} + \varphi_5 A_{44} + \varphi_5 A_{11} \\
+ \varphi_6 A_{12} + \varphi_9 A_{13} + \varphi_8 A_{14} + \varphi_4 A_{21} + \varphi_5 A_{22} + \varphi_8 A_{23} + \varphi_7 A_{24} = 0, [5] \\
\varphi_2 A_{31} + \varphi_3 A_{32} + \varphi_6 A_{33} + \varphi_5 A_{34} + \varphi_5 A_{21} + \varphi_6 A_{22} + \varphi_9 A_{23} + \varphi_8 A_{24} = 0, [6] \\
\varphi_4 A_{41} + \varphi_5 A_{42} + \varphi_8 A_{43} + \varphi_7 A_{44} = 0, [7] \\
\varphi_5 A_{41} + \varphi_6 A_{42} + \varphi_9 A_{43} + \varphi_8 A_{44} + \varphi_4 A_{31} + \varphi_5 A_{32} + \varphi_8 A_{33} + \varphi_7 A_{34} = 0, [8] \\
\varphi_5 A_{31} + \varphi_6 A_{32} + \varphi_9 A_{33} + \varphi_8 A_{34} = 0, [9]
\end{array}$$

luego, al suponer que se conoce el valor de la variable principal en las fronteras, por lo que los valores en los nodos 1,2,3,4,6,7,8 y 9 son conocidos, entonces se elimina la ecuación correspondiente a cada nodo y al final se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \varphi_1 A_{31} + \varphi_2 (A_{32} + A_{41}) + \varphi_3 A_{42} + \varphi_4 (A_{34} + A_{21}) + \varphi_5 (A_{11} + A_{22} + A_{33} + A_{44}) \\
& + \varphi_6 (A_{43} + A_{12}) + \varphi_7 A_{24} + \varphi_8 (A_{23} + A_{14}) + \varphi_9 A_{13} = 0.
\end{aligned} \tag{33}$$

### 2.6.3. Funciones de interpolación $\gamma_j^e$ y coeficientes $\varphi_j^e$

Si se considera la siguiente aproximación

$$\varphi^e(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy,$$

es posible calcular  $\varphi^e(x, y)$  en los nodos, es decir en los puntos 1 al 4.

Al considerar el siguiente esquema

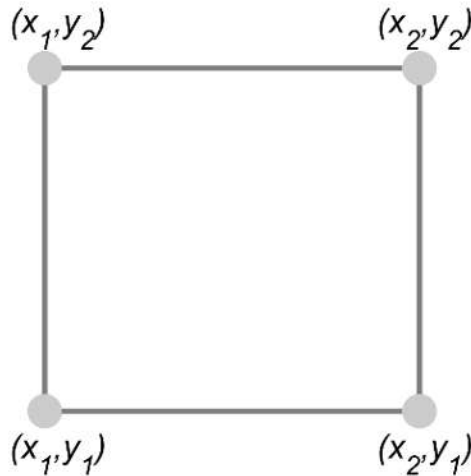


Figura 2. Esquema para un elemento bilineal

se obtiene el siguiente arreglo matricial

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1y_1 \\ 1 & x_2 & y_1 & x_2y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2y_2 \\ 1 & x_1 & y_2 & x_1y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix},$$

que al resolver es posible identificar las funciones de interpolación,  $\gamma_j^e$ , de la solución aproximada,  $\varphi^e(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \varphi_j^e \gamma_j^e(\vec{x})$ , necesarias para estos elementos:

$$\gamma_1 = \frac{1}{\Delta x \Delta y} [(y_2 - y)(x_2 - x)],$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{\Delta x \Delta y} [(y_2 - y)(x - x_1)],$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{\Delta x \Delta y} [(y_1 - y)(x_1 - x)],$$

$$\gamma_4 = \frac{1}{\Delta x \Delta y} [(y_1 - y)(x - x_2)].$$

## 2.6.4. Ejemplo de una región rectangular con nueve nodos para evaluar la estabilidad

De la sección anterior se tiene que

$$A_{ij} = u \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \phi_i d\Omega + v \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \phi_i d\Omega + K_1 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} d\Omega + K_2 \int_{\Omega} \frac{\partial \gamma_j^e}{\partial y} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} d\Omega,$$

y al utilizar las funciones de interpolación ya mencionadas en la expresión (33), se llega a que

$$\begin{aligned} A_{31} &= -u \frac{\Delta y}{12} - v \frac{\Delta x}{12} - \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [K_2(\Delta x)^2 + K_1(\Delta y)^2], \\ A_{32} + A_{41} &= -v \frac{\Delta x}{3} + \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [2K_1(\Delta y)^2 - 4K_2(\Delta x)^2], \\ A_{42} &= u \frac{\Delta y}{12} - v \frac{\Delta x}{12} - \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [K_2(\Delta x)^2 + K_1(\Delta y)^2], \\ A_{34} + A_{21} &= -u \frac{\Delta x}{3} + \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [2K_2(\Delta x)^2 - 4K_1(\Delta y)^2], \\ A_{11} + A_{22} + A_{33} + A_{44} &= \frac{1}{3\Delta x \Delta y} [4K_2(\Delta x)^2 + 4K_1(\Delta y)^2], \\ A_{43} + A_{12} &= u \frac{\Delta x}{3} + \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [2K_2(\Delta x)^2 - 4K_1(\Delta y)^2], \\ A_{24} &= -u \frac{\Delta y}{12} + v \frac{\Delta x}{12} - \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [K_2(\Delta x)^2 + K_1(\Delta y)^2], \\ A_{23} + A_{14} &= v \frac{\Delta x}{3} + \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [2K_1(\Delta y)^2 - 4K_2(\Delta x)^2], \\ A_{13} &= u \frac{\Delta y}{12} + v \frac{\Delta x}{12} - \frac{1}{6\Delta x \Delta y} [K_2(\Delta x)^2 + K_1(\Delta y)^2]. \end{aligned}$$

Entonces la aproximación por el método de Galerkin de elemento finito es

$$\begin{aligned} &\frac{u}{12\Delta x} [(\varphi_3 - \varphi_1) - 4(\varphi_6 - \varphi_4) + (\varphi_9 - \varphi_7)] \\ &\quad + \frac{v}{12\Delta y} [(\varphi_7 - \varphi_1) + 4(\varphi_8 - \varphi_2) + (\varphi_9 - \varphi_3)] \\ &\quad - \frac{K_1}{6(\Delta x)^2} [(\varphi_3 - 2\varphi_2 + \varphi_1) + 4(\varphi_4 - 2\varphi_5 + \varphi_6) - (\varphi_7 - 2\varphi_8 + \varphi_9)] \\ &\quad - \frac{K_2}{6(\Delta y)^2} [\varphi_1 - 2\varphi_4 + \varphi_7) + 4(\varphi_2 - 2\varphi_5 + \varphi_8) - (\varphi_3 - 2\varphi_6 + \varphi_9)]. \end{aligned} \tag{34}$$

## 2.6.5. Análisis de estabilidad

De manera general la aproximación de (1) en elementos finitos para un arreglo de nueve puntos en una malla regular es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 & \varphi_5 + \frac{u}{2\Delta x(2 + \epsilon)} [((\varphi_3 - \varphi_1) - \epsilon(\varphi_6 - \varphi_4) + (\varphi_9 - \varphi_7))] \\
 & + \frac{v}{2\Delta y(2 + \epsilon)} [(\varphi_7 - \varphi_1) + \epsilon(\varphi_8 - \varphi_2) + (\varphi_9 - (\varphi_3))] \\
 & - \frac{K_1}{2(\Delta x)^2(2 + \epsilon)} [(\varphi_3 - 2\varphi_2 + \varphi_1) + \epsilon(\varphi_4 - 2\varphi_5 + \varphi_6) - (\varphi_7 - 2\varphi_8 \\
 & + \varphi_9)] \\
 & - \frac{K_2}{2(\Delta y)^2(2 + \epsilon)} [\varphi_1 - 2\varphi_4 + \varphi_7) + \epsilon(\varphi_2 - 2\varphi_5 + \varphi_8) - (\varphi_3 - 2\varphi_6 + \varphi_9)] \\
 & + \frac{K_{12}}{2\Delta x\Delta y} (\varphi_9 - \varphi_7 + \varphi_1 - \varphi_3),
 \end{aligned} \tag{35}$$

donde  $\epsilon$  puede ser 4 o  $\infty$ . La aproximación (34) de la sección anterior corresponde a  $\epsilon = 4$  al utilizar el método de Galerkin de elemento finito. Mientras que con  $\epsilon = \infty$  (y sin considerar el término cruzado de difusión) se recupera el arreglo de diferencias finitas FTCS (10).

Con base en el trabajo de Hindmarsh et al. (1984), el análisis de estabilidad tanto del esquema (34) como para el esquema (10), se obtiene al considerarlos como un caso particular de (34), en donde, las condiciones necesarias y suficientes de estabilidad son:

$$\alpha_2 \leq 1,$$

y

$$C_1^2 + C_2^2 \leq 1,$$

de donde se puede observar que este esquema es más estable que el esquema FTCS, donde se requería que  $\alpha_1 + \alpha_2 \leq 1$  y  $\frac{C_1^2}{\alpha_1} + \frac{C_2^2}{\alpha_2} \leq 1$ . Por lo tanto, el esquema propuesto por el método de elementos finitos es también estable.

## 3.PROBLEMA INVERSO

En secciones anteriores se hizo la suposición (de manera implícita) de que se cuentan con todos los parámetros necesarios y adecuados para resolver el problema de la ecuación de transporte. Sin embargo, obtener datos o mediciones de ciertas variables no resulta tan sencillo, por lo que ahora la motivación en este capítulo es la de resolver el problema inverso para estimar algunos parámetros que se requieren para solucionar el problema de la ecuación de transporte, además requerir que estos sean óptimos para que tengan la suficiente precisión y permitan encontrar una representación válida de la realidad.

En este capítulo se introduce y se hace una breve descripción de problema inverso, la formulación matemática y las técnicas que se utilizan para resolverlos.

### 3.1.El problema inverso

Los problemas inversos tienen grandes aplicaciones de carácter médico, industrial, geofísico, ecológico, económico, entre otros (Domínguez-Mota et al., 2020; Hasanoğlu & Romanov, 2017; Kabanikhin, 2008; Nocedal & Wright, 2006).

Una de las características más importantes sobre este tema es comprender que los problemas inversos se pueden describir como problemas donde se conoce la respuesta, pero no la pregunta, o donde se conocen los resultados/consecuencias, pero no la causa, es decir, donde se pueden hacer deducciones acerca de un sistema a partir de algunos datos u observaciones.

Estos problemas se pueden clasificar como:

- De identificación de coeficientes, es decir, problemas en los que los coeficientes de la ecuación se desconocen.
- De frontera, es decir, problemas relacionados con la determinación de parámetros desconocidos en las condiciones de frontera.
- Geométricos, es decir, problemas que se relacionan con la determinación de dominios desconocidos.
- De retrospectiva, es decir, problemas con dirección inversa en el tiempo.

A continuación, se mencionan algunos ejemplos típicos (Isakov, 2017; Kirsch, 2011; Richter, 2016).

**Ejemplo 1.** Encontrar el polinomio  $p(x)$  de grado  $n$  con los ceros o raíces dadas  $x_1, \dots, x_n$ . La solución al problema inverso es simplemente  $p(x) = c(x - x_1) \dots (x - x_n)$ ,  $c \in \mathbb{R}$ . El problema directo correspondiente sería, encuentra los ceros o raíces  $x_1, \dots, x_n$  del polinomio dado.

**Ejemplo 2.** Tomografía. Considerar un plano fijo a través del cuerpo humano: sea  $\rho(x, y)$  el cambio en la densidad en el punto  $(x, y)$ . Suponga que un haz delgado de rayos-X está apuntando al cuerpo a lo largo de la línea  $L$  del plano, y mide cuanta intensidad se atenúa a través del cuerpo. El problema inverso consiste en determinar la densidad  $\rho$  dada la atenuación de la intensidad a lo largo de las integrales de línea.

**Ejemplo 3.** Problema de eigenvalores Sturm-Liouville. Sea  $a$  una cuerda de longitud  $L$  y densidad de masa  $\rho = \rho(x)$ ,  $0 \leq x \leq L$ , con puntos fijos en los extremos  $x = 0$  y  $x = L$ . Jalar o pulsar la cuerda produce vibraciones. Sea  $v(x, t)$ ,  $t > 0$  el desplazamiento en  $x$  al tiempo  $t$ . Considere un desplazamiento de la forma  $v(x, t) = \omega(x)(a \cos(\omega t) + b \sin(\omega t))$ . En el problema inverso se intenta determinar la densidad de masa  $\rho$  a partir de las frecuencias medidas  $\omega$ .

Para poder plantear un problema inverso es necesario relacionar los parámetros de un sistema con las mediciones u observaciones, en este sentido al suponer conocidas las leyes o procesos físicos que gobiernan el sistema, es posible definir un operador  $f$  que relacione los parámetros  $x$  del modelo con los datos experimentales  $y$ , que pueden ser de naturaleza continua o discreta.

De manera general al resolver cualquier problema inverso, surgen tres interrogantes o tres propiedades que se deben cumplir: ¿existe la solución?, ¿es única? y ¿es estable?

Se dice que un problema está bien condicionado (en el sentido de Hadamard), si se cumplen estas tres propiedades (Nocedal & Wright, 2006):

1. Existe una solución al problema (existencia).
2. Hay como máximo una solución al problema (unicidad).
3. La solución depende continuamente de los datos (estabilidad).

Matemáticamente, la existencia de una solución se puede reforzar ampliando el espacio de la solución. Si un problema tiene más de una solución, entonces falta información acerca del modelo. Si un problema carece de la propiedad de estabilidad, entonces la solución al problema es casi imposible de calcular debido a que cualquier medición o cálculo computacional estará contaminado por errores inevitables. Si la solución al problema no depende de manera continua de los datos, en general la solución calculada no tiene nada que ver con la solución verdadera. Esta falta de continuidad en la solución se traduce en que pequeños errores existentes en las mediciones generan grandes errores en el modelo (Kirsch, 2011; Richter, 2016).

### **3.1.1. Identificación de parámetros**

Los problemas de identificación de parámetros consisten en utilizar como entrada datos observacionales o mediciones indirectas con datos contaminados (ruido), para encontrar los valores de estos parámetros que caracterizan el sistema bajo investigación. En algunas ocasiones los problemas inversos están mal condicionados en el sentido de Hadamard ya que la mayoría de los problemas de identificación satisfacen las dos primeras condiciones, pero no cumplen la tercera condición que es la de estabilidad.

Al resolver un problema inverso se pueden aplicar dos enfoques diferentes. Una estrategia es primero optimizar que discretizar y la otra estrategia es primero discretizar que optimizar. Por ejemplo, para los problemas inversos de fenómenos que describen el transporte de sustancias dado por la ecuación (1), el problema resultante es un problema mal condicionado que no se puede resolver al menos que se regularice adecuadamente. La regularización es el proceso de agregar información como la elección de parámetros o suavizar la solución. La regularización de problemas mal condicionados se puede abordar mediante el método de regularización de Tikhonov. (Hanke & Hansen, 1993; Isakov, 2017; Karalashvili et al., 2008, 2011; Kirsch, 2011).

Algunos de los métodos propuestos son una generalización de métodos que se han aplicado a problemas de difusión y transferencia de calor. Las condiciones o

coeficientes desconocidos se remplazan por una función constante que hace que el problema resultante sea posible de resolver analíticamente y se puedan estimar los coeficientes al comparar con valores experimentales y teóricos mediante el método de mínimos cuadrados.

Otro punto que también es importante mencionar es el conocimiento del problema, ya que en ocasiones las matemáticas no son suficientes, por ejemplo, obtener valores razonables para los parámetros y reconocer o detectar cuales pueden tener cierto error, puede ayudar a determinar la falta de algún mecanismo importante en el modelo o el sistema. En estos casos, conocer el problema y la habilidad para identificar rangos típicos de los valores de los parámetros o variables es una herramienta invaluable (Chapra, 1997; Forsythe, 1970).

### 3.1.2. Problema no lineal de mínimos cuadrados

En esta sección se consideran algunos métodos para resolver problemas no lineales de mínimos cuadrados. Estos problemas surgen en el contexto de ajustar un modelo matemático parametrizado a un conjunto de datos para minimizar una función objetivo  $f$  que se puede expresar como:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m r_i(\mathbf{x})^2, \quad (36)$$

donde cada  $r_i$  es una función suave de  $\mathbb{R}^n$  a  $\mathbb{R}$ . Este problema de minimizar surge de hacer un ajuste por mínimos cuadrados, donde la función  $f(\mathbf{x})$  mide la discrepancia entre el modelo y las observaciones, es decir,  $r_i$  son los residuos.

Por ejemplo, supóngase que se tienen los datos  $(t_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$  y se quiere ajustar una curva  $F(t)$  para encontrar por ejemplo algunos parámetros  $\mathbf{x}$  que minimicen

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (y_i - F(t_i))^2, \quad (37)$$

este problema se puede formular como (36), donde se busca minimizar  $f$  con residuos

$$r_i(\mathbf{x}) = r_i(x_1, \dots, x_n) = y_i - F(t_i).$$

### 3.1.3. Método de Newton

Aunque existen una gran cantidad de métodos de optimización, la mayoría tienen la misma estructura, es decir el método de Newton. Este método se basa en realizar una expansión en series de Taylor hasta el término cuadrático, mediante el cual se puede minimizar una función  $f$ , con  $\nabla f = 0$ , lo que resulta en el siguiente proceso iterativo:

$$x^{k+1} = x^k - (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k). \quad (38)$$

O reordenado de la siguiente manera:

$$x^{k+1} = x^k + p^k,$$

con (39)

$$p^k = -(\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k),$$

donde  $p^k$  es la dirección de búsqueda del método de Newton. Se dice que es una dirección de descenso si y solo si  $\nabla^2 f(x^k)$  es definida positiva. Sin embargo, la dirección  $p^k$  puede no ser descendente ya que no hay certeza de que se cumpla la condición:

$$\nabla f(x^k)^T p^k < 0, \quad (40)$$

ya que es posible que  $f(x^{(k+1)}) > f(x^{(k)})$ . Esto puede ocurrir si el punto inicial está lejos de la solución. Por lo que una de las desventajas del método de Newton es la

convergencia local, ya que el punto inicial no puede ser arbitrario para que el método converja y la dirección  $p^k$  sea de descenso.

Otro de los inconvenientes que surgen al utilizar el método de Newton es que es necesario calcular segundas derivadas, lo que puede resultar lento y costoso computacionalmente. Una manera de mejorar estas desventajas que se presentan con el método es utilizar el método de Gauss-Newton.

### 3.1.4. Método de Gauss-Newton

El método de Gauss-Newton es simplemente una modificación o aproximación del método de Newton aplicado a funciones  $f$  que son de la forma (36), de tal manera que se minimice la función a partir de (39), por lo que se requiere de  $\nabla^2 f(x^k)$ , el hessiano, así como de  $\nabla f(x^k)$ , el jacobiano.

Al derivar (36) con respecto a  $x_j$  se obtiene que

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial r_i}{\partial x_j} r_i, \quad (41)$$

y como

$$J = \left[ \frac{\partial r_i}{\partial x_j} \right]_{\substack{i=1,\dots,m \\ j=1,\dots,n}}, \quad (42)$$

donde  $J \in \mathbb{R}^{m,n}$  es el jacobiano de  $\mathbf{r}$ , entonces el gradiente de  $f$  será

$$\nabla f = J^T \mathbf{r}, \quad (43)$$

donde  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_m)^T$ .

Al derivar nuevamente con respecto a  $x_l$  se tiene que

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_l} = \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial r_i}{\partial x_j} \frac{\partial r_i}{\partial x_l} + r_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_l} \right),$$

el cual se puede describir de la siguiente manera

$$\nabla^2 f = J^T J + Q,$$

con

$$Q = \sum_{i=1}^m r_i \nabla^2 r_i.$$

(44)

De esta manera, el método de Gauss-Newton resulta de quitar el término  $Q$  a la matriz hessiana, es decir considerar la aproximación

$$\nabla^2 f \approx J^T J. \quad (45)$$

Por lo tanto, el método de Gauss-Newton es:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J_k^T J_k)^{-1} J_k^T r_k,^1$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J_k^T J_k)^{-1} J_k^T r_k,$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}, \quad (46)$$

donde

$$p^{(k)} = -(J_k^T J_k)^{-1} J_k^T r_k.$$

En general el método de Gauss-Newton converge localmente a un punto estacionario, pero si los elementos de  $Q$  son pequeños conforme se aproxima al

---

<sup>1</sup> $J_k = J(x^{(k)})$  y  $r_k = r(x^{(k)})$

mínimo, se puede esperar una convergencia rápida. Este sería el caso cuando algún  $r_i$  o la derivada parcial de segundo orden sean pequeños conforme se aproxima al mínimo.

Como se acaba de obtener, una de las ventajas de este método es que no se requiere calcular la segunda derivada y que la dirección de búsqueda siempre es en dirección descendente (siempre y cuando  $J_k$  sea de rango completo), esto debido a que  $J_k^T J_k$  es semi definida positiva, lo que implica que  $(J_k^T J_k)^{-1}$  también lo es, lo que significa que

$$\nabla f(x^{(k)})^T p^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})^T (J_k^T J_k)^{-1} \nabla f(x^{(k)}) \leq 0. \quad (47)$$

Si  $J_k$  es de rango completo esta desigualdad se vuelve estricta. Pero no hay certeza de que el método de Gauss-Newton converja. En general lo que se sugiere hacer es incorporar un tamaño de paso (longitud de paso)  $\alpha^{(k)}$  en la iteración:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} p^{(k)},$$

y utilizar alguna de las condiciones como las de Armijo y Wolf para asegurar que la dirección sea descendente en cada iteración (Nocedal & Wright, 2006).

Para la mayoría de los casos de problemas de mínimos cuadrados no lineales el método de Gauss-Newton no es el adecuado ya que no converge de manera global, es decir el jacobiano esta mal condicionado y la dirección de búsqueda se vuelve muy grande o no esta definida. Para asegurar la convergencia global es necesario regularizar el problema original, es decir, redefinir  $p^{(k)}$  como la solución del problema de optimización y utilizar el método de Levenberg-Marquardt (Gill & Murray, 1978; Nocedal & Wright, 2006).

### 3.1.5. Método de Levenberg-Marquardt

El método de Levenberg-Marquardt se puede obtener al utilizar la misma aproximación de Gauss-Newton del hessiano, pero en vez de utilizar la búsqueda en línea (búsqueda lineal), se utiliza la estrategia de una región de confianza (trust region). Al usar la región de confianza se evita una de las desventajas de Gauss-

Newton cuando el Jacobiano se dice que es de rango deficiente (Nocedal & Wright, 2006).

Un método de región de confianza al igual que los métodos de búsqueda en línea generan sus pasos con la ayuda de un modelo cuadrático basado en la expansión de series de Taylor de la función objetivo, pero de manera distinta. Los métodos de búsqueda en línea utilizan este modelo para generar una dirección de búsqueda y se enfocan en encontrar un tamaño de paso adecuado a lo largo de esta dirección. Los métodos de región de confianza definen una región alrededor de la iteración actual dentro de la cual se *confía* que el modelo es una representación adecuada de la función objetivo y elige el paso como un minimizador aproximado del modelo en la región de confianza.

El método de **Levenberg-Marquardt** combina dos algoritmos de minimización, el método de descenso del gradiente y el método de Gauss-Newton. En el método de descenso del gradiente, la suma de los errores cuadráticos se reduce al actualizar los parámetros en la dirección de descenso más pronunciada. Mientras que en el de Gauss-Newton, la suma de los errores cuadráticos se reduce al suponer que la función de mínimos cuadrados es localmente cuadrática y encuentra el mínimo de ésta. El método de Levenberg-Marquardt funciona más como un método de descenso del gradiente cuando los parámetros se encuentran lejos del valor óptimo, y funciona como el método Gauss-Newton cuando los parámetros se encuentran cercanos al valor óptimo (Croaze et al., 2012; Gavin, 2019; Gill & Murray, 1978; Lourakis, 2005; Nocedal & Wright, 2006).

Para una región de confianza esférica, el subproblema a resolver (es decir, la optimización de  $p^{(k)}$ ) en cada iteración es

$$\min_{p^{(k)}} \frac{1}{2} \|J_k p^{(k)} + r_k\|^2, \quad \text{con la restricción} \quad \|p^{(k)}\| \leq \Delta_k, \quad (48)$$

con  $\Delta_k > 0$  el radio de la región de confianza, donde se define la función  $m_k$  como:

$$m_k(p^{(k)}) = \frac{1}{2} \|r_k + J_k p^{(k)}\|^2 + p^{(k)T} J_k^T r_k + \frac{1}{2} p^{(k)T} J_k^T J_k p^{(k)}. \quad (49)$$

(se quitará el contador  $k$  para el resto de la sección)

Cuando la solución  $p_{GN}$  (GN: Gauss-Newton) de las ecuaciones de Gauss-Newton se encuentra estrictamente dentro de la región de confianza ( $\|p_{GN}\| < \Delta$ ), entonces el paso  $p_{GN}$  también resuelve el problema (48). De lo contrario, existe un  $\lambda > 0$  tal que la solución  $p_{LM}$  (LM: Levenberg-Marquardt) de (48) cumple que  $\|p_{LM}\| = \Delta$ , y

$$(J^T J + \lambda I)p = -J^T r, \quad (50)$$

donde  $\lambda$  es el multiplicador de Lagrange correspondiente a  $\Delta$ . El parámetro  $\lambda$  se tiene que encontrar de manera iterativa y para reducir costos computacionales se han desarrollado variantes de (46), que buscan una solución para  $p$  en un subespacio bidimensional (Branch et al., 1999).

La expresión anterior (50) se verifica mediante el siguiente lema que menciona que si el vector  $p_{LM}$  es solución del subproblema de la región de confianza

$$\min_p \|Jp + r\|^2, \text{ con la restricción } \|p\| \leq \Delta,$$

esto se cumple si y solo si  $p_{LM}$  satisface la restricción y existe un escalar  $\lambda \geq 0$  tal que

$$\begin{aligned} (J^T J + \lambda I)p^{LM} &= -J^T r, \\ \lambda(\Delta - \|p^{LM}\|) &= 0. \end{aligned} \quad (51)$$

$(J^T J + \lambda I)$  es semidefinida positiva.

Las ecuaciones de (50) son las ecuaciones normales para el problema de mínimos cuadrados de:

$$\min_p \frac{1}{2} \left\| \begin{bmatrix} J \\ \sqrt{\lambda} I \end{bmatrix} p + \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (52)$$

La equivalencia de (50) y (52) da una manera de resolver el problema sin tener que calcular el producto  $J^T J$ . Para encontrar el valor de  $\lambda$  que se aproxime al  $\Delta$  dado, se pueden utilizar diferentes métodos para encontrar raíces (Nocedal & Wright, 2006).

### 3.1.6. Rutina `lsqnonlin` (nonlinear least-squares)

Los algoritmos de optimización que se mencionaron anteriormente se pueden implementar en el software de Matlab ya que este cuenta con la paquetería de optimización que tiene integrada la función `lsqnonlin`, que implementa un algoritmo de región de confianza para resolver problemas no lineales de mínimos cuadrados (36). A continuación, se dará una breve descripción de la paquetería.

El comando de optimización que minimiza la función objetivo se define de la siguiente manera

$$x = \text{lsqnonlin}(\text{fun}, x_0, \text{lb}, \text{ub}),$$

donde la función objetivo, `fun`, debe tener los parámetros del modelo y los datos experimentales. Esta función muestra el error del modelo tomando como referencia los datos experimentales que se define como:

$$\min_x \|r(x)\|_2^2 = \min_x \left( \sum_{i=1}^n r_i^2(x) \right).$$

El comando `lsqnonlin` encuentra un mínimo para la suma de los cuadrados de la función descrita en `fun`. Los parámetros `lb`, `ub` definen los límites inferior y superior, por lo que la solución puede acotarse en el rango de  $\text{lb} \leq x \leq \text{ub}$ , y `x0` representa el punto inicial. Una opción es dejar los valores de `lb` y `ub` como vectores vacíos para que no existan cotas.

Esta rutina permite elegir el algoritmo de confianza-región-reflectante (trust-region-reflective) por default que es un subespacio del método de región de confianza basado en el método de Newton (interior-reflective Newton) o también se puede utilizar el método de Levenberg-Marquardt (Coleman et al., 2008; Coleman & Li, 1994, 1996; Moré, 1978; Nocedal & Wright, 2006; Richter, 2016).

### 3.1.7. Ejemplo de aplicación de la rutina lsqnonlin

A continuación, se presenta un ejemplo donde se considera una serie de datos  $(\eta_i, \zeta_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , correspondientes a los valores en la frontera de la concentración de un trazador, a los que se les desea ajustar una elipse como se muestran en la Figura 3.

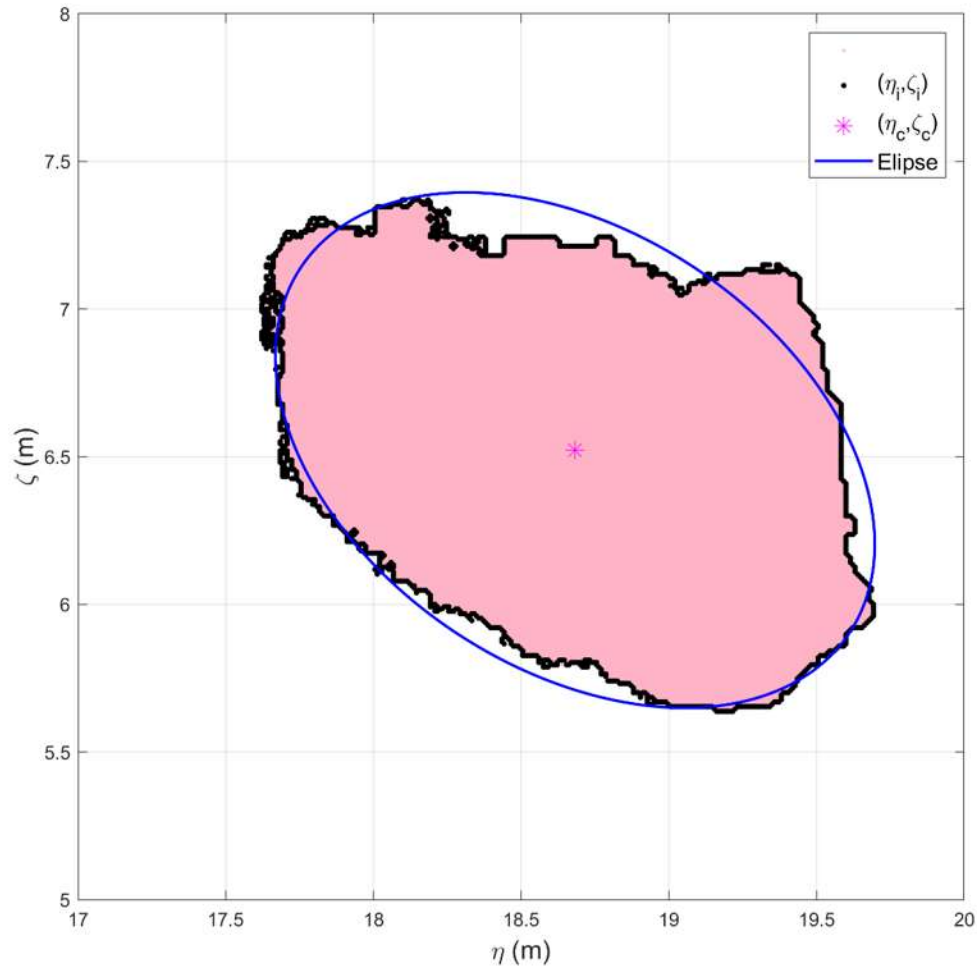


Figura 3. Elipse óptima para el conjunto de datos  $(\eta_i, \zeta_i)$ .

En este caso, lo que se desea es que mediante el método de mínimos cuadrados se encuentren los parámetros óptimos  $(x_1, x_2)$ , de tal manera que los puntos  $(\eta_i, \zeta_i)$ , se ajusten adecuadamente a la elipse cuya función es

$$\frac{((\eta - \eta_c)\cos\theta + (\zeta - \zeta_c)\text{sen}\theta)^2}{(x_1 \cdot \sigma_{ma})^2} + \frac{((\eta - \eta_c)\text{sen}\theta - (\zeta - \zeta_c)\cos\theta)^2}{(x_2 \cdot \sigma_{mi})^2} = 1,$$

con centro en  $(\eta_c, \zeta_c)$ , un ángulo de rotación  $\theta$  y varianzas del eje menor y mayor de la elipse dados por  $\sigma_{ma}$  y  $\sigma_{mi}$ , respectivamente.

De este modo el error  $r_i$  debido a cada punto está dado por:

$$r_i = 1 - \frac{((\eta_i - \eta_c)\cos\theta + (\zeta_i - \zeta_c)\text{sen}\theta)^2}{(x_1 \cdot \sigma_{ma})^2} - \frac{((\eta_i - \eta_c)\text{sen}\theta - (\zeta_i - \zeta_c)\cos\theta)^2}{(x_2 \cdot \sigma_{mi})^2},$$

por lo que la función  $f(x)$  a minimizar será:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \left( 1 - \frac{((\eta_i - \eta_c)\cos\theta + (\zeta_i - \zeta_c)\text{sen}\theta)^2}{(x_1 \cdot \sigma_{ma})^2} - \frac{((\eta_i - \eta_c)\text{sen}\theta - (\zeta_i - \zeta_c)\cos\theta)^2}{(x_2 \cdot \sigma_{mi})^2} \right)^2,$$

con base en los dos parámetros  $(x_1$  y  $x_2)$ .

Para resolver este problema con ayuda de la paquetería de optimización lsqnonlin, se programa:

```
x = lsqnonlin(r, [0.1, 0.1], [], [], options),
```

donde

$$r = @(x) 1 - ((\eta - \eta_c)\cos\theta + (\zeta - \zeta_c)\text{sen}\theta)/(x(1) * \sigma_{ma}).^2 - ((\eta - \eta_c)\text{sen}\theta - (\zeta - \zeta_c)\cos\theta)/(x(2) * \sigma_{mi}).^2$$

Con los options dados por:

```
% options = optimset('Display','iter',...
%               'Algorithm','levenberg-marquardt',...
```

```
% 'TolFun',1e-16,'TolX',1e-16,...  
% 'FinDiffRelStep',1e-2);
```

De esta manera se obtienen los parámetros óptimos  $x_1$  y  $x_2$  para ajustar la mejor elipse. Nótese que  $\eta$  y  $\zeta$  son los vectores que contienen todos los puntos y por lo tanto  $r$  es el vector de todos los errores. La instrucción `lsqnonlin` de manera implícita calcula la suma de los componentes de  $r$ , es decir, crea la función  $f(x)$ ; comienza en este caso en el punto 0.1 para ambas incógnitas e internamente realiza el desarrollo basado en el algoritmo de Levenberg-Marquardt.

## 4.PROBLEMAS INVERSOS PARA LA ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS FÍSICOS EN EL LAGO DE ZIRAHUÉN

En esta sección se resuelven dos problemas inversos para la estimación de parámetros físicos en el Lago de Zirahuén a partir del análisis de imágenes de un experimento con un trazador.

Primero se inicia con el problema de la estimación de la concentración del trazador, en la cual se hace una aproximación del área mediante un círculo y después se aplica el problema inverso para obtener los parámetros óptimos para ajustar una elipse que representa mejor el área de la concentración (ver sección anterior).

Después se resuelve otro problema inverso, pero ahora aplicado a la ecuación de transporte para obtener los coeficientes de difusión óptimos para el Lago de Zirahuén. Este problema matemático consistió en discretizar la ecuación de transporte bidimensional por el método de elementos finitos (2.6.Método de elementos finitos) y después plantear un problema de optimización de mínimos cuadrados no lineales para la resolución de problemas inversos (cap. 3.PROBLEMA INVERSO).

## 4.1. Experimento de trazador y el problema inverso para estimar la concentración

Emplear imágenes para estudiar la dinámica y el transporte de los fluidos no es algo reciente (Bezerra et al., 2009; Lawrence et al., 1995). Existe una amplia gama de estudios para monitorear cuerpos de agua y así comprender el transporte de sustancias para conocer el destino y/o distribución de dichos elementos. El uso de experimentos de trazador y la información que se puede obtener de éstos se utiliza para proporcionar mapas espaciales y temporales de la distribución de la concentración de sustancias, por ejemplo, afloramientos algales, descargas de residuos, transporte y destino de micro-plásticos, etc. Además, pueden servir para alimentar modelos matemáticos que simulen el transporte para la determinación de parámetros mediante la resolución de problemas inversos.

Los experimentos de trazadores se utilizan para comprender cómo es la distribución y dispersión de contaminantes (Li De-Sheng, 2015; Powers et al., 2018). En un cuerpo de agua esta distribución puede ser debida a escorrentías o a descarga de aguas residuales y pueden tener afectaciones tanto ecológicas como de salud. Aunque existe una gran variedad de técnicas que se utilizan para tratar de comprender o predecir cómo se transportan o dispersan estos contaminantes, muchas de estas técnicas pueden ser costosas, tardadas o difíciles de implementar en lugares remotos.

Debido a que la difusión no se puede medir directamente salvo con equipos altamente sofisticados que midan escalas turbulentas, en este estudio se realizó un experimento con un trazador en el Lago de Zirahuén durante julio 2018, donde se llevó a cabo la liberación de colorante natural y se utilizó un dron DJI Phantom 4 (DJI, Shenzhen, China) para grabar en video e imágenes la distribución de colorante Figura 4. La captura de video, de aproximadamente 5 minutos de duración, se realizó a aproximadamente 50 m de altura. Las características de cada video presentan un ancho y alto de fotograma de 3840 y 2160 pixeles, respectivamente, y una velocidad de 30 fotogramas/seg. Se consideraron imágenes cada 40 segundos.

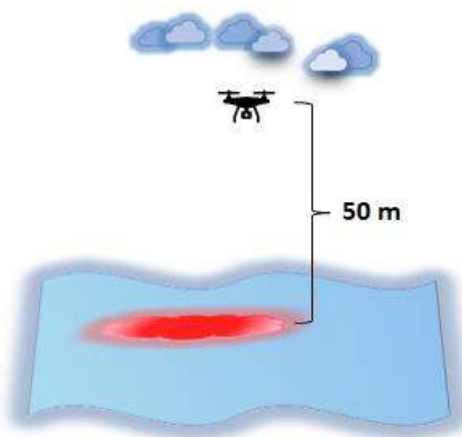


Figura 4. Esquema de experimento de trazador.

Mediante técnicas de procesamiento de imágenes y video se manipularon los componentes de color de las imágenes ajustando los niveles de rojo, verde y azul (RGB) para aumentar el contraste de la distribución de colorante (Figura 5). Posteriormente se creó una máscara de segmentación donde se transforman los colores y se trabajó con la imagen binaria.

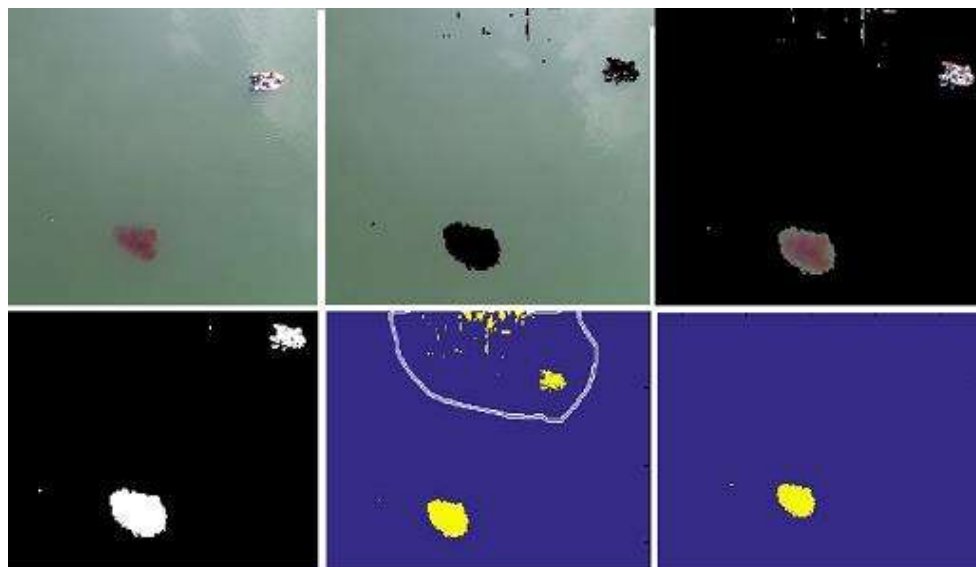


Figura 5. Procesamiento de imágenes.

Para evaluar la extensión del colorante se estimó la distribución del área utilizando dos aproximaciones. En la primera se consideró que la región del colorante se podría aproximar mediante un círculo equivalente al área de la región del colorante  $C_c$  (Concentración de círculo), mientras que, en la otra aproximación, la extensión del colorante se estimó mediante una elipse  $C_e$  (concentración de la elipse).

Para el caso del círculo, la manera de representar el área de cada región es con el número total de píxeles. Para esto se tomaron en cuenta las dimensiones de una boya de referencia (de dimensiones conocidas de  $15 \times 8 \text{ cm}^2$ ) que se utilizó para señalar el punto de la liberación del colorante. Por ejemplo, el área de la primera y última imagen fue de  $0.63 \text{ m}^2$  y de  $17.71 \text{ m}^2$ , respectivamente, de donde se puede calcular el radio equivalente a partir de  $A = \pi R^2$ , es decir, la primera y última imagen se puede caracterizar mediante un radio de  $0.44 \text{ m}$  y de  $2.37 \text{ m}$ , respectivamente.

El segundo caso, consistió en proponer una elipse que se ajustara a los datos ya que la propagación natural del trazador se caracteriza mejor mediante esta forma. Para el ajuste de la elipse primero fue necesario encontrar el centro y orientación de los datos, y después mediante el problema inverso se determinó la longitud óptima del eje mayor y menor (ver Figura 3 de la sección anterior).

Para obtener los parámetros de la elipse, primero considérese  $(\eta_i, \zeta_i), i = 1, 2, \dots, n$  los puntos frontera de la región. Entonces el centro geométrico  $(\eta_c, \zeta_c)$  se define como:

$$\eta_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_i, \quad \zeta_c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \zeta_i, \quad (53)$$

y las varianzas:

$$\sigma_\eta^2 = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (\eta_c - \eta_i)^2; \quad \sigma_\zeta^2 = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (\zeta_c - \zeta_i)^2, \quad (54)$$

y la covarianza como:

$$\sigma_{\eta\zeta} = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (\eta_c - \eta_i) \cdot (\zeta_c - \zeta_i), \quad (55)$$

por lo que la orientación de los ejes principales se determina por:

$$\theta_i = \frac{1}{2} \tan^{-1}(2\sigma_\eta^2 \sigma_\zeta^2 / \sigma_\eta^2 - \sigma_\zeta^2), \quad (56)$$

y la varianza en la dirección del eje mayor y menor por:

$$\begin{aligned} \sigma_{ma}^2 &= \frac{\sigma_\eta^2 + \sigma_\zeta^2}{2} + \sqrt{\frac{(\sigma_\eta^2 + \sigma_\zeta^2)^2}{4} - \sigma_\eta^2 \sigma_\zeta^2 + \sigma_{\eta\zeta} \sigma_{\eta\zeta}}, \\ \sigma_{mi}^2 &= \frac{\sigma_\eta^2 + \sigma_\zeta^2}{2} - \sqrt{\frac{(\sigma_\eta^2 + \sigma_\zeta^2)^2}{4} - \sigma_\eta^2 \sigma_\zeta^2 + \sigma_{\eta\zeta} \sigma_{\eta\zeta}}. \end{aligned} \quad (57)$$

Entonces para calcular la longitud óptima del eje mayor ( $x_1 \cdot \sigma_{ma}$ ) y del eje menor ( $x_2 \cdot \sigma_{mi}$ ), se considera la ecuación de la elipse con centro en  $(\eta_c, \zeta_c)$  y rotada un ángulo  $\theta$ :

$$\frac{((\eta - \eta_c)\cos\theta + (\zeta - \zeta_c)\sen\theta)^2}{(x_1 \cdot \sigma_{ma})^2} + \frac{((\eta - \eta_c)\sen\theta - (\zeta - \zeta_c)\cos\theta)^2}{(x_2 \cdot \sigma_{mi})^2} = 1.$$

Si algún punto de la región no se encuentra en la elipse esto genera un error dado por:

$$r_i = 1 - \frac{((\eta_i - \eta_c)\cos\theta + (\zeta_i - \zeta_c)\sen\theta)^2}{(x_1 \cdot \sigma_{ma})^2} - \frac{((\eta_i - \eta_c)\sen\theta - (\zeta_i - \zeta_c)\cos\theta)^2}{(x_2 \cdot \sigma_{mi})^2},$$

y entonces el error cuadrático para todos los puntos será

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (r_i)^2.$$

Por lo tanto, esta ecuación es la que se busca minimizar con base en los dos parámetros ( $x_1$  y  $x_2$ ) para tener la mejor elipse que represente las áreas del trazador (Chaudhuri, 2010; Emery & Thomson, 1997; Peeters & Hofmann, 2015). Este ejemplo se desarrolló en la sección anterior (3.1.7. Ejemplo de aplicación de la rutina Isqnonlin).

En la Figura 6 se muestran las imágenes del experimento de trazador junto con el ajuste de las elipses realizado mediante el problema inverso.

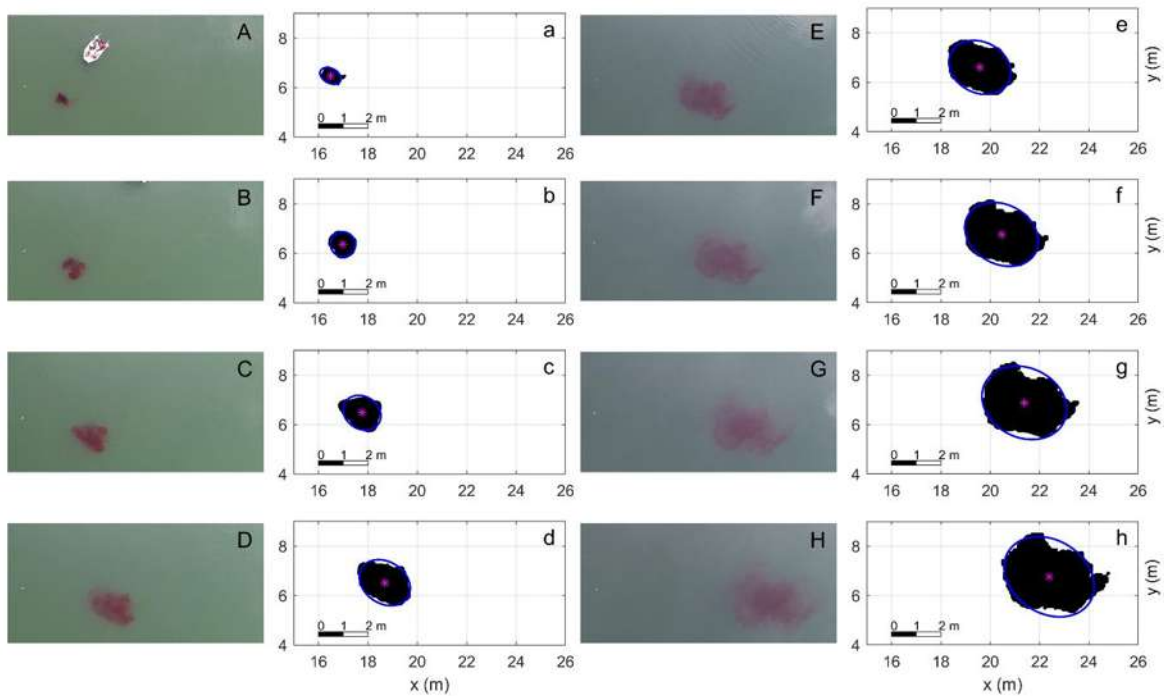


Figura 6. Experimento de trazador. Las imágenes (A-H) muestran la distribución del colorante y la evolución temporal y espacial correspondiente después del procesamiento de imágenes en (a-h). Las elipses de variabilidad óptimas se muestran en color azul con centro geométrico marcado con un asterisco rosa.

## 4.2. Problema directo e inverso de la ecuación de transporte

El objetivo de esta sección es encontrar el coeficiente de difusión óptimo para el Lago de Zirahuén, y para poder encontrarlo, el procedimiento requiere de resolver el problema directo (es decir, la ecuación de transporte) utilizando el método de diferencias y elementos finitos con un coeficiente de difusión y un campo de velocidad dados, y después aplicar el problema inverso de manera iterativa comparando la concentración obtenida numéricamente del problema directo con los datos observados, hasta obtener el coeficiente de difusión óptimo.

Para realizar esto, se comparará el área de la concentración con base en los dos métodos descritos anteriormente, es decir, donde se sugiere que la concentración tiene forma circular ( $C_c$ ) o de forma de elipse ( $C_e$ ). Además, se considerarán los casos donde  $K_1 = K_2$  y  $K_1 \neq K_2$  para la ecuación (1), esto es, se consideran los coeficientes de difusión distintos respecto a las direcciones  $x, y$ .

La formulación matemática del problema inverso para encontrar el coeficiente de difusión óptimo se desarrolla a partir de minimizar la función objetivo  $f(K)$  dada por la diferencia entre la solución  $\varphi$  y las observaciones  $\varphi_{obs}$  de la concentración:

$$\min_K f(\mathbf{K}) := \|r\|_2^2, \quad r = \varphi - \varphi_{obs}, \text{ donde } \mathbf{K} = K_1 = K_2 \text{ o } K_1 \neq K_2.$$

$\varphi$  se obtiene de resolver la ecuación de transporte (1):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = K_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2},$$

dado un campo de velocidad  $(u, v)$  y el  $K$  o  $K_1$  y  $K_2$  (según sea el caso) los coeficientes del tensor de difusión.

El tensor diagonal de difusión se puede expresar como

$$K = \begin{pmatrix} K_1 & 0 \\ 0 & K_2 \end{pmatrix},$$

si el flujo no es paralelo a los ejes cartesianos se requiere de los términos cruzados:

$$K = \begin{pmatrix} K_1 & K_{12} \\ K_{21} & K_2 \end{pmatrix}.$$

Conocer el coeficiente de difusión es fundamental para los procesos internos como la estratificación y mezcla (Bachman et al., 2020; Edwards, 1998; Qian et al., 2009; Starosolszky, 1974; Wang, 2013).

### 4.2.1. Campo de velocidad

Las observaciones de las velocidades del flujo se realizan usualmente mediante sensores tales como correntímetros y perfiladores acústicos, pero uno de los inconvenientes de estos métodos es que resultan muy costosos en términos del equipo y muestreo. Una alternativa más viable es el uso de vehículos aéreos no tripulados (UAV unmanned aerial vehicle) que permiten la recolección de datos de alta resolución y en áreas más grandes a un costo mínimo. Esta tecnología se utiliza para medir el campo de velocidad superficial mediante el uso de técnicas basadas en imágenes lo que resulta en un método rentable y ecológico (Guerrero & Lamberti, 2007; Pinton et al., 2020). Este método fue el que se usó en este proyecto con base en las mismas imágenes obtenidas del drone.

El campo de velocidad se obtuvo mediante la comparación del desplazamiento de dos contornos consecutivos al considerar el centro geométrico de la distribución del colorante, con un paso de tiempo de 40 segundos. A partir del centro geométrico entre cada contorno se pudo calcular la velocidad al dividir la distancia recorrida entre el paso de tiempo. De esta manera cada componente de la velocidad se estimó como:

$$u_{(i)} = \frac{x_{c(i+1)} - x_{c(i)}}{t_{(i+1)} - t_{(i)}}; \quad v_{(i)} = \frac{y_{c(i+1)} - y_{c(i)}}{t_{(i+1)} - t_{(i)}}.$$

Los datos obtenidos se muestran en la Tabla 2 y en la Figura 7.

Tabla 2. Datos de tiempo y centro geométrico entre cada contorno, para obtener  $u$  y  $v$ .

$t$ (s)	$x_c$	$y_c$	$u$ (m/s)	$v$ (m/s)
30	16.4837	6.4725	0.0250	-0.0055
50	16.9838	6.3624	0.0194	0.0029
90	17.7586	6.4793	0.0231	0.0011
130	18.6824	6.5220	0.0225	0.0020
170	19.5822	6.6005	0.0220	0.0041
210	20.4634	6.7630	0.0231	0.0030
250	21.3856	6.8815	0.0251	-0.0030

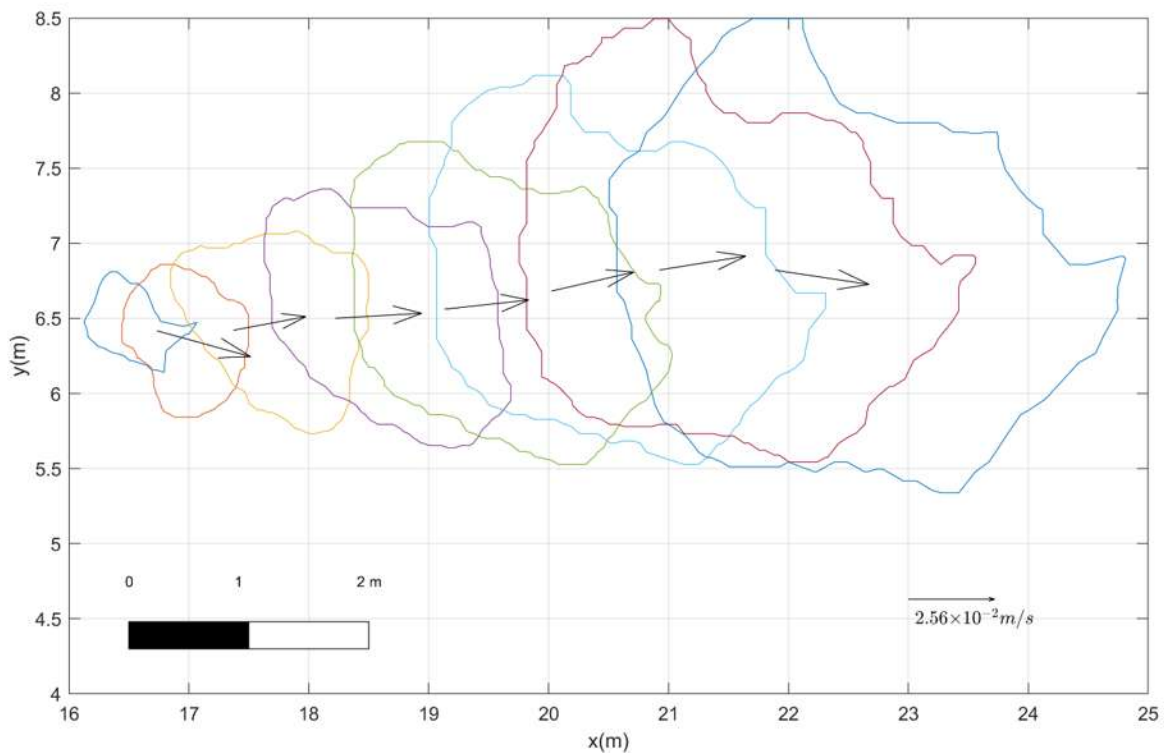


Figura 7. Contornos seleccionados para calcular el campo de velocidad, y vectores de velocidad promedio para cada contorno.

La velocidad promedio de cada componente

$$U = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u_i); \quad V = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (v_i),$$

fue

$$U = 0.02 \text{ m/s}, \quad V = 6.35 \times 10^{-4} \text{ m/s}.$$

### 4.3. Modelo matemático de la ecuación de transporte

Para resolver el problema directo de la ecuación de transporte se consideró la región obtenida con base en el experimento del trazador  $\Omega = \{(x, y): 0 \leq x \leq 30 \text{ m}, 0 \leq y \leq 17 \text{ m}\}$ , de acuerdo con la altura y al número de pixeles de donde fue capturada la imagen (Figura 6). Se consideró un campo de velocidad constante con  $U = 0.02 \text{ m/s}$ ,  $V = 6.35 \times 10^{-4} \text{ m/s}$  (Figura 7) y para resolver el problema, un valor inicial y constante de  $0.005 \text{ m}^2/\text{s}$  para coeficiente de difusión  $K$ . Se utilizaron condiciones de frontera tipo Neumann. Los parámetros de la condición inicial para cada caso se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Condición inicial para casos  $C_c$  y  $C_e$ .

	Trazador $C_c$	Trazador $C_e$
condición inicial	$C_0 = e^{-\frac{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2}{2R^2}}$ $R = 0.44 \text{ m}$ $x_c = 16.48 \text{ m}$ $y_c = 6.47 \text{ m}$	$C_0 = e^{-\frac{(1-(x-x_c)\cos\theta - (y-y_c)\text{sen}\theta)^2}{\sigma_{mi}^2} + \frac{(1-(x-x_c)\cos\theta - (y-y_c)\text{sen}\theta)^2}{\sigma_{ma}^2}}$ $\sigma_{ma}^2 = 0.255 \text{ m}^2$ $\sigma_{mi}^2 = 0.498 \text{ m}^2$ $\theta = 0.4876 \text{ rad}$ $x_c = 16.48 \text{ m}$ $y_c = 6.47 \text{ m}$

Se utilizó la paquetería PDE Toolbox de Matlab (Mathworks, 2016) para resolver la ecuación de transporte. Esta paquetería cuenta con funciones integradas que resuelve las ecuaciones diferenciales parciales mediante análisis de elemento finito,

en la cual el dominio se dividió en elementos triangulares (Figura 8) con base en varias pruebas para obtener una configuración adecuada. En la Tabla 4 se muestran las características del dominio para el tamaño del elemento distinto.

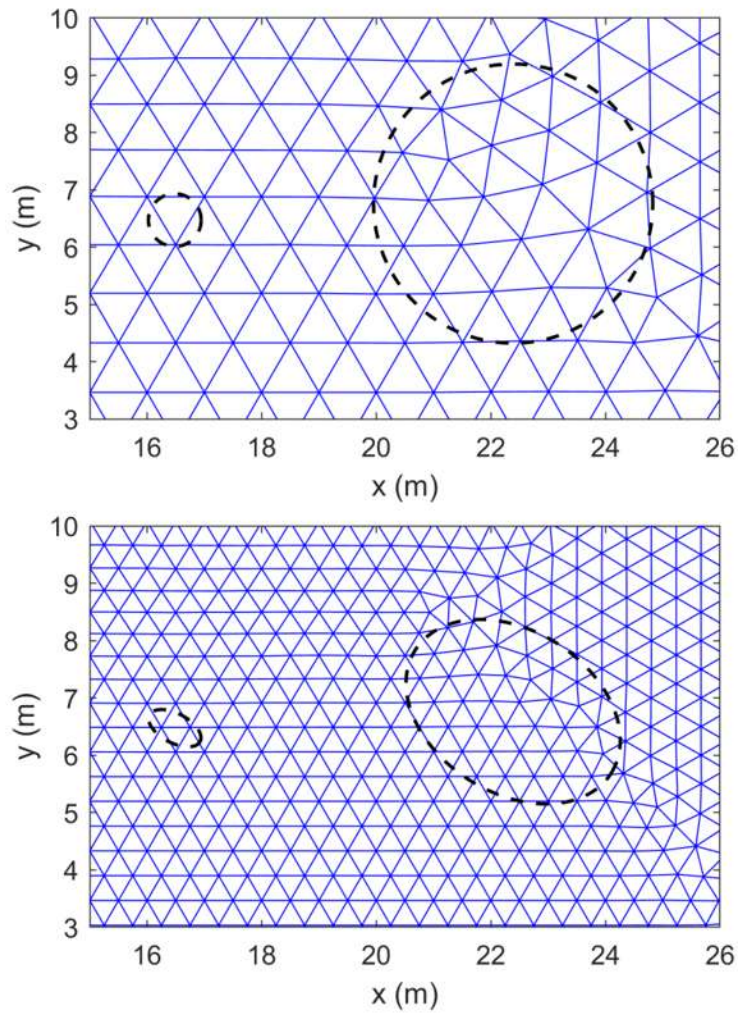


Figura 8. Dominio rectangular con tamaño del elemento = 1 y 0.5 m. Contornos en negro indican condición inicial/final.

Tabla 4. Características de malla triangular

Tamaño del elemento	Nodos	Elementos
1 m	2447	1176
0.5 m	9613	4712

## 4.4. Características generales de la distribución del colorante

En la Figura 6 se observó que la evolución espacial del colorante presentó una tendencia hacia la derecha debido al forzamiento del viento en la cual fue advectada aproximadamente 6 m con una dispersión casi homogénea de aproximadamente 1 m hasta 5 m de extensión durante 290 s.

## 4.5. Estimación del Coeficiente óptimo de difusión

### 4.5.1. Caso $C_c$

En la Tabla 5 y en la Figura 9 se presentan los resultados del problema de optimización cuando se considera la concentración del trazador como una circunferencia, para los coeficientes de difusión  $\begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & K \end{pmatrix}$  y  $\begin{pmatrix} K_1 & 0 \\ 0 & K_2 \end{pmatrix}$ .

En la gráfica, la función  $f(K)$  y del número de iteraciones se puede observar una convergencia suave en la que el proceso de minimizar se logra para la tolerancia prescrita de  $tol = 1 \times 10^{-6}$  (Figura 9). Cuando  $K = K_1 = K_2$ , con un tamaño del elemento de 0.5 m (representado con una línea con cuadrado), el primer valor para la función inicia en 660.1 unidades y termina en 10.4 unidades. Para el tamaño del elemento de 1 m, cuando  $K_1 = K_2$  (línea-círculo) inicia en 159.3 unidades y termina en 2.6 unidades, los valores son similares para  $K_1 \neq K_2$  (línea-triángulo) y  $K_1 \neq K_2$ , por lo que en la gráfica se observa como si solo estuviera una configuración.

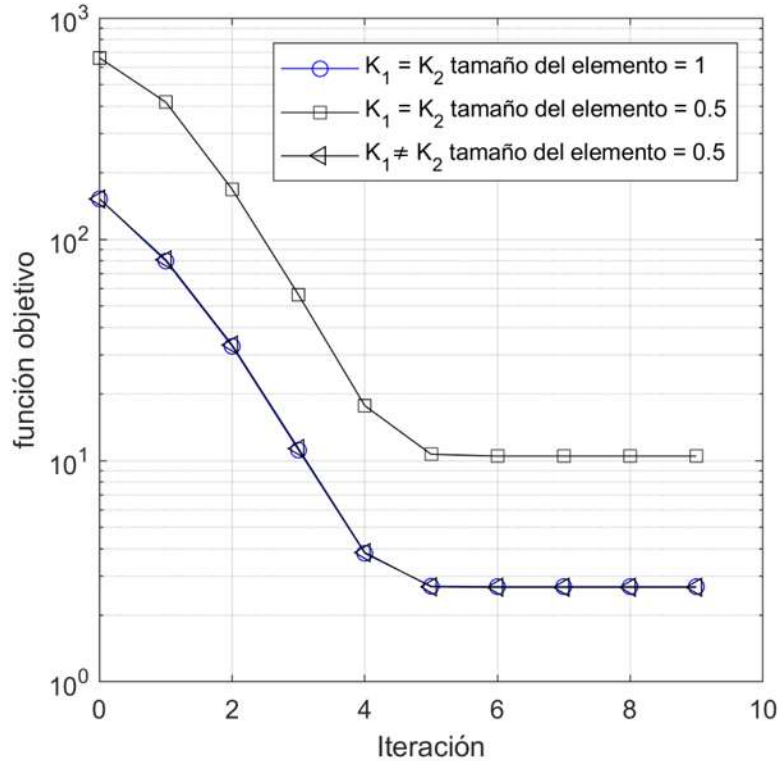


Figura 9. Función objetivo y número de iteraciones para tamaño del elemento de 1 m y tamaño del elemento de 0.5 m, con  $K_1 = K_2$  y  $K_1 \neq K_2$ .

Se puede observar que, a partir de la quinta iteración sin importar el tamaño del elemento o los coeficientes a encontrar, el problema converge más rápido a la solución. Es decir, para esta iteración la región de confianza logra encontrar el valor óptimo para  $K_1 = K_2$  y  $K_1 \neq K_2$ , ya que el error es mínimo entre las observaciones y la solución numérica. La diferencia entre los valores que toma la función entre iteraciones consecutivas es menor que la tolerancia.

En la Tabla 5 se muestran los valores obtenidos del coeficiente de difusión y el error estimado para los distintos casos. Para las cuatro configuraciones distintas se logra encontrar la solución después de nueve iteraciones. Aunque al considerar distintos tamaños del elemento el tiempo de cómputo incrementa proporcionalmente, no hay mucha diferencia en los valores encontrados para  $K_1$  y  $K_2$ . Por lo que, a partir de aquí se considerará la configuración con elementos de tamaño de 1 m. Nótese que además el tiempo de cómputo aumenta dependiendo de los parámetros a optimizar, es decir, para uno ( $K_1 = K_2$ ) y dos ( $K_1 \neq K_2$ ) parámetros.

Tabla 5. Parámetros y estimación del coeficiente de difusión para el caso áreas  $C_c$ .

$C_c$	$K_1 = K_2$		$K_1 \neq K_2$
			$K_{12} = K_{21} = 0$
Tamaño del elemento	0.5 m	1 m	1 m
No. de iteraciones	9	9	9
No. Of function evaluations at final iteration	20	20	30
Tiempo computacional (seg)	~189	~56	~81
$K_1$ y $K_2$ ( $m^2/s$ )	0.006845	0.00677	$K_1 = 0.00724$ $K_2 = 0.00631$
RMSE	0.0330	0.0331	0.0330

A manera de ejemplo, enseguida se muestra la evolución temporal de la concentración cuando  $K_1 = K_2$  (Figura 10). Se puede observar que la distribución de la concentración es de forma circular y con una tendencia hacia la derecha debido al campo de velocidad dado. Se observa que a medida que la concentración se extiende o distribuye en un área mayor, la concentración es menor en el centro. El coeficiente de difusión óptimo que se obtuvo en este caso fue de  $K_1 = K_2 \approx 0.006 \text{ m}^2/\text{s}$ , independientemente de la resolución utilizada.

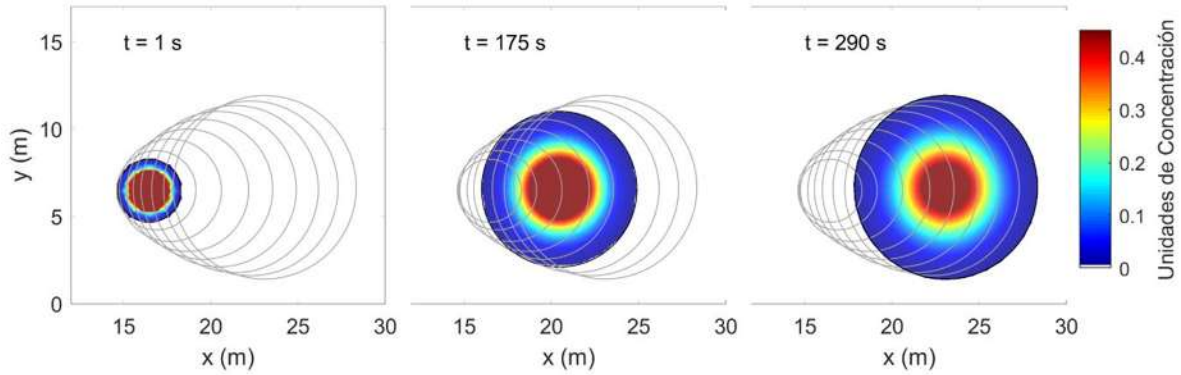


Figura 10. Distribución de la concentración. Contornos de concentración obtenida con coeficiente de difusión óptimo  $K_1 = K_2$ , para tamaño del elemento de 1m.

En Figura 11 se muestran la distribución de la concentración obtenidos para analizar distintas resoluciones y verificar la estabilidad, convergencia y el tiempo de cómputo del modelo. En las Figura 11 a y c el color representa la solución final del modelo matemático. Para un análisis visual más simple, entre la solución numérica y las observaciones, se consideró un solo contorno, la línea negra es de las observaciones y la línea en rojo es para la solución del problema de la ecuación de transporte una vez que se encontró el coeficiente óptimo. Al considerar un solo contorno, de manera visual se puede observar un ligero desfase y una disminución en la solución, pero el error cuadrático medio que se obtiene es considerablemente pequeño y se puede considerar como una buena aproximación a la solución (Tabla 5).

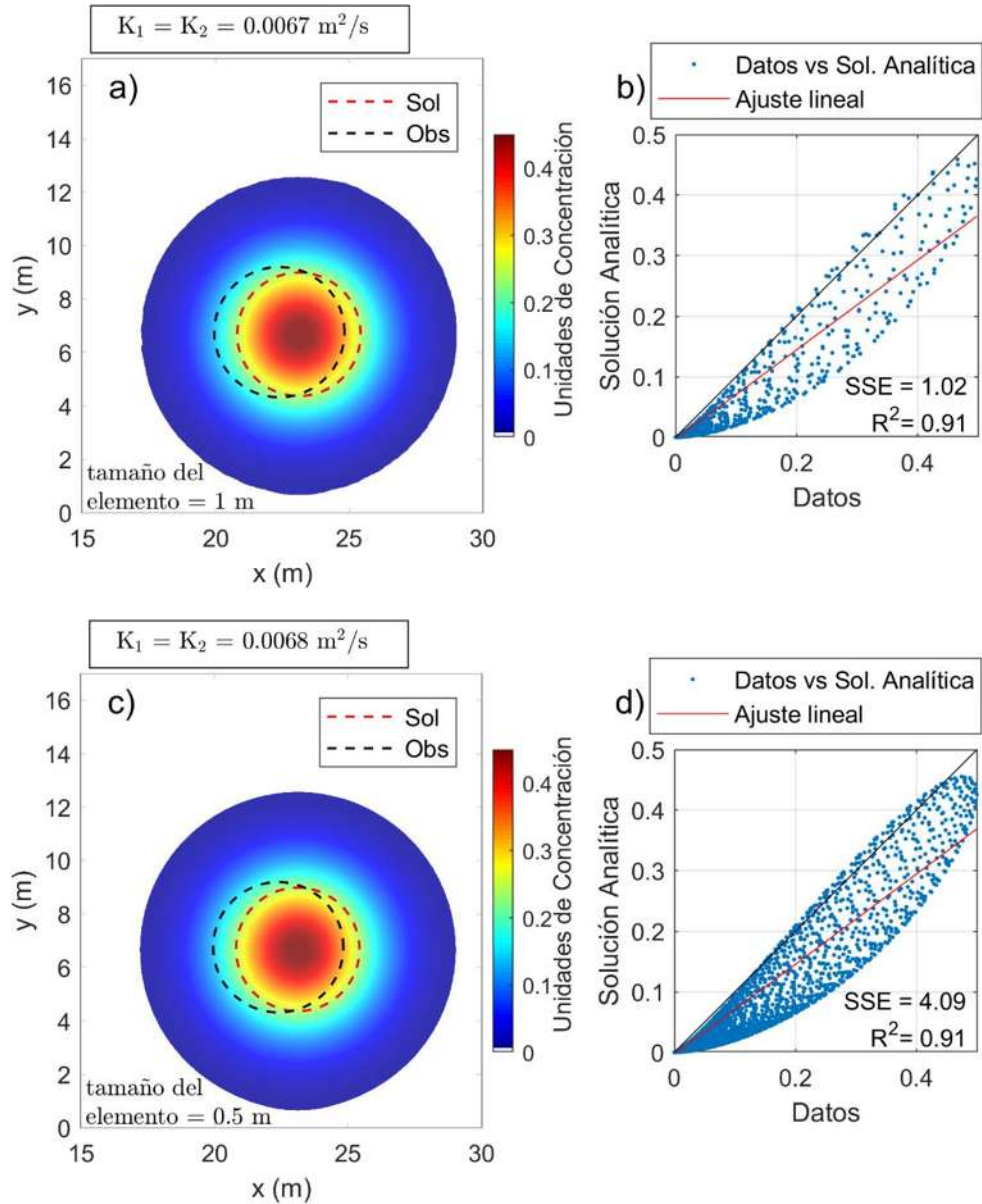


Figura 11. Contornos de concentración obtenida con coeficiente de difusión óptimo  $K_1 = K_2$ , para tamaño del elemento de 1 y 0.5 m. Contorno negro de las observaciones y contorno rojo de la solución. En b) y d) los datos vs. solución analítica con ajuste lineal con SSE y  $R^2$ .

Para evaluar el desempeño se consideraron el error de la suma de los cuadrados que se define como:

$$SSE = \sum_{i=1}^N (\varphi - \varphi_{obs})^2;$$

y el coeficiente de determinación

$$R^2 = \left[ \frac{\sum_{i=1}^n (\varphi_i - \bar{\varphi}) (\varphi_{obs_i} - \bar{\varphi}_{obs})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\varphi_i - \bar{\varphi})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (\varphi_{obs_i} - \bar{\varphi}_{obs})^2}} \right]^2.$$

En Figura 11b y d ahora se presenta una comparación entre todo el campo de distribución del colorante donde se presenta el error cuadrático (SSE) y el coeficiente de determinación ( $R^2$ ) entre la solución numérica y las observaciones. En este caso el coeficiente de determinación en ambos resultó de 0.91, es decir que los campos presentan una buena correlación lineal. Cabe resaltar que el error SSE en 10d es mayor, pero esto se debe a la resolución considerada.

A continuación, se muestran los resultados cuando  $K_1 \neq K_2$ . En este caso los coeficientes de difusión son del mismo orden que cuando  $K_1 = K_2$ , con valores aproximadamente iguales, aunque con el valor de  $K_2$  ligeramente mayor (Figura 12). Como se puede observar en la Tabla 5 el error obtenido es igual para los tres casos, es decir, se reduce un poco donde se considera el tamaño del elemento menor y cuando se consideran los coeficientes distintos. En Figura 12b se presenta el error entre los datos y el ajuste (SSE) y el coeficiente de determinación ( $R^2$ ), de 1.02 y 0.91 respectivamente, lo que indica una buena correlación. Esto es de esperarse ya que se está analizando y forzando a que la distribución sea en forma de circunferencia  $C_c$ .

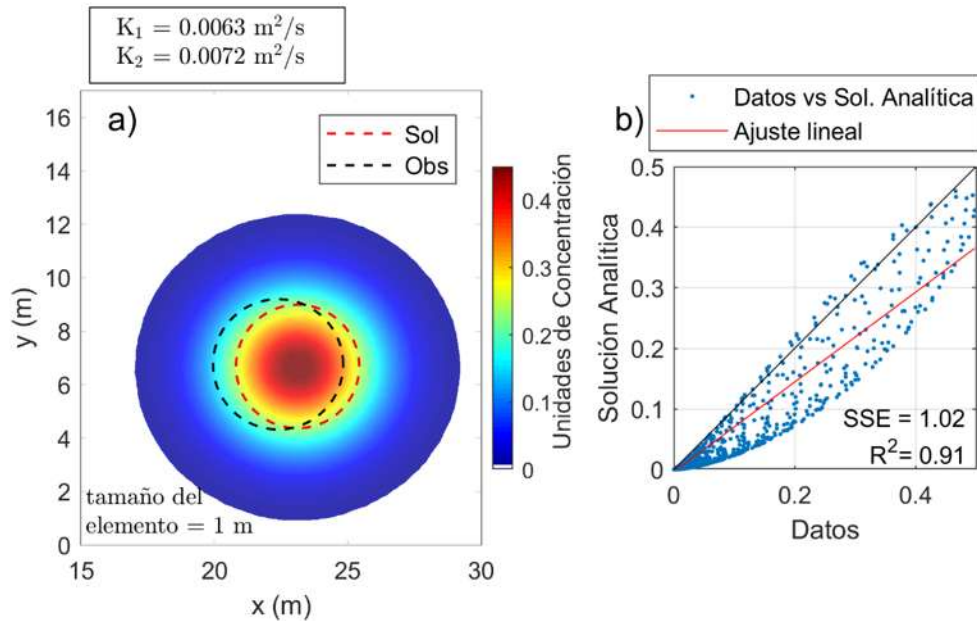


Figura 12. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos con  $K_1 \neq K_2$ .

#### 4.5.2.Caso $C_e$

Ahora se considera la concentración como una elipse. Se utilizan los mismos parámetros para alimentar la ecuación de transporte como en el caso anterior y las simulaciones se realizan con el tamaño de elementos de 1 m.

De manera similar que  $C_c$  se puede observar una convergencia suave en la evolución de la función objetivo y el número de iteraciones (Figura 13). De los casos analizados también se tiene que cuando  $K_1 \neq K_2$  (Tabla 6), el tiempo de cómputo es mayor y las iteraciones incrementan en 1 y 3 veces más, pero la solución se puede decir que es más exacta ya que el error disminuye. Cuando  $K_1 = K_2$ , se obtiene una solución después de 7 iteraciones. Para el caso de las elipses además se agregan los términos no isotrópicos de la matriz de difusión  $K_{12}, K_{21}$ . Cuando  $K_1 \neq K_2$  y  $K_{12} = K_{21} = 0$ , la convergencia se logra después de 8 iteraciones y cuando  $K_1 \neq K_2$  y  $K_{12} \neq K_{21}$ , la solución óptima se obtiene después de 10 iteraciones.

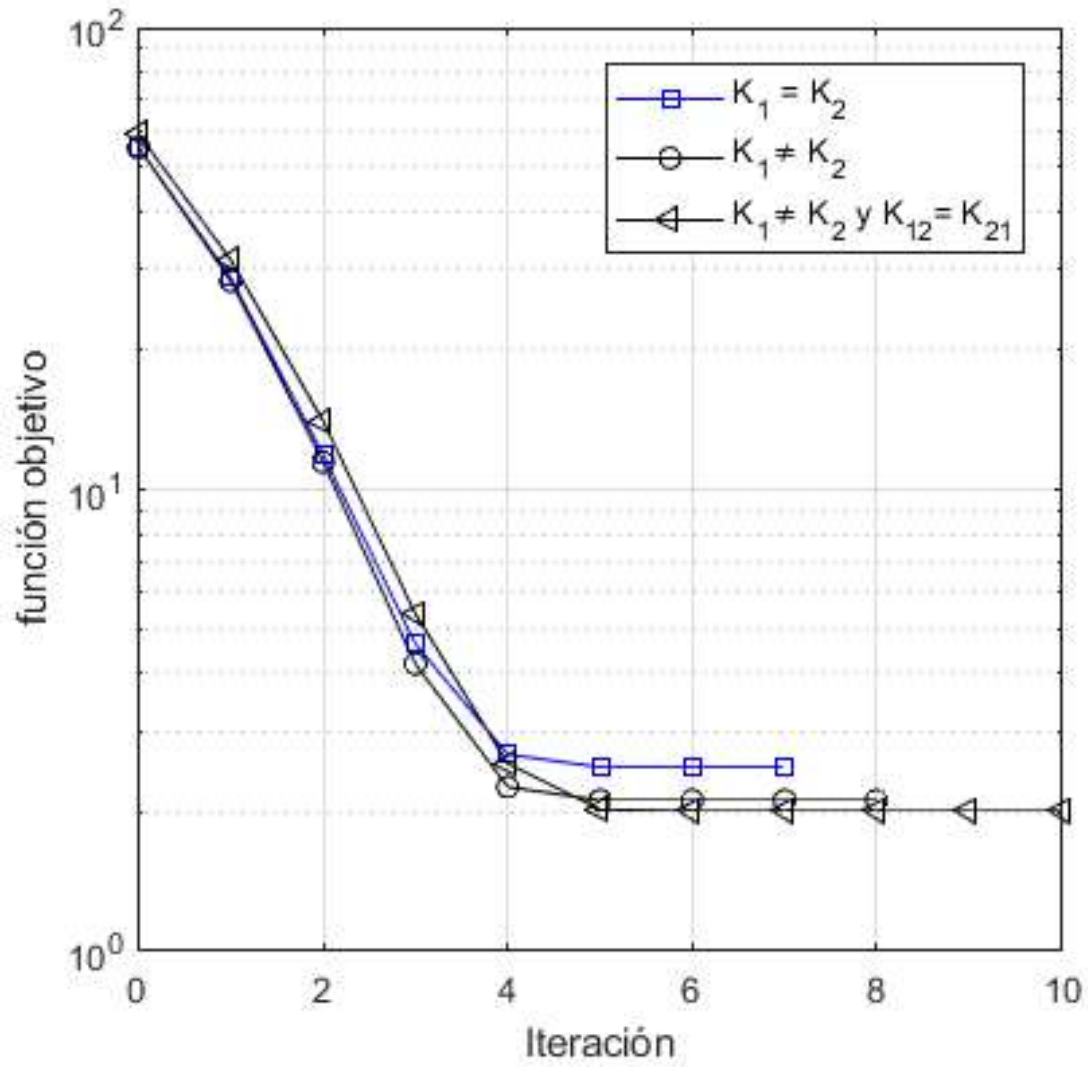


Figura 13. Función objetivo y número de iteraciones para tamaño del elemento de 1 m, con  $K_1 = K_2$  y  $K_1 \neq K_2$ .

Tabla 6. Parámetros y estimación del coeficiente de difusión para el caso áreas  $C_e$ .

$C_e$	$K_1 = K_2$	$K_1 \neq K_2$ $K_{12} = K_{21} = 0$	$K_1 \neq K_2$ y $K_{12} = K_{21}$
No. de iteraciones	7	8	10
No. de evaluaciones de la función	16	27	44
Tiempo computacional (seg)	~ 52	~ 79	~ 124
$K_1$ y $K_2$ ( $m^2/s$ )	0.00328	$K_1 = 0.00516$ $K_2 = 0.00206$	$K_1 = 0.0053$ $K_2 = 0.0021$ $K_{12} = 0.0008$
RMSE	0.031	0.0294	0.0286

Enseguida se muestra la evolución temporal cuando  $K_1 \neq K_2$  y  $K_{12} = K_{21}$ , donde se puede observar la distribución de la concentración en forma de elipse moviéndose hacia la derecha debido al campo de velocidad dado y conforme avanza en el tiempo se observa menor concentración en el centro.

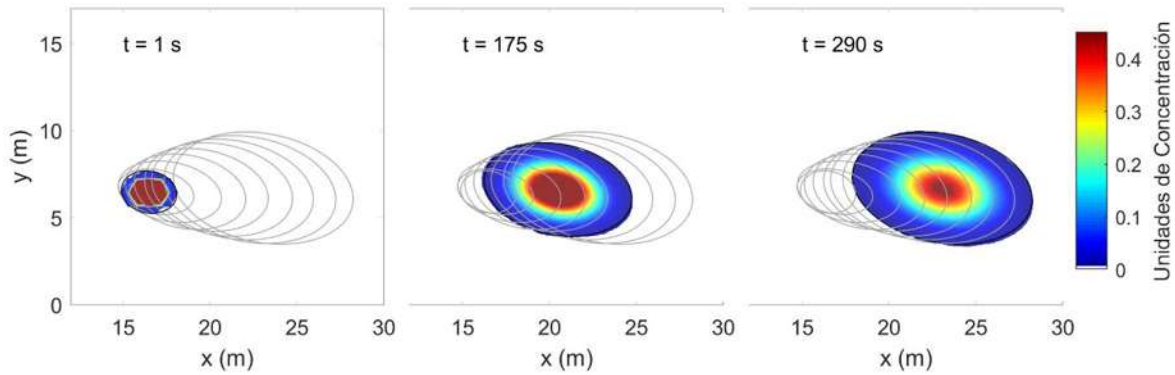


Figura 14. Distribución de la concentración. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos  $K_1 \neq K_2$  y  $K_{12} = K_{21}$ .

Cuando  $K_1 = K_2$ , se puede observar de los valores obtenidos que, aunque el error sea pequeño, la solución es muy similar al caso  $C_c$  (Figura 15a). Mientras que para  $K_1 \neq K_2, K_{12} = K_{21} = 0$ , la solución mejora ya que el error disminuye y se observa que la forma resultante es una elipse similar a la de las observaciones (Figura 15c) pero con un ligero desfase. En la Figura 15e ( $K_1 \neq K_2, K_{12} = K_{21} \neq 0$ ) se observa una mejoría en la solución ya que además de tener la forma de elipse, la orientación coincide con las observaciones. En Figura 15b, d y f se presenta el error entre los datos y el ajuste (SSE) y el coeficiente de determinación ( $R^2$ ). Para b)  $SSE = 0.93$  y  $R^2 = 0.84$ ; en d)  $SSE = 0.71$  y  $R^2 = 0.88$ ; y en f)  $SSE = 0.67$  y  $R^2 = 0.89$ . Es claro que se obtienen los mejores resultados en Figura 15e y 15f, ya que el coeficiente de determinación se aproxima más a uno y el error tiende a cero ( $R^2 \rightarrow 1$  y  $SSE \rightarrow 0$ ).

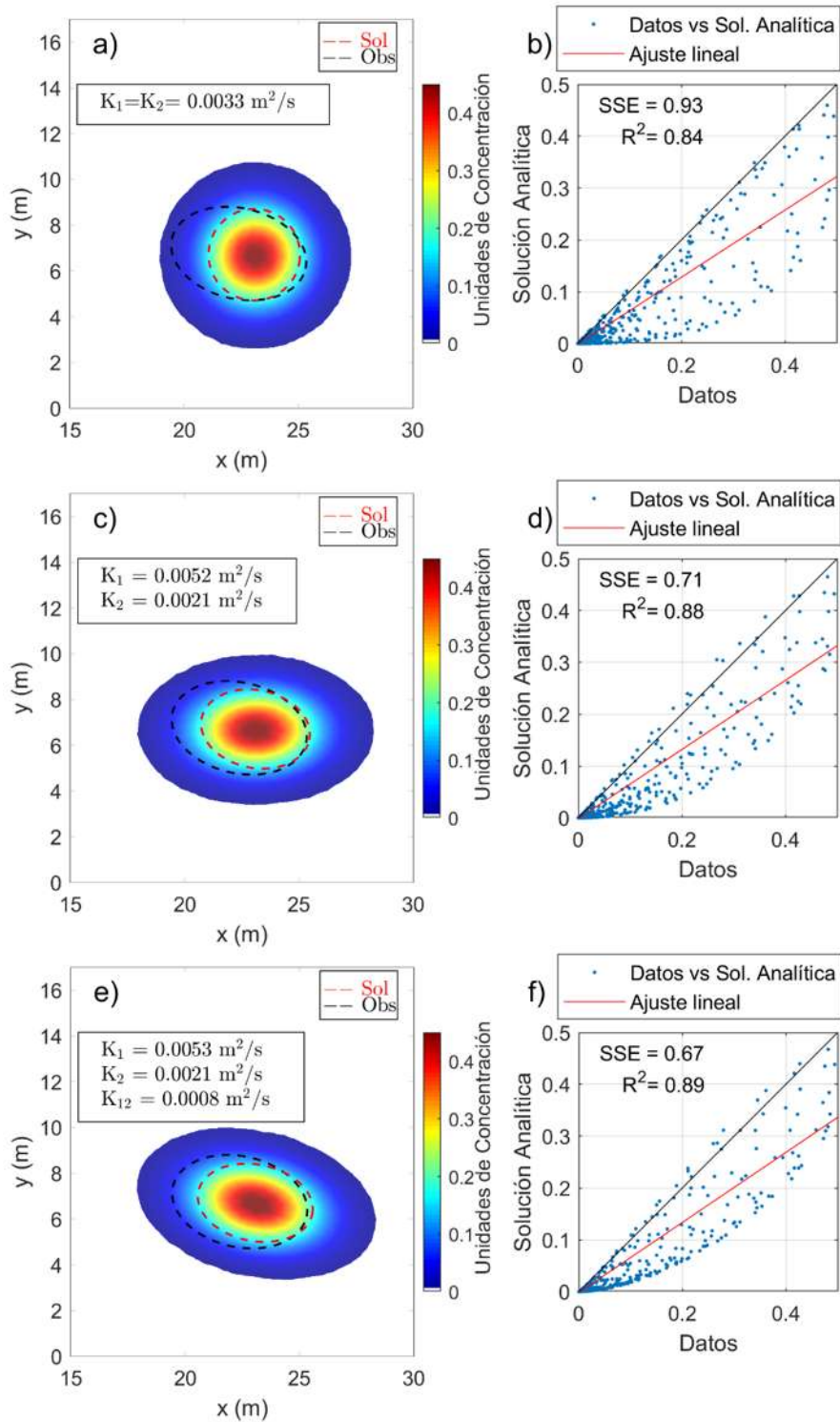


Figura 15. Contornos de concentración obtenida con coeficientes de difusión óptimos para  $K_1 = K_2$  y  $K_1 \neq K_2$ . En negro observaciones y contorno rojo la solución.

## 4.6. Discusión y Conclusiones

En la primera parte de la tesis se describieron los métodos y algunas de las consideraciones que se toman en cuenta para resolver la ecuación de transporte, en particular se analizó la discretización por el método de diferencias y elementos finitos. Se realizó el análisis de estabilidad por el método de von Neumann y se una generalización para el método de elementos finitos.

En la segunda parte de forma general se hizo una descripción del problema inverso y de algunos algoritmos que se implementan para resolver este problema. Mostrando un ejemplo donde se aplica la metodología para resolver un problema inverso para la estimación de parámetros. Se hizo el uso de herramientas o paqueterías de Matlab para encontrar los parámetros, pero cabe señalar que esto fue para implementar de manera más rápida y sencilla el algoritmo de optimización, pero en este sentido se puede utilizar cualquier software que cuente con paqueterías de optimización.

En la última sección se resolvió la ecuación de transporte, para esto se describió la estimación de la concentración a partir de un experimento de colorante y la estimación de la concentración de dos maneras una que consistió en considerar el número total de píxeles que cubren la mancha de colorante y la otra que consistió en estimar los ejes mayor y menor que minimizan la elipse que representa mejor el área de la concentración. Por último, se estimaron los coeficientes de difusión óptimos, esto se logró al comparar la solución del problema directo de la ecuación de transporte con la concentración estimada mediante la circunferencia o la elipse. De las simulaciones realizadas se puede decir que el modelo matemático que resuelve el problema inverso para la ecuación de transporte es adecuado y eficiente para la determinación del coeficiente de difusión. Los resultados de las simulaciones para  $K = K_1 = K_2$  cuando se considera una circunferencia es  $K \approx 0.006 \text{ m}^2/\text{s}$ , mientras que para la elipse es  $K \approx 0.003 \text{ m}^2/\text{s}$ . Cuando se consideran los coeficientes distintos  $K_1 \neq K_2$  se encuentran valores para  $K_1 \approx 0.006 \text{ m}^2/\text{s}$  y para  $K_2 \approx 0.007 \text{ m}^2/\text{s}$  para el caso  $C_c$ , mientras que para el caso de la elipse  $C_e$ ,  $K_1 \approx 0.005 \text{ m}^2/\text{s}$  y para  $K_2 \approx 0.002 \text{ m}^2/\text{s}$ , y el valor no cambia significativamente cuando

se considera el término  $K_{12}$ . Sin embargo, este último parámetro resultó importante para  $C_e$  ya que influye en la orientación de la elipse.

Por otro lado, se observa que existe una variación en los valores que se encuentran para las simulaciones de la elipse y circunferencia, aunque en ambos resultados se puede decir que son muy similares ya que los valores del error cuadrático medio son  $RMSE = 0.033$  y  $0.029$ , la correlación es mayor en la simulación para la elipse donde se encuentran  $K_1, K_2$  y  $K_{12}$ . Se puede considerar que la aproximación de la concentración mediante una elipse como una mejor solución para obtener el coeficiente de difusión.

Con base en estos resultados para el coeficiente de difusión se puede acotar significativamente el valor para este parámetro para la zona de estudio y en promedio los resultados son aceptables y similares a otros que aparecen en la literatura, ya que en la literatura se reportan valores que oscilan entre  $0.0001$  y  $1 \text{ m}^2/\text{s}$ . Por ejemplo, existen trabajos donde analizan la distribución de contaminantes en lagos y estanques donde emplean modelos numéricos que resuelven la ecuación de advección difusión donde se consideran diferentes valores para el coeficiente de difusión (ver Es importante notar que este rango tan amplio puede complicar el cálculo en el problema inverso, sin embargo, se lograron obtener buenas aproximaciones.

Tabla 7. Es importante notar que este rango tan amplio puede complicar el cálculo en el problema inverso, sin embargo, se lograron obtener buenas aproximaciones.

Tabla 7. Estudios con diferentes valores para el coeficiente de difusión.

Kusuma et al. (2017)	$K_1 = 1.28 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ , $K_2 = 1.02 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Sunarsih et al. (2020)	$K_1 = 1.37 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Ahmed (2012)	$K_1 = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ $K_2 = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$
Hutomo et al. (2019)	$K_1 = 0.0004 \text{ m}^2/\text{s}$ $K_1 = 0.00012 \text{ m}^2/\text{s}$

	$K_1 = 0.00028 \text{ m}^2/\text{s}$
Lima et al. (2015)	$K_1 = 0.09 \text{ m}^2/\text{s}$

Cabe resaltar que en algunos de estos estudios cuentan con información de mediciones del campo de velocidad, así como de la concentración de diferentes sustancias, y en algunos trabajos se hace la suposición de que la tasa de propagación es proporcional al gradiente de concentración para estimar el coeficiente de difusión. En el presente estudio se utiliza un enfoque más dinámico en el cual se utiliza básicamente la ecuación de transporte.

Contar con mediciones es de gran importancia ya que los resultados de distintos estudios indican que los contaminantes se mueven junto con el flujo y se difunden con el tiempo. Pero en ocasiones no se cuenta con los recursos para realizar estas mediciones y es por ello la importancia de este estudio en cuanto a la técnica de muestreo y obtención de parámetros que es relativamente simple.

De las simulaciones realizadas se puede decir que el modelo matemático que resuelve el problema inverso para la ecuación de transporte es adecuado y eficiente para la determinación del coeficiente de difusión, y con base en los resultados obtenidos para el coeficiente de difusión se puede decir que el valor para este parámetro se puede acotar significativamente.

Se podrían haber planteado otras condiciones de simulación tomando en cuenta factores que afecten los procesos de transporte en el lago, como vientos más intensos, pero la idea principal era obtener coeficientes adecuados para la zona de estudio bajo ciertas condiciones que reprodujeran el fenómeno observado.

Como trabajo futuro se plantea la posibilidad de mejorar el modelo matemático para incluir algunos otros procesos, así como la estimación de otros parámetros.

## 5.MODELO HIDRODINÁMICO PARA EL LAGO DE ZIRAHUÉN, CONFIGURACIÓN DE MODELO DELFT3D

La importancia de trabajar con problemas inversos es la aplicación que se puede tener al contar con los parámetros que resultan de optimizar un cierto problema. Por ejemplo, en muchas ocasiones configurar un modelo hidrodinámico más completo no es tan sencillo debido a la dificultad que surge en encontrar parámetros adecuados. En este trabajo se logró configurar y calibrar un modelo hidrodinámico y de partículas de manera satisfactoria y eficiente a partir de optimizar algunos parámetros para el Lago de Zirahuén.

En esta sección se presenta la obtención y procesamiento de algunos datos hidrometeorológicos necesarios para la configuración de un modelo hidrodinámico utilizado por la comunidad científica internacional y la aplicación del modelo inverso no lineal para la estimación de algunos parámetros para su calibración.

Los modelos numéricos deben calibrarse para que sean útiles para la solución de problemas prácticos, es decir, que se deben estimar valores para los parámetros del modelo que permitan que el modelo reproduzca de manera adecuada el comportamiento del sistema. En algunos casos, los valores apropiados para un parámetro del modelo se pueden determinar mediante mediciones directas. Sin embargo, en muchas situaciones dichos parámetros del modelo son representaciones conceptuales de las características de la zona de estudio y deben determinarse mediante un proceso manual o automático que ajuste los valores de los parámetros para hacer coincidir la respuesta del modelo con los datos (Gupta et al., 1998).

Al contar con mediciones se pueden comprender mejor los problemas que se presentan en algún cuerpo de agua y desarrollar modelos para predecir o conocer los cambios que ocurren. Uno de los fenómenos más importantes a comprender es la hidrodinámica ya que es muy variable en los lagos debido a las diferentes geometrías, topografía circundante, cargas hidrológicas-geoquímicas y exposiciones meteorológicas.

La hidrodinámica es importante para comprender la estructura física, química y biológica de los lago (Ji, 2017; Martin et al., 2018), pero para tener una configuración adecuada del modelo y que este reproduzca adecuadamente el comportamiento de alguna variable física, es necesario contar con observaciones de los principales forzamientos como viento, corrientes, temperatura, entre otros.

## 5.1.Zona de estudio

El Lago de Zirahuén se localiza en las coordenadas 19°26'15"N y 101°44'30"W en centro-occidente de México en el estado de Michoacán (Figura 16). Tiene registradas profundidades mayores a 40 m y una superficie de aproximadamente 10 km<sup>2</sup>. Se localiza a una altura de 2082 msnm (metros sobre el nivel del mar), presenta un clima templado de 15-16°C durante gran parte del año con una precipitación promedio anual de 1182 mm<sup>3</sup> durante el verano (F. W. Bernal-Brooks et al., 2002; Fernando W. Bernal-Brooks et al., 2016; Gasca-Ortiz et al., 2020; Martínez-Almeida & Tavera, 2005; Mendoza et al., 2015; Ortega et al., 2010; Ortiz Paniagua & Rendón López, 2010).

El lago de Zirahuén es del tipo monomíctico, oligo-mesotrófico y endorreico<sup>2</sup> que posee una gran variedad de flora y vegetación acuática considerable (Madrigal Guridi et al., 2004), pero, desafortunadamente se ve afectado por el deterioro de la explotación irracional de sus recursos, además de las fuentes de contaminación de los asentamientos locales, el pastoreo de los animales y el cambio de uso de suelo, por mencionar algunos. Sin embargo, por sus propiedades de mezcla estacional y características químicas no tan comunes, lo diferencian de otros lagos mexicanos por el aporte de nutrientes que es transportado constantemente en su interior y que

---

<sup>2</sup> **Monomíctico:** se mezcla una vez al año (ver Figura P2 más adelante).

La clasificación trófica de un lago puede ser oligotrófico, mesotrófico, eutrófico e hipertrófico.

**Mesotrófico:** son lagos con nivel intermedio de productividad.

**Oligotrófico** es un cuerpo de agua con baja productividad primaria, como resultado de contenidos bajos de nutrientes. Estos lagos tienen baja producción de algas, y consecuentemente, poseen aguas sumamente claras. Según Rendón et al. (2010) y Vergara de Paz et al. (2010) el lago está en transición de oligotrófico a mesotrófico es por eso la clasificación de oligo-mesotrófico.

**Endorreico:** Un Lago endorreico normalmente retiene agua y no permite la salida a otros cuerpos de agua externos, como ríos u océanos (Wetzel, 2001).

aún no se ha identificado con precisión la dinámica de estos procesos en el ecosistema (Tavera & Martínez-Almeida, 2005).

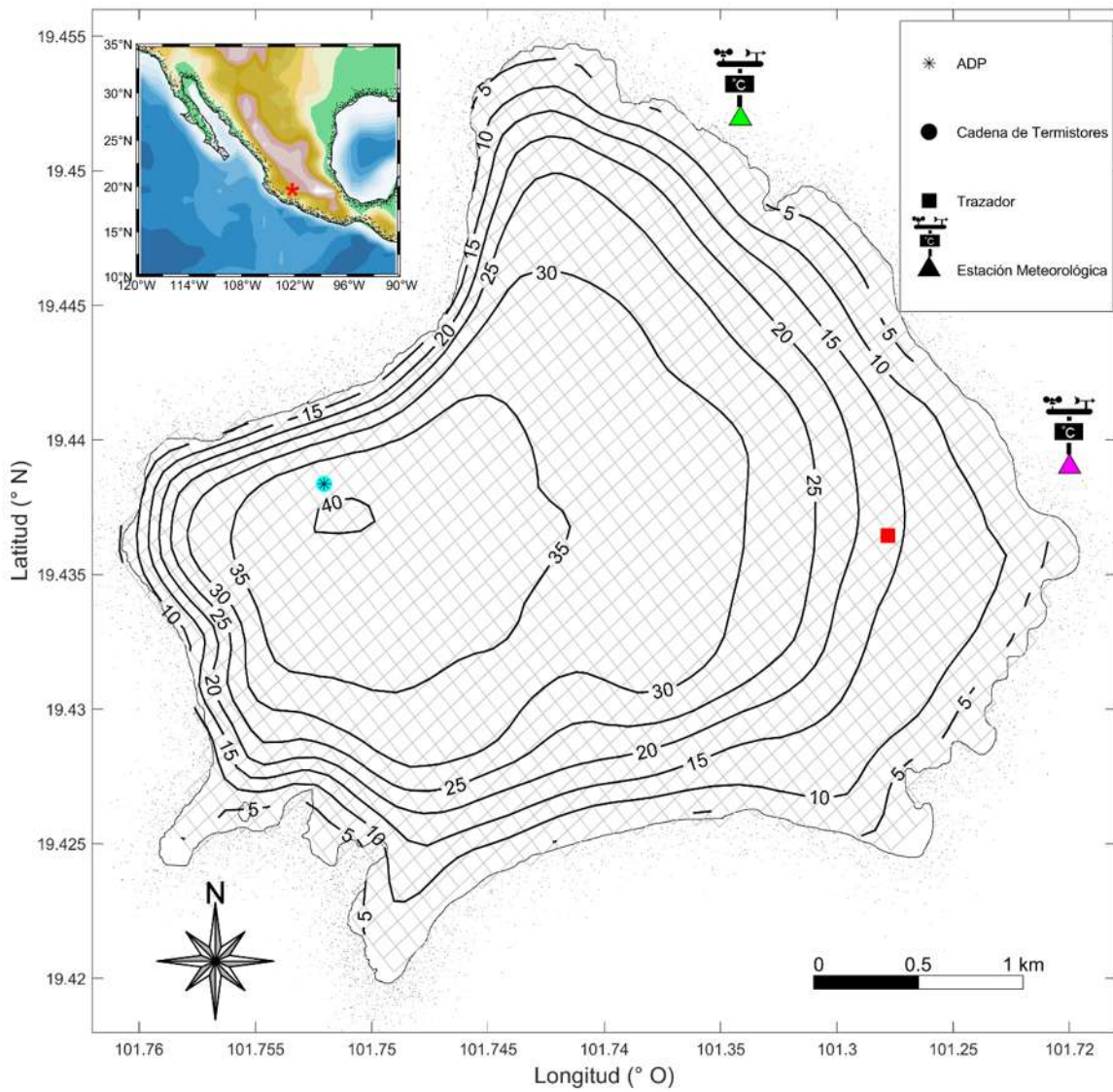


Figura 16. Localización geográfica y batimetría del Lago de Zirahuén. Ubicación de estación meteorológica, ADP, sensores de temperatura y experimento de trazador. Malla utilizada para modelo numérico.

## 5.2.Observaciones

La importancia de realizar muestreos o de obtener datos de la zona de estudio es para tener una mejor comprensión del lugar y además ayuda a que el modelo numérico reproduzca de manera más precisa fenómenos reales.

Se analizó la variabilidad hidrodinámica del Lago de Zirahuén mediante datos de las variables físicas recolectados durante varias salidas de campo en el 2018, donde se utilizaron: una estación meteorológica, sensores de temperatura, perfilador con sensores de conductividad, temperatura y presión (Conductivity-Temperature-Depth CTD<sup>3</sup>), perfilador acústico para medir las corrientes (ADP<sup>4</sup> Acoustic Current meter Profiler) y una ecosonda con sistema GPS (Global Positioning System) para medir batimetría del lago (Figura 16).

### 5.2.1.Estación meteorológica

Los principales factores que influyen en los procesos del lago son debidos al viento y el flujo de calor. Se monitorearon parámetros meteorológicos mediante una estación instalada a la orilla del lago con sensores de temperatura del aire, dirección y velocidad del viento, con resolución de muestreo cada 15 min. Durante cada salida de campo de marzo-julio la estación se colocó en la parte noreste del lago y en una ocasión durante noviembre en el lado noroeste.

La Figura 17 muestra la rosa de los vientos con la distribución de la magnitud y dirección del viento para los días de medición. La gráfica utiliza barras o extensiones que van desde el centro de un círculo hacia un punto determinado que ilustra la dirección del viento, la longitud de cada extensión indica el porcentaje de tiempo en el que el viento se dirigió hacia esa dirección (Ahrens, 2008). Se observa que la

---

<sup>3</sup> **CTD**(Conductivity-Temperature-Depth): Un CTD es un arreglo de sensores que miden conductividad (la conductividad mide qué tan bien una solución conduce la electricidad que esta relacionada directamente con la salinidad, en los cuerpos de agua dulce también se puede utilizar como indicador de contaminantes), temperatura y profundidad (se deriva de mediciones de presión al calcular la densidad del agua).

<sup>4</sup> **ADP** (Acoustic Current meter Profiler): Se utiliza para medir el movimiento del agua, como oleaje y corrientes en la columna de agua. Utiliza ondas de sonido para medir los movimientos del agua.

dirección del viento tiene una tendencia persistente de vientos provenientes del suroeste hacia el noreste.

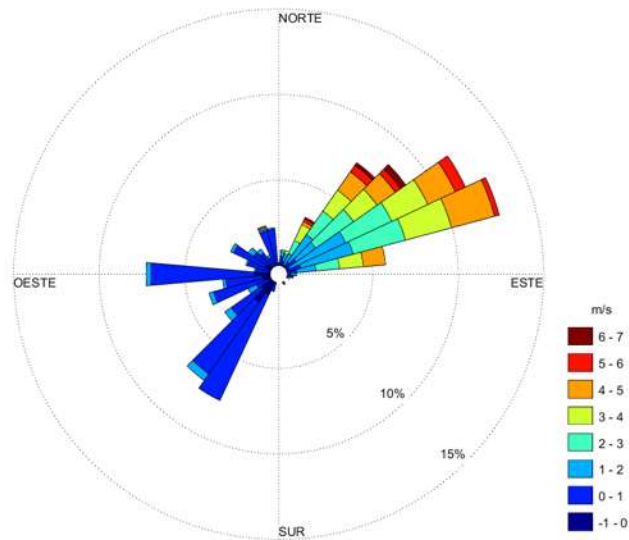


Figura 17. Rosa de viento con la convención meteorológica de las dos estaciones ubicadas a la orilla del lago.

En la Figura 18 se puede observar que a lo largo del año existe un patrón persistente en las variables meteorológicas con una variabilidad diurna bien definida. Con temperaturas alrededor de 20 °C durante el día de 9:00 am a 18:00 pm y temperaturas por debajo de los 15°C durante la noche. Con variaciones en el viento de calma (0.5 m/s) a periodos activos (3.5 m/s) con una ráfaga de viento de 6.5 m/s (Figura 16b y Figura 18). La dirección del viento es causada por el efecto brisa-valle-montaña<sup>5</sup> debido a la topografía del lugar.

<sup>5</sup> **Efecto brisa-valle-montaña:** Durante el día, el aire en las laderas despejadas de la montaña se calienta de manera muy rápida, de tal manera que asciende con facilidad por la ladera de ésta. En cambio, por la noche, éste aire en contacto con la pendiente de la montaña se enfría de manera más rápida y se torna más denso, provocando que el aire frío descienda por acción de la gravedad (Ahrens, 2008).

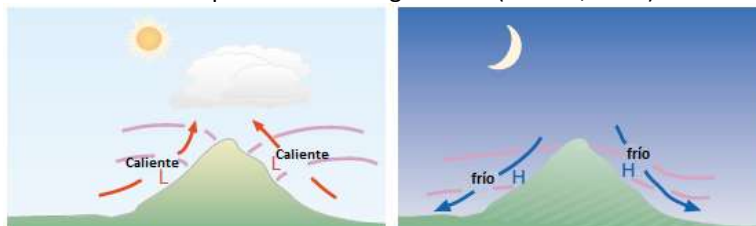


Figura P1. Esquema de efecto brisa-valle-montaña.

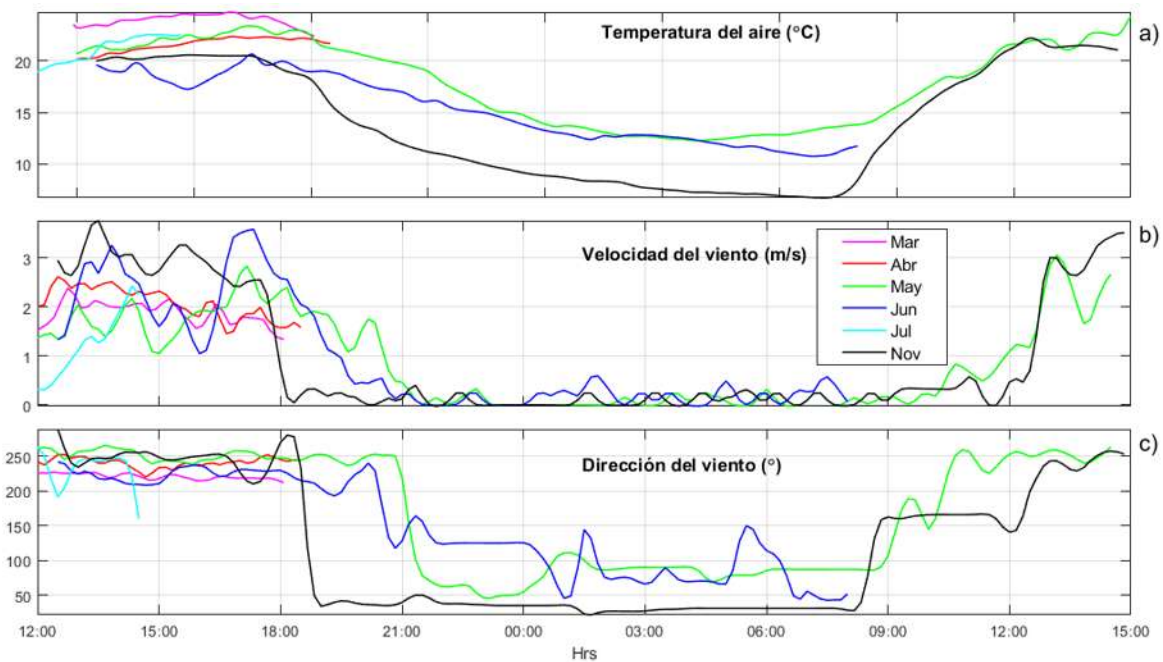


Figura 18. Datos de estación meteorológica de (a) temperatura del aire, (b) velocidad y (c) dirección del viento para cada salida de campo durante uno o dos días en marzo, abril, mayo, junio, julio y noviembre (leyenda en color).

## 5.2.2.CTD y cadena de termistores

Se midió la estructura térmica del lago utilizando un perfilador CTD XR-620 (RBR Ltd.) con una resolución de muestreo de 1 dato por segundo. Los muestreos se realizaron en tres ocasiones: 17 de febrero, 13 de mayo y del 21-23 de noviembre. A estos datos se les hizo un tratamiento y se interpolaron a un transecto para obtener la variabilidad espacial de la temperatura.

Para tener un registro continuo de la temperatura se colocó una cadena de termistores (HOBO, Onset Computers Corporation) en la parte más profunda del lago (~40 m) como se muestra en la Figura 19, con una resolución de muestreo de 5 min. Se colocó una cadena con 9 termistores a una profundidad aproximadamente de 37 m con un arreglo de 11, 13, 16, 18, 21, 26, 28, 30 y 37 m de profundidad

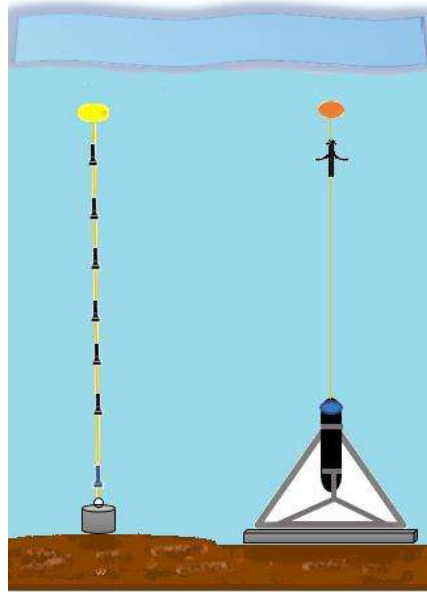


Figura 19. Esquema de cadena de termistores y de ADP.

De la Figura 20, se observa que en la capa superficial a 11,13 y 16 m hubo un enfriamiento del 29 de junio al 3 de agosto. La termoclina se localiza entre las series de tiempo de los 18 y 21 m donde se observa más variabilidad de 3.2-3.4 °C que en el resto de la columna de agua. En la base del metalimnio<sup>6</sup> también se observa una señal muy distintiva en las series de tiempo de 26, 28 y 30 m donde las temperaturas están alrededor de 16.5°C. La serie de tiempo de 37 m se mantuvo por debajo de los 16°C, con una variabilidad menor a 0.28°C y una desviación estándar de 0.05°C. Al calcular el espectro de potencia para estimar la variabilidad en el lago muestra que el desplazamiento principal de las isotermas es debido al forzamiento diurno (Figura 20b). Los otros dos periodos de oscilación muestran una alta variabilidad de 12-h (periodo principal) y otro alrededor de las 8-h. Los periodos de 8-h y 12-h se observan más intensos alrededor de la termoclina (entre los 18 y 21 m).

---

<sup>6</sup> **Metalimnio:** Los límites pueden ser variables, cambio brusco de temperatura. Capa de una masa de agua térmicamente estratificada en la que el gradiente de temperatura es máximo.

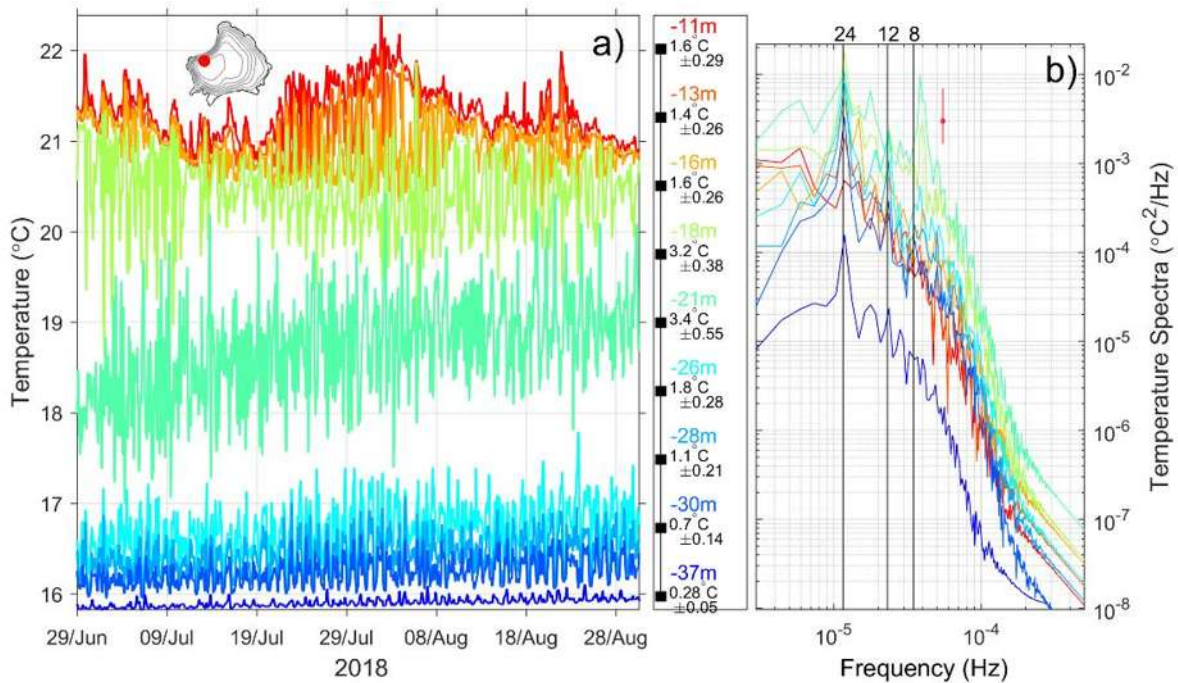


Figura 20. Serie de tiempo de la cadena de termistores para el periodo del 29 de junio al 28 de agosto. Las líneas de color corresponden a las profundidades del termistor. Mapa muestra la ubicación de la cadena de termistores. En el lado derecho, la posición en metros de cada termistor se muestra en color, el rango de amplitud °C y la desviación estándar en °C. En (b) la densidad espectral de potencia de la temperatura. Los números en la parte superior corresponden a periodos en horas. La barra roja es el intervalo de confianza de 95%.

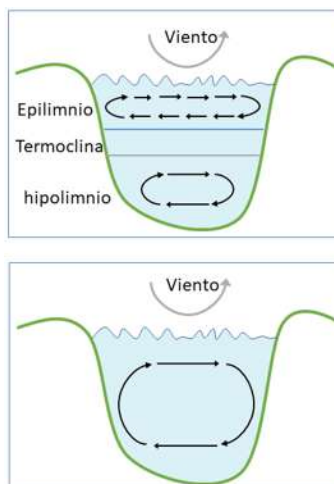
### 5.2.3. Datos de CTD

La distribución vertical de la temperatura del lago de transectos específicos se muestra en la Figura 21. Se observan las características de la estratificación a lo largo del año: el epilimnio, metalimnio y hipolimnio<sup>7</sup>. El lago de Zirahuén se considera como un lago de alta montaña, con mezcla durante el invierno, donde el lago alcanza temperaturas mínimas de 16°C (Figura 21). Durante primavera, el calor transferido a la superficie del lago comienza a desarrollar el perfil de temperatura y el epilimnio y metalimnio comienza a hacerse mayor. El epilimnio tiene una capa superficial mezclada de 5-7 m con temperaturas que alcanzan los 21°C y continúan aumentando hasta principios de junio donde se estratifica completamente. La profundidad de la base del metalimnio se encuentra a 20 m y a una temperatura de 16°C, en una capa de aproximadamente 10 m. La termoclina durante mayo es más profunda aproximadamente a los 15 m. Durante otoño comienza a enfriarse la superficie y el epilimnio se desarrolla por completo aproximadamente a los 15 m (Figura 21), la capa superficial de la isoterma a 19°C. El metalimnio disminuye a una capa de 5 m con la termoclina a un nivel más profundo de 20 m, pero con una

<sup>7</sup> **Epilimnio:** Capa más cálida, menos densa y más dinámica con respecto a las demás. Agua por encima de la termoclina en una masa de agua estratificada.

**Metalimnio:** Los límites pueden ser variables, cambio brusco de temperatura. Capa de una masa de agua térmicamente estratificada en la que el gradiente de temperatura es máximo.

**Hipolimnio:** Agua más fría y densa. Agua por debajo de la termoclina en una masa de agua estratificada. Está fuera de la influencia de la superficie y tiene un gradiente de temperatura relativamente pequeño (WMO, 2012).



FiguraP2. Esquema de lago monomítico. Capas Epilimnio, Metalimnio e Hipolimnio.

estratificación menos fuerte con temperaturas en el fondo de 16°C y con una temperatura superficial de 19°C y para mayo con temperaturas en el fondo que permanecen igual (16°C) y en la superficie alrededor de los 21°C.

En particular, se observa una mayor variabilidad en el epilimnio en la orilla noroeste del lago donde la temperatura del agua es un poco más cálida, de 0.5-1°C mayor (Figura 21 b,e,h).

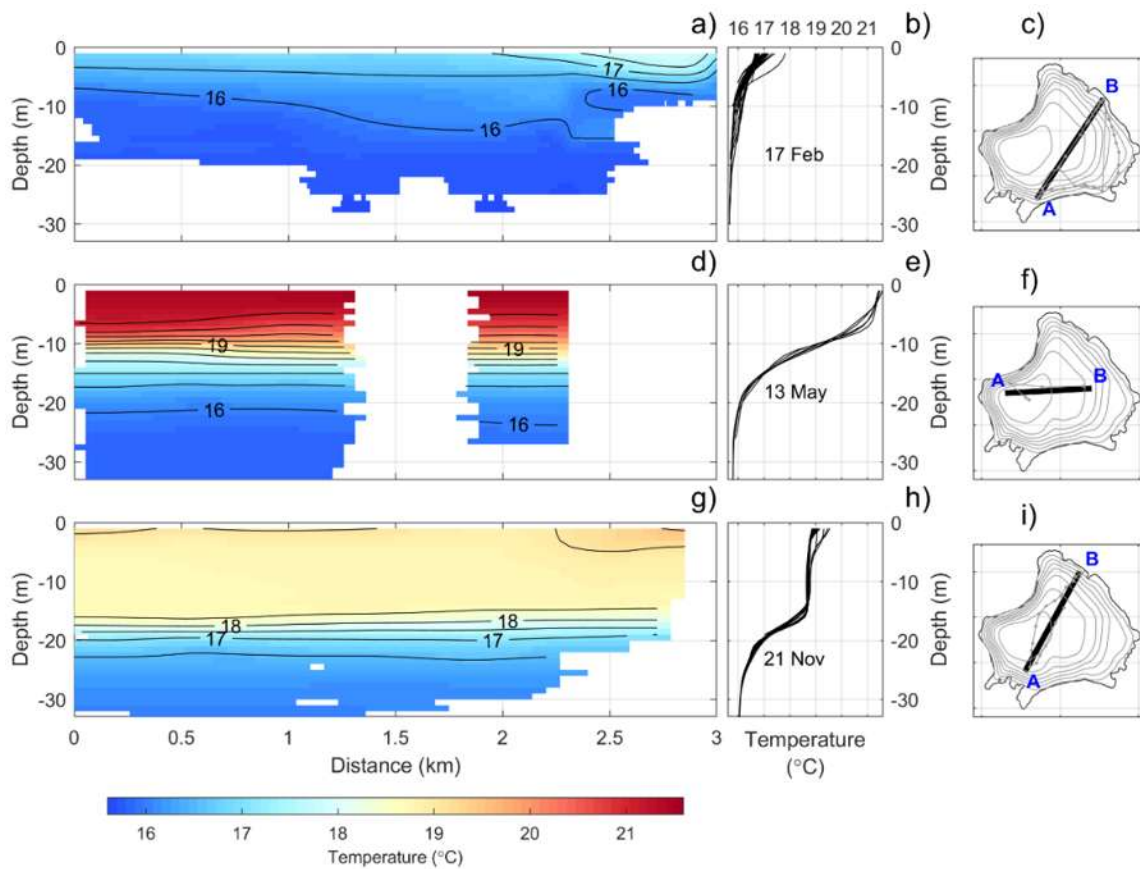


Figura 21. Transectos de datos de CTD obtenidos en (a) 17 de febrero, (d) 13 de mayo y (g) 21 de noviembre. Los perfiles de CTD (b,e,h) que se interpolaron con una técnica de mapeo objetivo en el transecto (a,d,g) para obtener la variabilidad espacial de la temperatura con la profundidad a lo largo del lago como se indica en el mapa de A-B (c,f,i).

## 5.2.4. Perfilador de corrientes (Correntómetro)

Un perfilador acústico Doppler (ADP, Aquapro, 400kHz) se colocó en el fondo del lago durante dos meses (julio-agosto) en el mismo lugar que la cadena de termistores (ver Figura 24). Se obtuvieron mediciones del perfil vertical de las tres componentes del campo de velocidad con un registro cada 5 min y una discretización de 1 m del fondo a la superficie.

## 5.3. Modelo Hidrodinámico Delft3D

En esta sección se presenta una breve descripción del modelo hidrodinámico, las ecuaciones gobernantes y los esquemas numéricos. Así como la configuración del modelo para la zona de estudio.

Delft3D, desarrollado por Deltares (Deltares, 2020b), es un sistema de cómputo muy completo que tiene integradas paqueterías de software para aproximaciones multidisciplinarias. Está diseñado para hacer simulaciones numéricas en 1D, 2D y 3D para regiones costeras, lagos, ríos y esteros. Se pueden realizar simulaciones de flujo, de transporte de sedimento, de oleaje, de desarrollos morfológicos y de calidad del agua. Delft3D cuenta con varios módulos que son capaces de interactuar entre sí: FLOW, WAVE, MOR, WAQ, PART y Delft Dash Board. Este modelo hidrodinámico se ha aplicado para simular la hidrodinámica, el transporte de sustancias y la calidad del agua en distintos lagos alrededor del mundo (Dissanayake et al., 2019; Jones & Hamilton, 2014; Liu, 2018; Ndungu et al., 2015; Soullignac et al., 2017).

Delft3D es un modelo numérico basado en diferencias finitas. Resuelve las ecuaciones de Navier Stokes para fluidos incompresibles, bajo la suposición de aguas someras y la aproximación de Boussinesq donde se considera que las variaciones en la densidad debidas a la temperatura o solidos disueltos no afectan la dinámica o la inercia del flujo. En la ecuación de momento vertical no se considera la aceleración vertical, lo que lleva a la ecuación de presión hidrostática. En modelos

3D las velocidades verticales se calculan a partir de la ecuación de continuidad (Deltares, 2020b; Lesser et al., 2004).

### 5.3.1. Configuración del modelo Delft3D

El dominio computacional de  $4 \times 3.5$  km se discretizo en una malla irregular con  $56 \times 54$  nodos en dirección horizontal y una resolución de malla de aproximadamente 70 m (Figura 16). Se utilizo el módulo RGFGRID del Delft3D para generar el archivo de la malla. El dominio vertical de 42 m de profundidad se discretizo en 40 capas verticales de aproximadamente 1 m cada capa desde la superficie hasta el fondo. Se utilizo una configuración Z para tener una malla regular en la vertical. Los datos de las mediciones de batimetría que se obtuvieron durante varias campañas se interpolaron con el uso del módulo QUICKIN del Delft3D, para obtener el archivo de profundidad.

El tamaño del paso del tiempo fue de 12 s para satisfacer el número de Courant-Friedrichs-Lewy (Deltares, 2020b):

$$CFL = \frac{\Delta t \sqrt{gH}}{\{\Delta x, \Delta y\}}$$

donde  $\Delta t$  es el paso de tiempo (s),  $g$  es la aceleración debida a la gravedad ( $m/s^2$ ),  $H$  es la profundidad total (m) y  $\{\Delta x, \Delta y\}$  es el valor característico de la resolución de la malla. La temperatura y el viento son los procesos físicos activos del modelo. Otros parámetros físicos como los que se muestran en la Tabla 8, se consideraron como valores típicos.

Tabla 8. Parámetros considerados para configuración del modelo

Parámetros	
Gravedad	9.81 m/s <sup>2</sup>
Densidad del agua	1000 kg/m <sup>3</sup>
Densidad del aire	1 kg/m <sup>3</sup>
Chézy uniforme	65 m <sup>1/2</sup> /s
Viscosidad turbulenta horizontal y vertical	0 m <sup>2</sup> /s

Difusividad horizontal y vertical	0 m <sup>2</sup> /s
numero de Dalton	0.0013
Profundidad de disco Secchi	3.8 m

## 5.4. Resultados de modelo hidrodinámico

Para obtener una representación del comportamiento hidrodinámico del Lago de Zirahuén, se trataron de reproducir las características del lago al utilizar el modelo numérico Delft3D. Los resultados numéricos obtenidos, son la primera aproximación de cómo el Lago de Zirahuén responde ante forzamientos atmosféricos. Se realizó la simulación para el periodo de junio-agosto 2018 debido a la disponibilidad de los datos meteorológicos.

En la Figura 22 se muestra que las temperaturas que se obtienen del modelo numérico muestran buenos resultados acordes con las observaciones, principalmente el comportamiento mensual. Sin embargo, se presentaron algunas dificultades para reproducir de manera adecuada el comportamiento diario de la variabilidad de la temperatura en diferentes niveles profundidad.

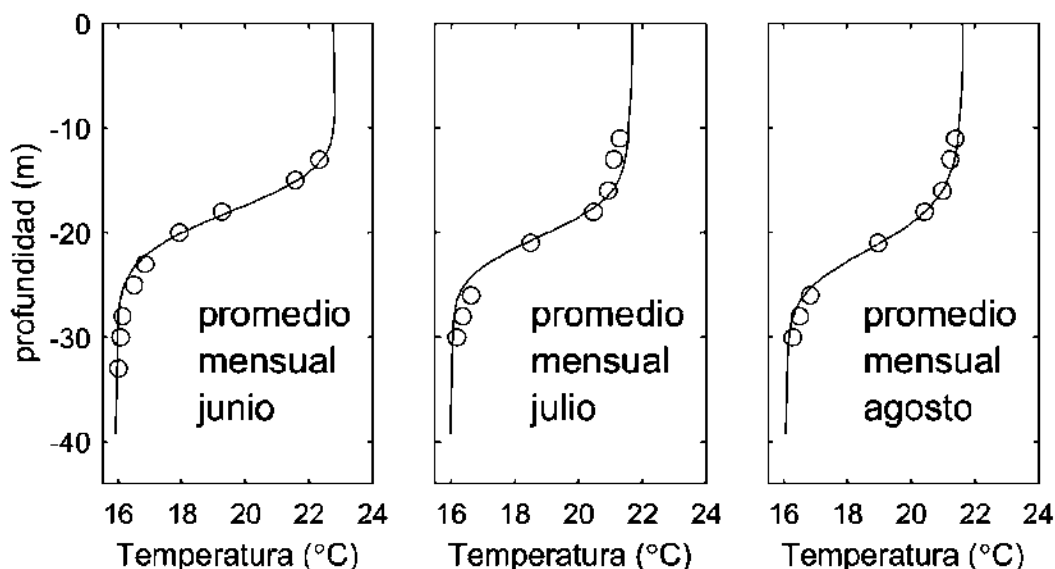


Figura 22. Promedio mensual de la distribución vertical de la temperatura del agua. Línea continua los resultados el modelo numérico y en círculos las observaciones.

Para resolver este problema, se utilizó la metodología del problema inverso aplicado al forzamiento del viento, el cual juega un papel importante en la calibración del modelo hidrodinámico.

### 5.4.1. Problema inverso para estimar $C_d$

El esfuerzo del viento juega un papel muy importante en los movimientos del agua por lo que fue uno de los parámetros principales considerados para la calibración del modelo numérico. En el modelo Delft3D el esfuerzo del viento se parametriza con base en el coeficiente de arrastre del viento,  $C_d$  (Deltares, 2020b).

Para la calibración del modelo se utilizó el método de identificación de parámetros que se basa en resolver un problema no lineal de mínimos cuadrados. En este caso implica determinar el valor del parámetro  $C_d$  al resolver el problema inverso ajustando las salidas del modelo con los valores de los datos observacionales al minimizar el error entre ambos.

La descripción de un sistema de agua superficial generalmente se basa en identificar y comprender los forzamientos externos al sistema. Uno de los principales forzamientos externos a las aguas superficiales son los atmosféricos, como el viento. El viento es una de las principales fuentes de energía en los lagos. Las corrientes debidas al viento son uno de los principales mecanismos en el transporte y distribución de contaminantes o partículas suspendidas.

El esfuerzo del viento es la fuerza tangencial por unidad de área debido al movimiento horizontal del viento sobre la superficie del agua. Se determina por la velocidad y dirección del viento y un coeficiente de arrastre que transforman la velocidad del viento en esfuerzo del viento. Este coeficiente de arrastre se estima utilizando algunos parámetros del agua y aire. La velocidad del viento es el parámetro dominante que determina el esfuerzo del viento:

$$\tau = C_d \rho_A U^2,$$

donde  $U$  es la velocidad del viento a 10 m sobre la superficie del agua,  $\rho_A$  la densidad del aire,  $C_d$  es el coeficiente del esfuerzo del viento. La densidad del aire varía con la temperatura, presión y humedad; los valores típicos son de 1.2 –

1.3 kg/m<sup>3</sup>. El coeficiente del esfuerzo del viento generalmente aumenta con la velocidad del viento, con

$$C_d = 1.0 \times 10^{-3} \quad \text{para } U \leq 5 \text{ m/s},$$

y que aumenta linealmente a  $1.5 \times 10^{-3}$  para una velocidad de viento de 15 m/s y

$$C_d = (0.61 + 0.063U) \times 10^{-3} \quad \text{para } 6 \text{ m/s} < U < 22 \text{ m/s},$$

este resultado se puede interpretar como un indicador de aumento en la rugosidad de la superficie del agua que se atribuye al aumento en la altura del oleaje. Para cuerpos de agua someras,  $C_d = 1.0 \times 10^{-3}$ , para cualquier valor de la velocidad de viento.

En este estudio de acuerdo con Dissanayake et al. (2019), se consideró un coeficiente  $C_d$  constante ya que la velocidad del viento oscila entre 0 y ~5 m/s.

Este parámetro  $C_d$  se buscó optimizar para lograr que el modelo hidrodinámico reproduzca de manera adecuada la variabilidad de la temperatura en la vertical y así calibrar el modelo.

Se utilizaron dos días de simulación para determinar el coeficiente  $C_d$  óptimo (Figura 23). La calibración del modelo se determinó al comparar la desviación estándar de la serie de temperatura de las observaciones con la de la simulación. El tiempo y costo computacional se redujeron considerablemente al minimizar el error de únicamente una de las series de temperatura. En la Figura 23, la línea negra representa la serie de tiempo registrada el 18 de junio por el termistor ubicado a 18 m de profundidad.

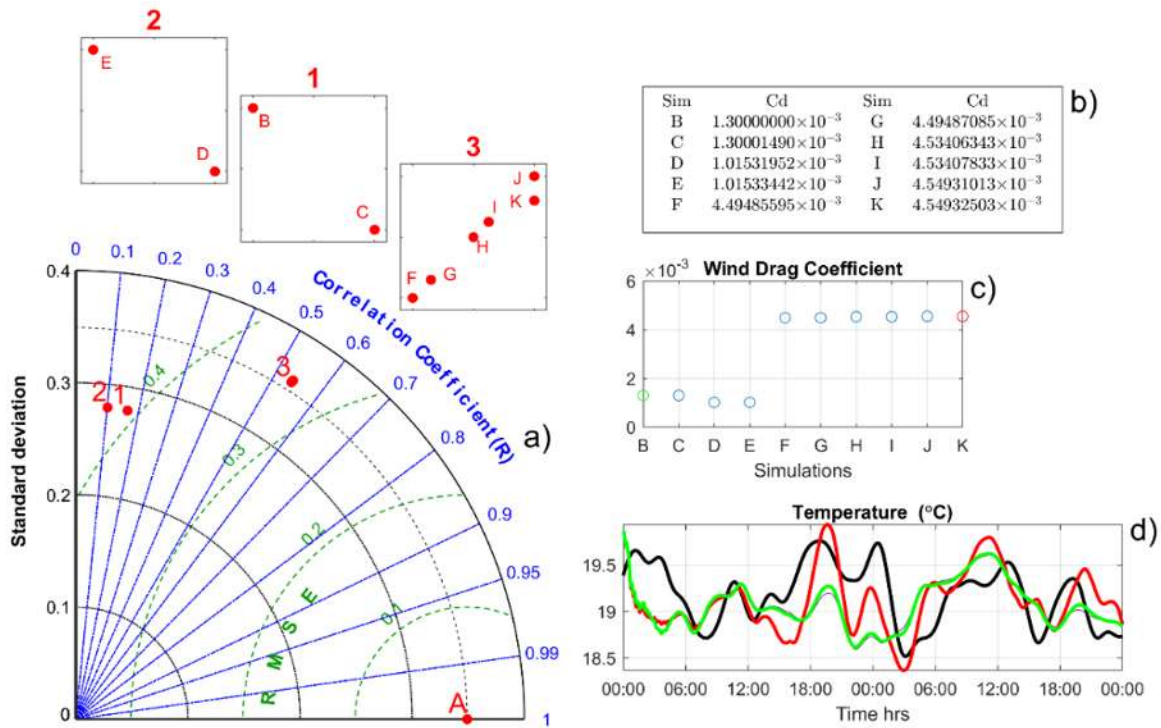


Figura 23. Calibración del modelo se basa en la optimización del coeficiente del esfuerzo del viento ( $C_d$ ) al considerar el campo de temperatura. (a) Diagrama de Taylor con tres grupos de las simulaciones. En este diagrama la letra A representa los datos observacionales y las otras letras representan 10 simulaciones; grupo 1 [B,C], grupo 2 [D,E] y grupo 3 [F-K], en la parte superior en los recuadros un acercamiento del diagrama de Taylor. En (b) los valores numéricos obtenidos del proceso de optimización. En (c) el procedimiento de optimizar que comienza (círculo verde) con el valor típico hasta encontrar el mejor parámetro (círculo rojo). En (d) la serie de tiempo de temperatura del termistor (línea negra), la simulación con el valor típico ( $C_d = 1.3 \times 10^{-3}$ ) para lagos (línea verde) y en rojo con el coeficiente óptimo ( $C_d = 4.5 \times 10^{-3}$ ).

Para realizar la calibración del modelo se utilizó un valor inicial de  $C_d = 1.3 \times 10^{-3}$ . El algoritmo evalúa alrededor de este punto y avanza hacia adelante o hacia atrás con un paso de tiempo adecuado para asegurar que la función objetivo disminuya. En este caso el algoritmo avanzó hacia adelante a un nuevo mínimo local en C, un poco más grande que B, después repitiendo este proceso de búsqueda hasta que converge al mínimo en K (Figura 23 b).

Se cuantifico la salida del modelo al hacer un análisis estadístico. Con el uso de diagrama de Taylor se pudo observar el desempeño del modelo (Figura 23). Se realizaron un total de 10 simulaciones hasta que se encontró el valor óptimo. El diagrama de Taylor muestra tres grupos (letras mayúsculas) que se obtuvieron después de varias simulaciones con una correlación aceptable, en este diagrama la letra A representa las observaciones y las otras letras representan las 10 simulaciones agrupadas en tres conjuntos cada uno con su desviación estándar (std), coeficiente de correlación<sup>8</sup> (R) y error cuadrático medio<sup>9</sup> (RMSE). El grupo 1 [B,C] y grupo 2 [D,E] con una valor de std ~0.3°C, R alrededor de 0.1 y 0.2 respectivamente, y un RMSE mayor a 0.4°C. El grupo 3 [F-K] muestra una mejoría considerable en el coeficiente de correlación mayor a 0.5°C y una aproximación mejor a las observaciones, ya que el RMSE disminuye cerca de los 0.3°C y la std cercana a A.

Con la simulación en Delft3D con el valor de default de  $C_d = 6.3 \times 10^{-4}$  se obtuvo una serie de tiempo plana con un rango de amplitud malo y un orden de magnitud distinto. Para la simulación con el valor típico para lagos ( $C_d = 1.3 \times 10^{-3}$ ) se obtuvo una serie de tiempo con un rango de amplitud aceptable y una orden de magnitud igual que las observaciones, pero con una correlación baja (Figura 23d). Con el procedimiento de optimización se encontró el coeficiente  $C_d = 4.5 \times 10^{-3}$  para el Lago de Zirahuén, que es casi tres veces mayor que el valor típico para lagos y océanos. Típicamente la velocidad del viento es mayor sobre la superficie del agua, lo que puede explicar por qué se obtuvo un valor alto para  $C_d$ .

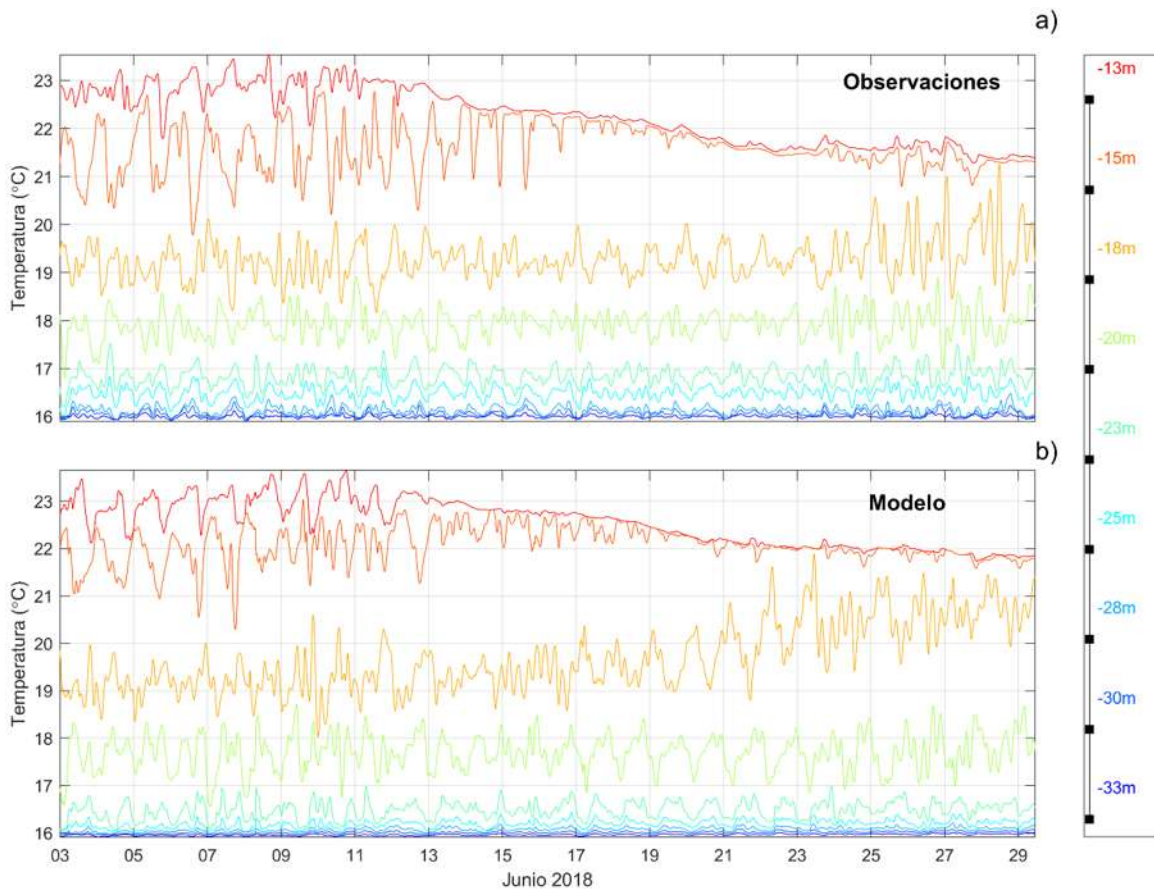
$${}^8 R^2 = \left[ \frac{\sum_{i=1}^n (Mod_i - \overline{Mod})(Obs_i - \overline{Obs})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (Mod_i - \overline{Mod})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Obs_i - \overline{Obs})^2}} \right]^2$$

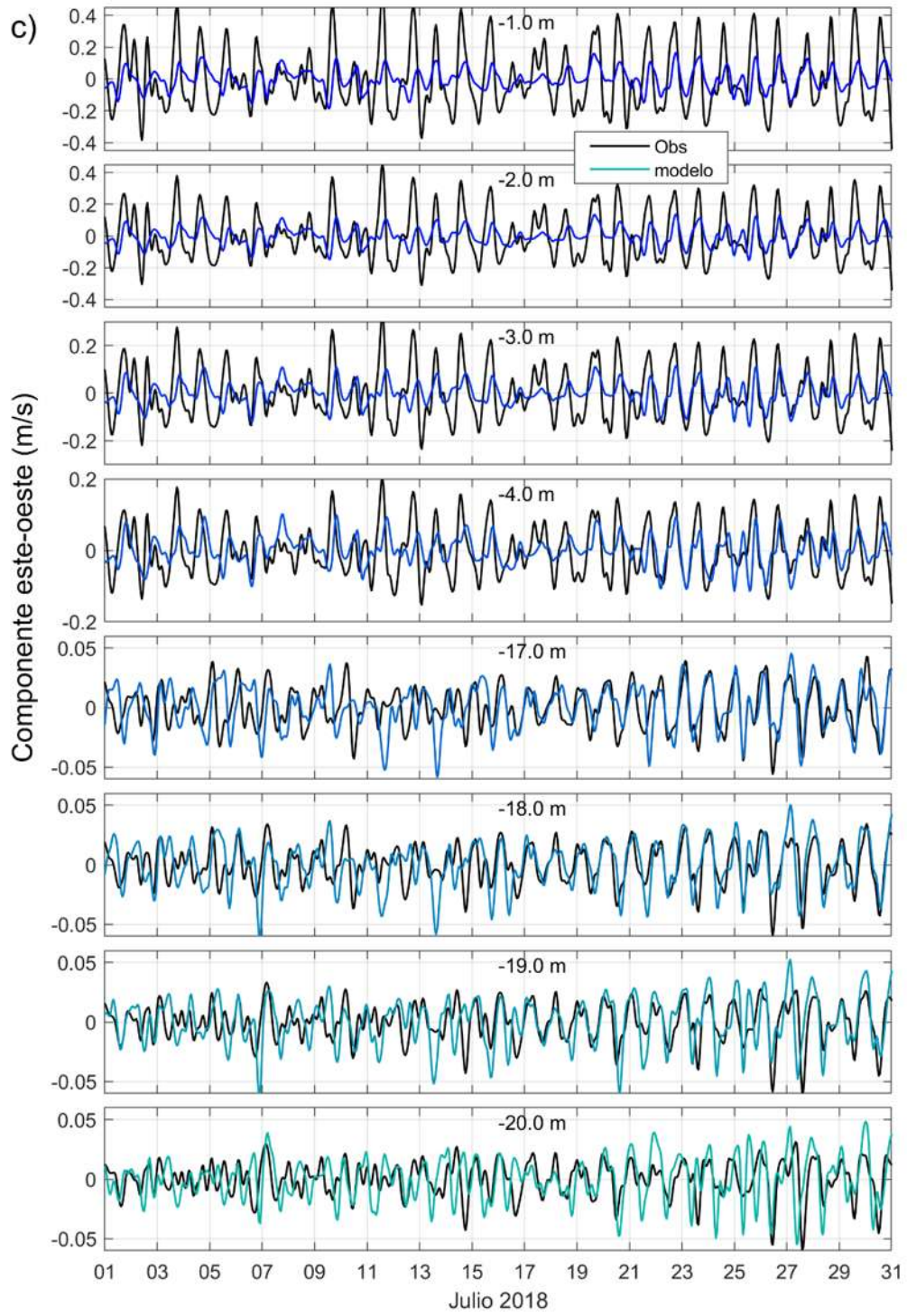
$${}^9 RMSE = \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Mod_i - Obs_i)^2 \right]^{1/2}$$

## 5.5. Validación del modelo

La simulación de la hidrodinámica del Lago de Zirahuén se validó al comparar los resultados del modelo con las observaciones de junio del 2018 para la temperatura del agua y para julio 2018 para las componentes de velocidad de las corrientes (Figura 24).

Se observan buenos resultados del modelo en comparación con las observaciones, principalmente en cómo el modelo logra reproducir el enfriamiento en la capa superficial alrededor del 11 de junio y hasta finales del mes. Además, el modelo reproduce adecuadamente la variabilidad en el epilimnio, metalimnio y hipolimnio.





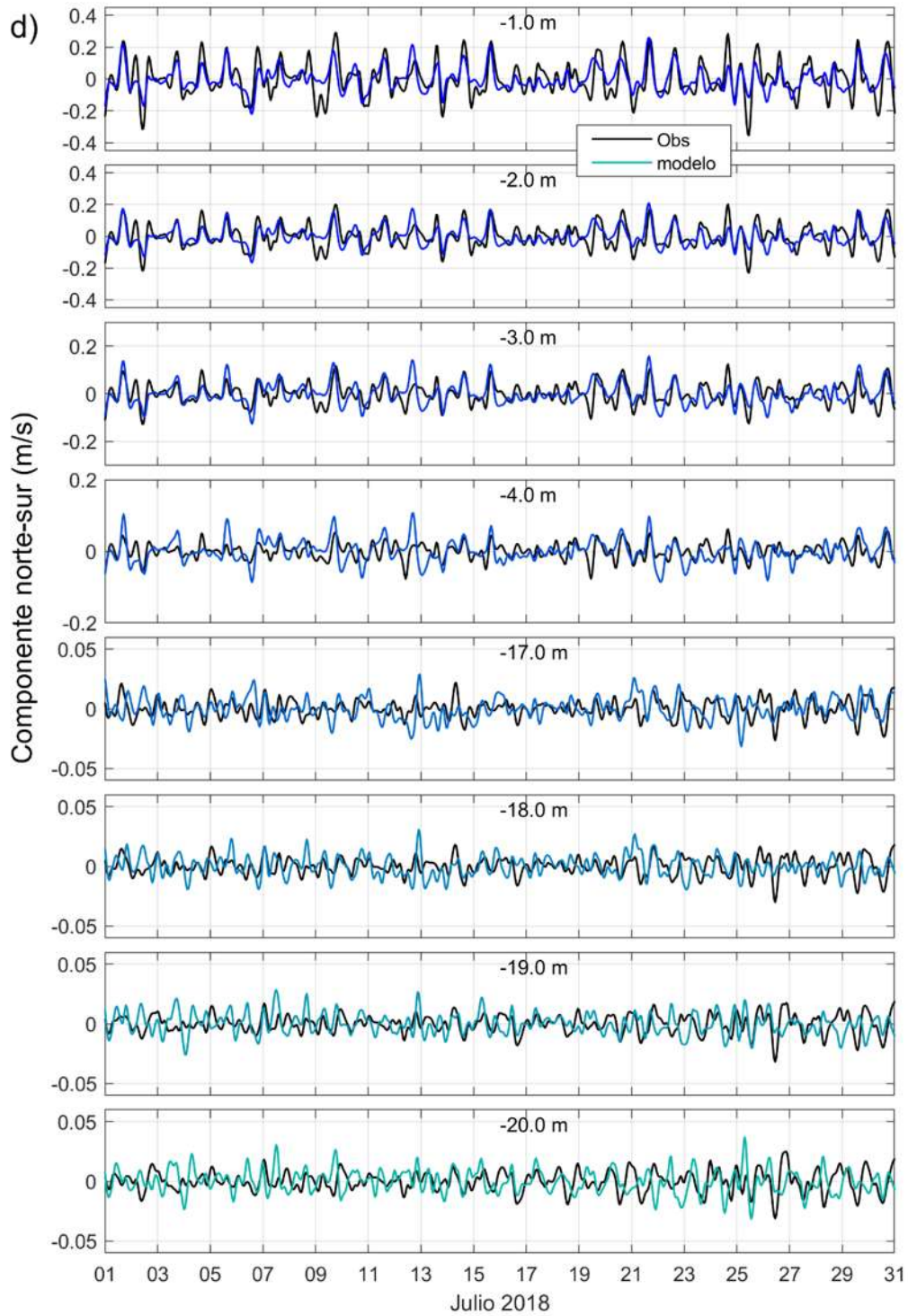


Figura 24. Comparación de las mediciones de la temperatura (a) y resultados de la simulación numérica (b) para junio 2018, en (c) el componente de velocidad  $u$ ; y en (d) el componente de velocidad  $v$  de julio 2018, las mediciones se muestran en negro y del modelo en tonos de azul.

En general una vez que se calibro el modelo se logra describir la hidrodinámica del Lago de Zirahuén de manera satisfactoria, en particular con respecto a la evolución de la circulación general y la hidrografía.

En la Figura 25 se muestran los resultados de las corrientes, temperatura y el promedio de velocidad del viento cada 2 h. El promedio es por periodos de 2 horas, es decir el resultado numérico obtenido para cada hora se promedió para cada día. Se observa la hidrodinámica que ocurre diario como: el calentamiento diurno, el efecto de la brisa-valle-montaña, y el vaivén de las corrientes.

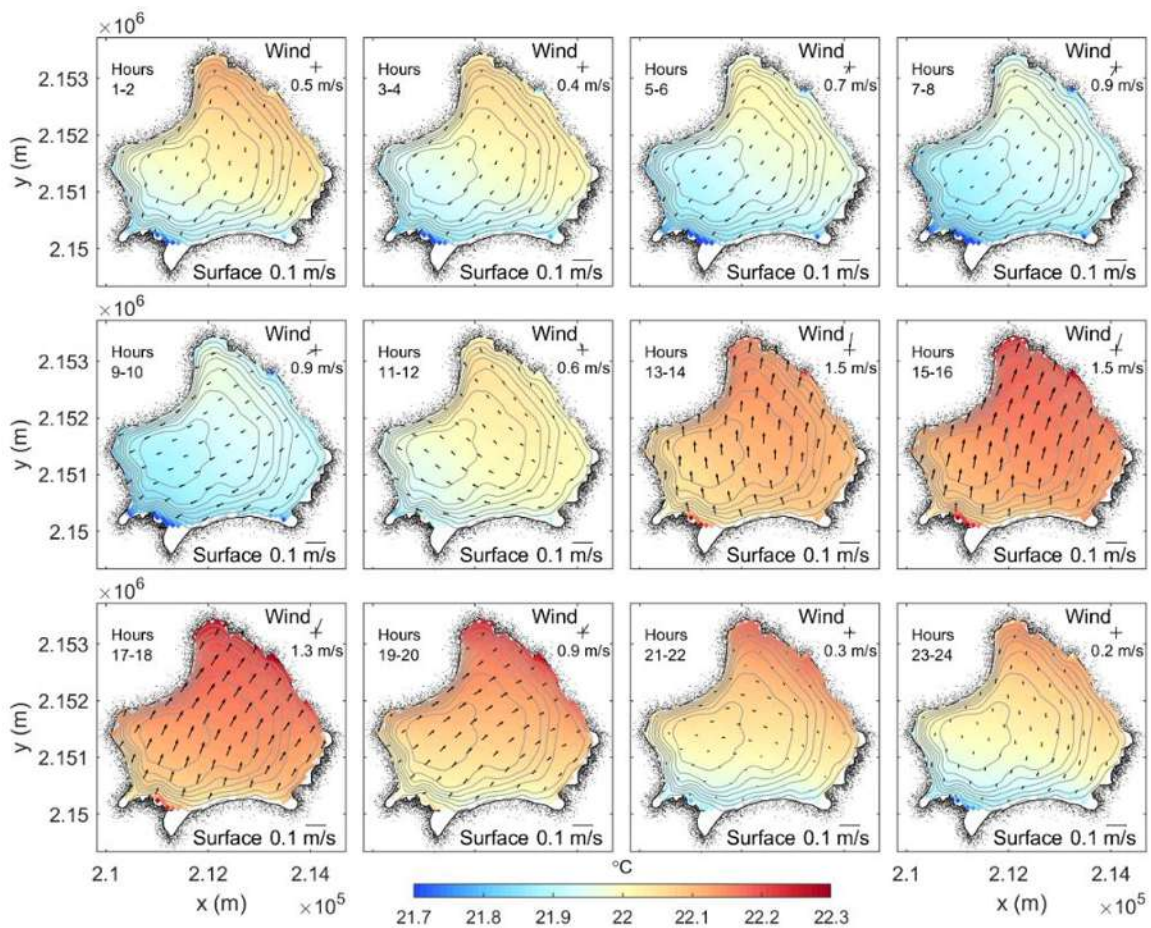


Figura 25. El promedio de la termodinámica en la superficie del lago. El promedio de la velocidad de las corrientes (vectores), temperatura (color) y la velocidad del viento (vector en la parte superior de cada recuadro).

## 5.6. Optimización para $a$ y $b$ del coeficiente de dispersión ( $D = at^b$ )

Para simular la distribución de la mancha de colorante se utilizó el módulo PART del modelo Delft3D, éste utiliza los datos de las corrientes obtenidas de las simulaciones del módulo FLOW (sección anterior). Para realizar el transporte o distribución de partículas en el módulo PART se utiliza el coeficiente de dispersión que se define como  $D = at^b$ .

El módulo de Delft3D-PART es un modelo aleatorio de seguimiento de partículas, se basa en el principio de que el movimiento de sustancias disueltas en el agua se puede describir por un número limitado de partículas discretas que están sujetas a la advección debido a las corrientes y por la difusión horizontal y vertical. Los coeficientes de difusión son los parámetros de entrada para los procesos de esparcimiento aleatorio. En el módulo PART todas las partículas tienen un desplazamiento aleatorio, la distancia del desplazamiento depende de la difusión local y el paso de tiempo del modelo, la dirección del desplazamiento es aleatoria. El método que se utiliza es el método de caminata aleatoria o de Monte Carlo (Deltares, 2020a).

El coeficiente de dispersión horizontal considera todas las fluctuaciones aleatorias que no se resuelven en la hidrodinámica del módulo FLOW. Para las simulaciones de seguimiento de partículas en el periodo inicial después de que se liberan las partículas, la concentración de partículas es relativamente pequeña y la distribución de las partículas es causada por un efecto de turbulencia de escala pequeña, aunque después de algún tiempo la concentración de partículas se distribuye lo suficiente de tal manera que la circulación de escalas mayores puede contribuir al efecto de mezcla. El coeficiente de dispersión modela los efectos de turbulencia que no se incluyeron en la hidrodinámica (Deltares, 2020a, 2020b).

La difusión turbulenta considera las desviaciones a pequeña escala del campo de velocidad media. Estas desviaciones están parcialmente correlacionadas y por lo tanto conducen a un desplazamiento adicional neto. Este desplazamiento adicional tiene una dirección aleatoria. Por lo tanto, es apropiado modelar el efecto como

dispersión. Los coeficientes de dispersión son pequeños del orden de  $1 \text{ m}^2/\text{s}$ , los procesos de turbulencia en esta escala son dependientes del tiempo. Esto se demuestra mediante el uso de la teoría cinética de los gases (Csanady, 1973; Deltares, 2020a), que describe la difusión molecular  $E$  como:

$$E = \int_0^t \langle \vec{v}(0), \vec{v}(\tau) \rangle d\tau,$$

donde  $\langle \vec{v}(0), \vec{v}(\tau) \rangle$  es el coeficiente de correlación Lagrangiana. Se utiliza la teoría de movimiento browniano para obtener la siguiente aproximación:

$$\langle \vec{v}(0), \vec{v}(\tau) \rangle = |v_0|^2 e^{-\tau/t_L},$$

con  $t_L$  una escala de tiempo adecuada. Esta expresión conduce a un coeficiente de difusión de la forma:

$$E = v_0^2 t_L (1 - e^{-t/t_L}).$$

Los límites de esta función son  $E = at$  para un  $t_L$  grande y  $E = a$  para un  $t_L$  pequeño. En el módulo PART se supone que los procesos de dispersión se pueden describir de la misma manera en que se puede ajustar el coeficiente de dispersión a una función con la potencia  $b$  con  $0 < b < 1$ , por lo que el coeficiente de dispersión horizontal se puede definir como:

$$D = at^b,$$

con  $a$  y  $b$  los coeficientes del modelo y  $t$  el tiempo.

### 5.6.1. Problema inverso de dispersión

De la sección del experimento del trazador (4.1. Experimento de trazador y el problema inverso para estimar la concentración) se realizó una estimación del área de la concentración a partir de las elipses óptimas, donde el área se define como (Simmons, 1996):

$$A_{obs} = \pi\sigma_{ma}^2\sigma_{mi}^2, \quad \text{con } \sigma_{ma}^2, \sigma_{mi}^2 \text{ los ejes mayor y menor.}$$

Entonces de las salidas del modelo PART se calcula el área que se obtiene de la distribución de partículas con el coeficiente de dispersión dado. De ahí que la formulación matemática del problema inverso para encontrar los parámetros  $a$  y  $b$  del coeficiente de dispersión se obtiene al minimizar la función  $f$  dada por la diferencia entre el área  $A$  que se obtiene del modelo y el área de las observaciones  $A_{obs}$  en distintos tiempos:

$$\min f(a, b) := \|r\|_2^2, \quad r = A - A_{obs}.$$

Para esto se consideró hacer varias simulaciones para los valores de los parámetros, ya que a la hora de optimizar se presenta un problema debido a que el valor inicial puede ser un mínimo local (o global). Se consideró tomar valores iniciales para  $a$  y  $b$  en el siguiente rango

$$7 \times 10^{-8} < a < 1 \times 10^{-7},$$

$$7 \times 10^{-8} < b < 1 \times 10^{-7},$$

con una tolerancia  $tol = 1 \times 10^{-16}$ .

Para la configuración del modelo se liberaron partículas en la región donde se realizó el experimento del trazador (Figura 16). El modelo se ejecutó por un periodo de 1 h. Se liberaron cien partículas en la superficie. Como lo que se quiere simular y observar ocurre en escalas más pequeñas y no en todo el lago, entonces el modelo integra otra forma de simular los procesos de dispersión al incorporar términos aleatorios de manera implícita con el coeficiente de dispersión. Al realizar varias iteraciones con los valores que se toman como iniciales se logra encontrar parámetros óptimos que minimizan las áreas. En la Figura 26 se muestran las áreas obtenidas al considerar distintos valores iniciales para  $a$  y  $b$ .

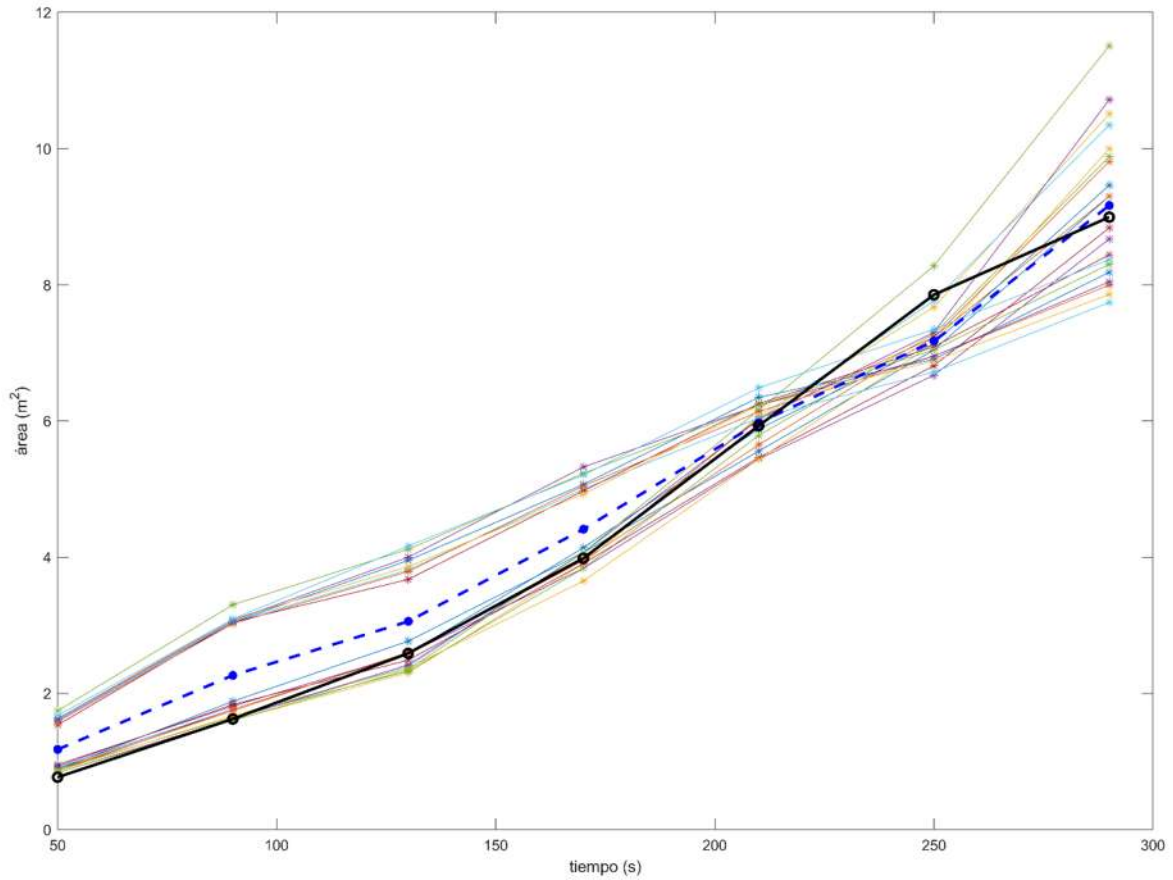


Figura 26. Las líneas en color representan el área con diferentes  $a$  y  $b$  iniciales. En azul punteada se muestra el promedio. En negro el área obtenida de las observaciones.

Algunos de valores óptimos que se obtuvieron para  $a$  y  $b$  se muestran en la Tabla 9, independientemente del valor inicial considerado.

Tabla 9. Valores óptimos obtenidos de  $a$  y  $b$

$a$	$b$		$a$	$b$
$0.53 \times 10^{-5}$	1		$7.90 \times 10^{-7}$	1.4
$0.19 \times 10^{-5}$	1.2		$5.2 \times 10^{-7}$	1.5
$0.07 \times 10^{-5}$	1.4		$3.93 \times 10^{-4}$	0.09
$0.49 \times 10^{-5}$	1		$2.92 \times 10^{-4}$	0.16
$0.19 \times 10^{-5}$	1.2		$3.46 \times 10^{-4}$	0.13
$0.07 \times 10^{-5}$	1.4		$3.66 \times 10^{-4}$	0.11
$5.01 \times 10^{-6}$	1		$4.1 \times 10^{-4}$	0.07
$3.19 \times 10^{-6}$	1.1		$4.61 \times 10^{-4}$	0.05
$2.03 \times 10^{-6}$	1.2		$5.53 \times 10^{-4}$	0.02
$1.22 \times 10^{-6}$	1.3		$4.66 \times 10^{-4}$	0.06

Cabe señalar que todos los valores para los parámetros muestran un buen resultado ya que se logra minimizar el error y las áreas obtenidas tienen una buena aproximación a las observaciones (Figura 26). En Deltares (2020a) se menciona que el valor para  $b$  debe tomar valores entre cero y uno ( $0 < b < 1$ ), los valores de default que proponen son  $a = 1$  y  $b = 0.01$ , pero para los valores que están en este rango se obtiene una sobreestimación del área, ya que se observa un desfase en las áreas en los primeros tiempos (no mostrado).

A continuación, se muestran los resultados obtenidos al realizar la simulación del modelo hidrodinámico y de dispersión. Se consideró el coeficiente de dispersión óptimo como  $a = 0.5 \times 10^{-5}$  y  $b = 1$ , para considerar los rangos que se sugieren en la literatura. En la Figura 27 se muestra la distribución espacial y temporal de un trazador para dos configuraciones con distinto forzamiento de viento, se observa que la concentración sigue el patrón del viento, en (a) el trazador se movió ~15 m hacia la izquierda y ~40 m al sur desde el punto de inicio hasta el tiempo final, mientras que en (b) debido al forzamiento que se consideró se observa que la mancha se desplaza únicamente ~2 m hacia la derecha.

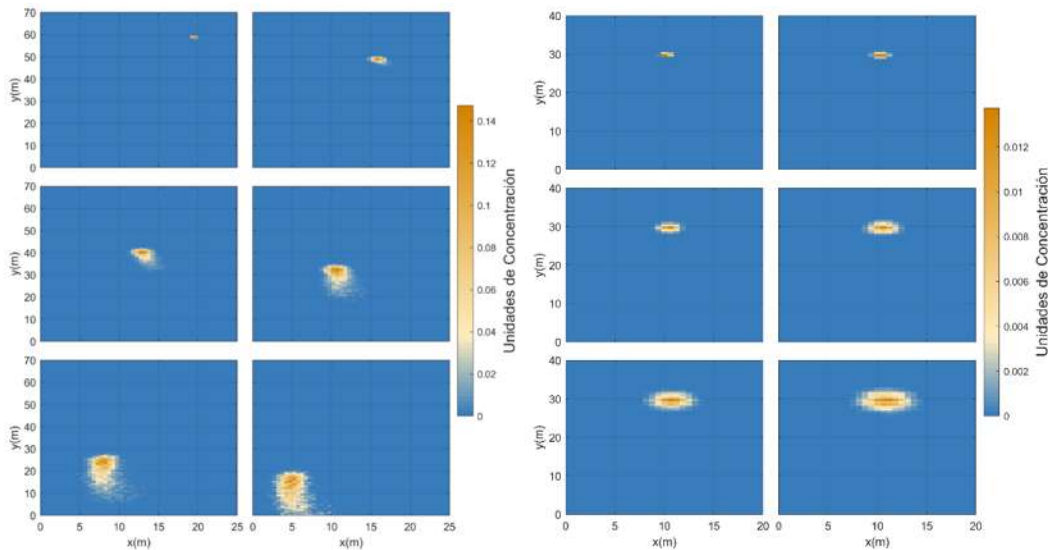


Figura 27. Distribución espacial y temporal del trazador.

Como se observa en la Figura 27 es importante que para la configuración se tengan mediciones de la mayoría de los parámetros para que los resultados reproduzcan resultados lo más reales que sea posible, sin embargo, con estas configuraciones se tiene una representación adecuada de la distribución de sustancias en el interior del lago.

Como se mencionó anteriormente, la importancia de realizar estudios de dispersión de partículas sirve como herramienta para la planificación y conservación de cuerpos de ecosistemas, ya que son de gran utilidad para identificar los sitios prioritarios de cierta especie, de descarga de contaminantes o sustancias, permanencia de patrones biofísicos, etc. (Li & Yao, 2015; Zhao et al., 2012). En particular estudiar la dispersión de partículas ayuda a comprender la distribución y abundancia de sustancias, así como ubicar los sitios de origen y de asentamiento y cómo es que se conectan las zonas mediante intercambio de partículas.

## 5.7. Conectividad

La conectividad es muy importante para resolver problemas de carácter ambiental en cuerpos de agua. Por ejemplo, para evaluar el riesgo de la exposición a un contaminante de una fuente puntual se requieren evaluar las concentraciones de

contaminante que se han distribuido a otros lugares en la región como función del tiempo. Existen métodos indirectos de conectividad tales como los de modelación numérica, que pueden brindar información acerca de la dirección, escala espacial y la magnitud de la dispersión de partículas (larvas, contaminantes, micro-plásticos). Además, la importancia de realizar estudios de dispersión y conectividad de partículas sirve como herramienta para la conservación y planificación, ya que son de gran utilidad para identificar los sitios prioritarios de cierta especie, aislamientos y movilidad de poblaciones, permanencia de patrones biofísicos, etc. (Lynch et al., 2014; Marinone et al., 2008; Mitarai et al., 2009; Mora & Sale, 2002). En particular estudiar la dispersión de partículas ayuda a comprender la distribución y abundancia de organismos o sustancias, así como ubicar los sitios de origen y de asentamiento y como se conectan las zonas mediante intercambio de partículas.

A continuación, se muestran los resultados obtenidos al realizar simulaciones del modelo hidrodinámico y de dispersión que se utilizó para estimar la conectividad superficial en el Lago de Zirahuén. Se muestran resultados donde se liberaron partículas únicamente de dos regiones por un periodo de 30 días.

Se liberaron 1000 partículas de 2 regiones (total 2000) que representan posibles zonas de descarga (en la región B y otra en la región D, Figura 28). Se dividió el lago en siete regiones y se estimó el intercambio de partículas entre cada región y de las salidas del modelo se calcularon las trayectorias de las partículas siguiendo un esquema de advección difusión.

01-Jun-2018 17:00:00

02-Jun-2018 05:00:00

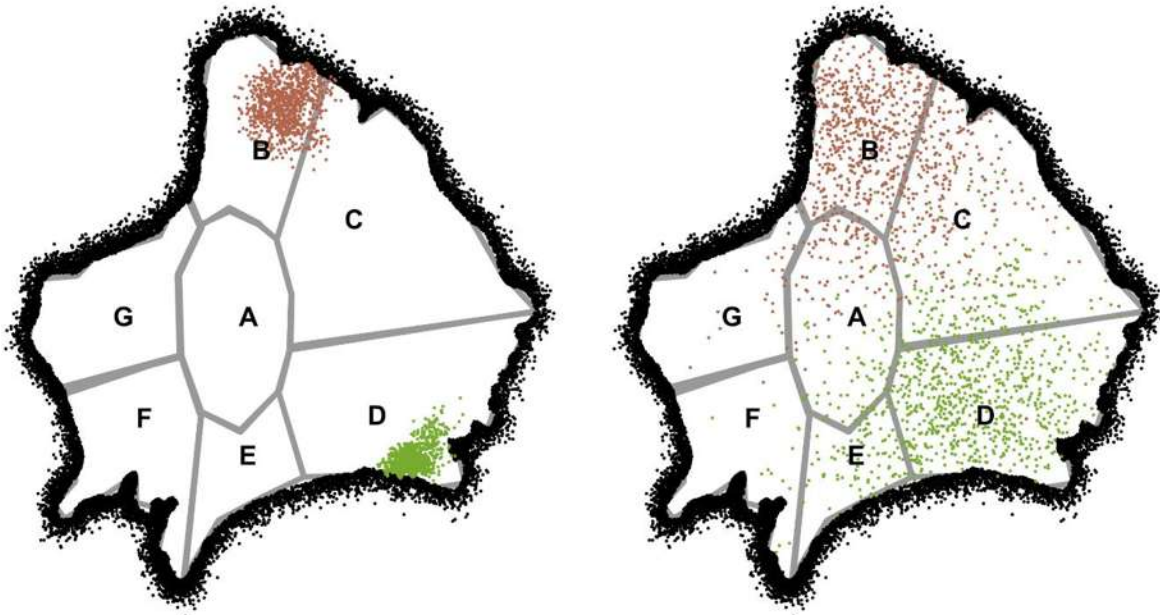


Figura 28. Partículas liberadas de la región B y D. Distribución espacial y temporal de las partículas en el Lago de Zirahuén.

En la Figura 29 se muestran los resultados de la distribución de las partículas que llegan a diferentes regiones en distintos tiempos. En el segundo día la distribución de las partículas de la región D y B hacia las otras regiones, se puede observar que la mayor cantidad de partículas siguen el patrón del viento hacia el noreste del lago. En los días posteriores la mayor parte de partículas liberadas de la región B se encuentran en la región C y D siguiendo el patrón del viento (Figura 17), al igual que las partículas liberadas de la región D.

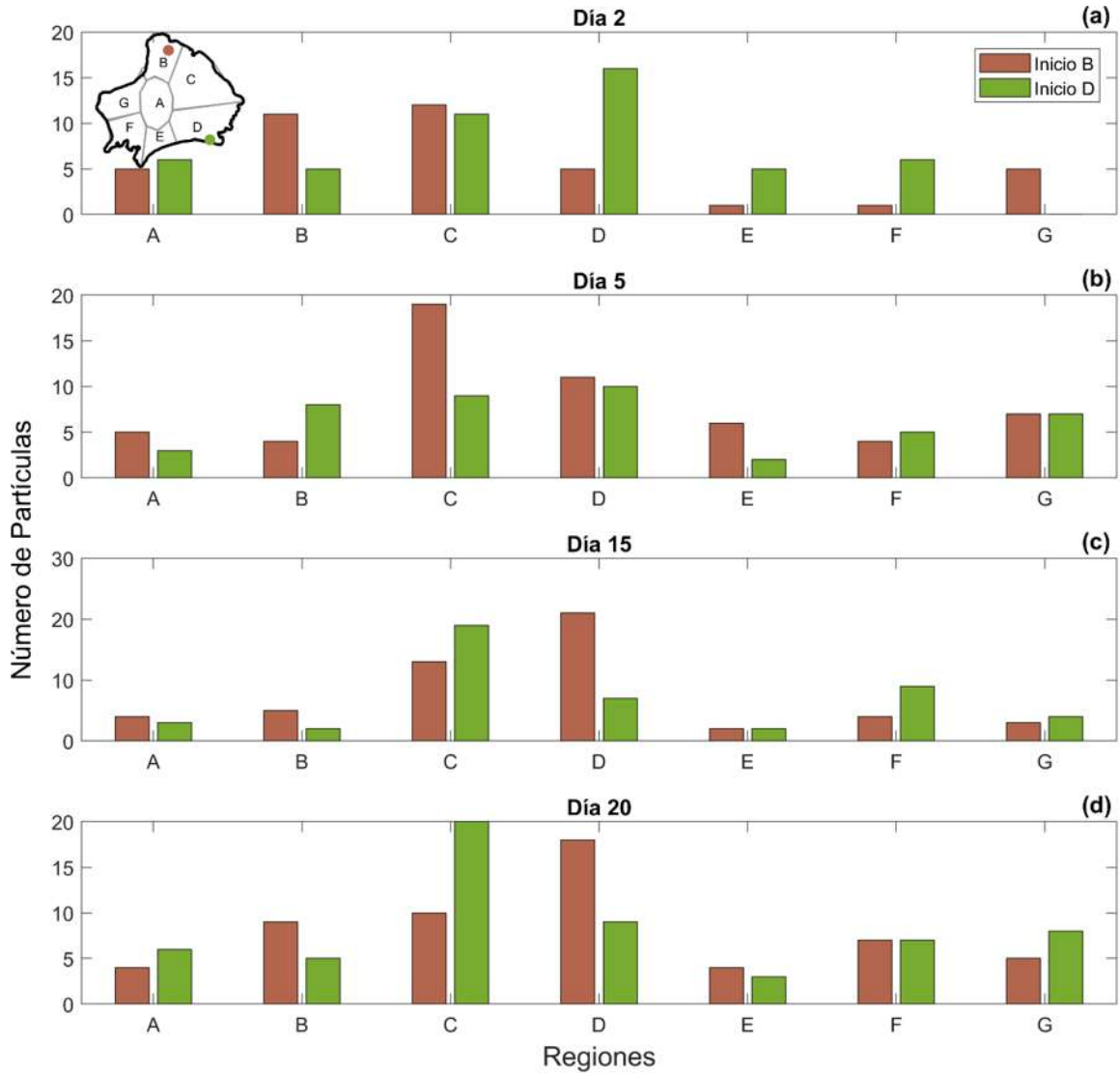


Figura 29. Distribución de partículas liberadas de la región B (café) y D (verde) en Lago de Zirahuén dividido en 7 regiones (A-G), en (a) dos días después de que se liberaron, a los cinco días (b), quince días (c) y veinte días (d).

Solo se muestra la conectividad que se obtuvo de liberar partículas de dos regiones ya que falta hacer muestreo en el lago para poder validar esta parte de conectividad.

## 5.8. Conclusiones para la modelación numérica del Lago de Zirahuén

En este capítulo se presentó un poco de la zona de estudio, de la recolección de datos y de la configuración del modelo hidrodinámico.

De los datos obtenidos en las salidas de campo durante el 2018, se puede decir que el Lago de Zirahuén se ve forzado por un viento consistente proveniente del noroeste debido al efecto topográfico de brisa de valle y montaña. El viento comienza a soplar alrededor de medio día y para alrededor de las 19:00 pm se llega a calma. Se observa una variabilidad diurna y temporal bien definida.

Los resultados del modelo hidrodinámico en promedio son aceptables, en particular la evolución de la temperatura y las corrientes en la capa superficial. El comportamiento del lago muestra corrientes superficiales que reaccionan al esfuerzo del viento diariamente y transporta la temperatura a la parte norte del lago.

Con base en los resultados preliminares se pudo obtener información acerca de la dirección y la dispersión que siguen las partículas debido al patrón del viento. Aunque ya se tiene una aproximación inicial de cómo es la conectividad y el comportamiento de partículas en el lago, falta cuantificar y hacer un análisis estadístico más detallado del movimiento de éstas.

Finalmente, para la dinámica de interés de este problema es necesario conocer la zona de estudio antes de proponer cualquier problema ya que no existe una solución general que pueda aplicarse a todos los casos, sin embargo, con el enfoque de optimización se encontró una forma eficaz de encontrar parámetros para diferentes situaciones. Lo primero a considerar es tratar de comprender todos los fenómenos físicos que ocurren en la zona de estudio para lograr tener una mejor configuración del modelo.

Como trabajo a futuro queda pendiente realizar un monitoreo continuo del lago, así como hacer mediciones para validar los procesos de conectividad, calibrar otros parámetros para el modelo hidrodinámico y acoplarlo con otros módulos para tener

una representación más adecuada de los procesos biogeoquímicos. Se espera que este trabajo de investigación motive la elaboración de otros similares y que sea una herramienta que contribuya a minimizar los daños ocasionados por la contaminación, mediante la elaboración de planes de contingencia.

## Bibliografía

- Ahmed, S. (2012). A Numerical Algorithm for Solving Advection-Diffusion Equation with Constant and Variable Coefficients. *The Open Numerical Methods Journal*, 4(1). <https://doi.org/10.2174/1876389801204010001>
- Ahrens, C. D. (2008). Essentials of meteorology: an invitation to the atmosphere. *Book Chpater*.
- Bachman, S., Fox-Kemper, B., & Bryan, F. (2020). A Diagnosis of Anisotropic Eddy Diffusion From a High-Resolution Global Ocean Model. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 12(2).  
<https://doi.org/https://doi.org/10.1029/2019MS001904>
- Bernal-Brooks, F. W., Dávalos-Lind, L., & Lind, O. T. (2002). Assessing trophic state of an endorheic tropical lake: The algal growth potential and limiting nutrients. *Archiv Fur Hydrobiologie*, 153(2). <https://doi.org/10.1127/archiv-hydrobiol/153/2002/323>
- Bernal-Brooks, Fernando W., Sánchez Chávez, J. J., Bravo Inclán, L., Hernández Morales, R., Martínez Cano, A. K., Lind, O. T., & Dávalos-Lind, L. (2016). The algal growth-limiting nutrient of lakes located at mexico's mesa central. *Journal of Limnology*, 75(1S). <https://doi.org/10.4081/jlimnol.2016.1439>
- Bezerra, M. O., Akel, A. R., Araújo, T. R. C., Krelling, A. P. M., & Redondo, J. M. (2009). Application of aerial video images for lagrangian tracer studies in maritime and estuarine port zones. *Journal of Coastal Research, SPEC. ISSUE 56*.
- Branch, M. A., Coleman, T. F., & Li, Y. (1999). Subspace, interior, and conjugate gradient method for large-scale bound-constrained minimization problems. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 21(1).  
<https://doi.org/10.1137/S1064827595289108>

- Brodkey R. E., H. C. H. (1988). *Transport phenomena: A unified approach*. McGraw Hill International Edition.
- Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., & Bodmann, B. (2012). Air Pollution Steady-State Advection-Diffusion Equation: The General Three-Dimensional Solution. *Journal of Environmental Protection*, 03(09).  
<https://doi.org/10.4236/jep.2012.329131>
- Chapra, S. C. (1997). Surface Water-Quality Modeling. In *McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering*.
- Chaudhuri, D. (2010). A simple least squares method for fitting of ellipses and circles depends on border points of a two-tone image and their 3-D extensions. *Pattern Recognition Letters*, 31(9).  
<https://doi.org/10.1016/j.patrec.2010.01.009>
- Coleman, T., Branch, M., & Grace, A. (2008). Matlab Optimization Toolbox. *Change*, 42. <https://software.sandia.gov/trac/poblano>
- Coleman, T. F., & Li, Y. (1994). On the convergence of interior-reflective Newton methods for nonlinear minimization subject to bounds. *Mathematical Programming*, 67(1).
- Coleman, T. F., & Li, Y. (1996). An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds. *SIAM Journal on Optimization*, 6(2).  
<https://doi.org/10.1137/0806023>
- Courant, R., & Hilbert, D. (2008). Methods of Mathematical Physics. In *Methods of Mathematical Physics* (Vol. 2). <https://doi.org/10.1002/9783527617234>
- Croaze, A., Pittman, L., & Reynolds, W. (2012). Solving Nonlinear Least-Squares Problems With the Gauss-Newton and Levenberg-Marquardt Methods. *Math.Lsu.Edu*.
- Csanady, G. T. (1973). Turbulent Difusion in the Environment. *Reidel Publishing*

*Company, Dordrecht-Holand / Boston-U.S.A., 3 .((1973)).*

<https://doi.org/10.1007/978-94-010-2527-0>

Cushman-Roisin, B., & Beckers, J.-M. (2010). Introduction to Geophysical Fluid Dynamics. Physical and Numerical Aspects. In *Analysis* (Vol. 101).

Deltares. (2020a). *D-Waq PART, simulation of mid-field water quality and oil spills, using particle tracking, User Manual D-Water Quality.*

Deltares. (2020b). *Simulation of Multi-Dimensional Hydrodynamic Flows and Transport Phenomena, Including Sediments; User Manual Delft3D-FLOW (Version 3.15).* Deltares.

Dissanayake, P., Hofmann, H., & Peeters, F. (2019). Comparison of results from two 3D hydrodynamic models with field data: internal seiches and horizontal currents. *Inland Waters*, 9(2). <https://doi.org/10.1080/20442041.2019.1580079>

Domínguez-Mota, F., Lucas-Martínez, J. S., & Tinoco-Guerrero, G. (2020). A generalized finite-differences scheme used in modeling of a direct and an inverse problem of advection-diffusion. *International Journal of Applied Mathematics*, 33(4). <https://doi.org/10.12732/ijam.v33i4.5>

Edwards, M. G. (1998). Cross flow tensors and finite volume approximation with by deferred correction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151(1–2). [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(97\)00109-6](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00109-6)

Emery, W. J., & Thomson, R. E. (1997). Data analysis methods in physical oceanography. In *Data analysis methods in physical oceanography.* <https://doi.org/10.2307/1353059>

Forsythe, G. E. (1970). Pitfalls in Computation, or why a Math Book isn't Enough. *The American Mathematical Monthly*, 77(9). <https://doi.org/10.2307/2318109>

Gasca-Ortiz, T., Pantoja, D. A., Filonov, A., Domínguez-Mota, F., & Alcocer, J. (2020). Numerical and observational analysis of the hydro-dynamical

- variability in a small lake: The case of Lake Zirahuén, México. *Water (Switzerland)*, 12(6). <https://doi.org/10.3390/W12061658>
- Gavin, H. P. (2019). The Levenburg-Marquardt Algorithm For Nonlinear Least Squares Curve-Fitting Problems. *Duke University*.
- Gill, P. E., & Murray, W. (1978). Algorithms for the Solution of the Nonlinear Least-Squares Problem. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15(5). <https://doi.org/10.1137/0715063>
- Gockenbach, M. S. (2006). Understanding and Implementing the Finite Element Method. In *Understanding and Implementing the Finite Element Method*. <https://doi.org/10.1137/1.9780898717846>
- Guerrero, M., & Lamberti, A. (2007). *Cloud Image Processing for velocity acquisition*.
- Gupta, H. V., Sorooshian, S., & Yapo, P. O. (1998). Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and noncommensurable measures of information. *Water Resources Research*, 34(4). <https://doi.org/10.1029/97WR03495>
- Hanke, M., & Hansen, P. C. (1993). Regularization methods for large-scale problems. *Surv. Math. Ind.*, 3.
- Hasanoğlu, A. H., & Romanov, V. G. (2017). Introduction to inverse problems for differential equations. In *Introduction to Inverse Problems for Differential Equations*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-62797-7>
- Hindmarsh, A. C., Gresho, P. M., & Griffiths, D. F. (1984). The stability of explicit Euler time-integration for certain finite difference approximations of the multi-dimensional advection–diffusion equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 4(9). <https://doi.org/10.1002/flid.1650040905>
- Hirsch, C. (2007a). Numerical computation of internal and external flows, volume 1: Fundamentals of numerical discretization. In *International Journal of Heat and*

*Fluid Flow* (Vol. 1).

Hirsch, C. (2007b). Numerical computation of internal and external flows. Volume 2. In *John Wiley and Sons, Chichester*.

Holzbecher, E. (2012). Environmental modeling: Using matlab®. In *Environmental Modeling: Using MATLAB®* (Vol. 9783642220425).

<https://doi.org/10.1007/978-3-642-22042-5>

Hundsdoerfer, W., & Verwer, J. (2003). *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer Berlin Heidelberg.

<https://doi.org/10.1007/978-3-662-09017-6>

Hutomo, G. D., Kusuma, J., Ribal, A., Mahie, A. G., & Aris, N. (2019). Numerical solution of 2-d advection-diffusion equation with variable coefficient using du-fort frankel method. *Journal of Physics: Conference Series*, 1180(1).

<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1180/1/012009>

Isakov, V. (2017). Inverse problems for partial differential equations. In *Applied Mathematical Sciences (Switzerland)* (Vol. 127).

<https://doi.org/10.4171/owr/2012/11>

Iserles, A. (2008). A first course in the numerical analysis of differential equations, second edition. In *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations, Second Edition*. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511995569>

Ji, Z. G. (2017). Hydrodynamics and water quality: Modeling rivers, lakes, and estuaries. In *Hydrodynamics and Water Quality: Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*. <https://doi.org/10.1002/9781119371946>

Jian, L., Zhongwu, J., & Wenjun, Y. (2014). Numerical modeling of the Xiangxi River algal bloom and sediment-related process in China. *Ecological Informatics*, 22. <https://doi.org/10.1016/j.ecoinf.2014.03.002>

Jones, H., & Hamilton, D. (2014). Hydrodynamic modelling of Lake Whangape and

- Lake Waahi. In *Waikato Regional Council Technical Report* (Issue 24).
- Kabanikhin, S. I. (2008). Definitions and examples of inverse and ill-posed problems. *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, 16(4).  
<https://doi.org/10.1515/JIIP.2008.019>
- Karalashvili, M., Groß, S., Marquardt, W., Mhamdi, A., & Reusken, A. (2011). Identification of transport coefficient models in convection-diffusion equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(1).  
<https://doi.org/10.1137/09077360X>
- Karalashvili, M., Groß, S., Mhamd, A., Reusken, A., & Marquardt, W. (2008). Incremental identification of transport coefficients in convection-diffusion systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 30(6).  
<https://doi.org/10.1137/070692388>
- Kirsch, A. (2011). An introduction to the mathematical theory of inverse problems. In *Applied Mathematical Sciences (Switzerland)* (Vol. 120).
- Kusuma, J., Ribal, A., Mahie, A. G., & Aris, N. (2017). On pollution distribution on unhas lake using two dimension advection-diffusion equation. *Far East Journal of Mathematical Sciences*, 101(8). <https://doi.org/10.17654/MS101081721>
- Kuzmin, D. (2010). A Guide to Numerical Methods for Transport Equations. In *Univ. Nürnberg*.
- Kwon, Y. W., & Bang, H. (2018). The Finite Element Method Using MATLAB. In *The Finite Element Method Using MATLAB*.  
<https://doi.org/10.1201/9781315275949>
- Lawrence, G. A., Ashley, K. I., Yonemitsu, N., & Ellis, J. R. (1995). Natural dispersion in a small lake. In *Limnology and Oceanography* (Vol. 40, Issue 8).  
<https://doi.org/10.4319/lo.1995.40.8.1519>
- Lax, P. D., & Richtmyer, R. D. (1956). Survey of the stability of linear finite

difference equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 9(2). <https://doi.org/10.1002/cpa.3160090206>

Lesser, G. R., Roelvink, J. A., van Kester, J. A. T. M., & Stelling, G. S. (2004). Development and validation of a three-dimensional morphological model. *Coastal Engineering*, 51(8–9). <https://doi.org/10.1016/j.coastaleng.2004.07.014>

LeVeque, R. J. (2007). Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. In *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. <https://doi.org/10.1137/1.9780898717839>

Li De-Sheng. (2015). Convection-diffusion modelling for chemical pollutant dispersion in the joint of artificial lake using finite element method. *BULGARIAN CHEMICAL COMMUNICATIONS*, 47(3), 949–958.

Li, Y., & Yao, J. (2015). Estimation of transport trajectory and residence time in large river-lake systems: Application to Poyang Lake (China) using a combined model approach. *Water (Switzerland)*, 7(10). <https://doi.org/10.3390/w7105203>

Lima, R. C., Mesquita, A. L. A., Blanco, C. J. C., Santos, M. de L. S., & Secretan, Y. (2015). An analysis of total phosphorus dispersion in lake used as a municipal water supply. *Anais Da Academia Brasileira de Ciencias*, 87(3). <https://doi.org/10.1590/0001-3765201520130317>

Liu, & Cao, B. (2011). Hybrid simulation of the hydraulic characteristics at river and lake confluence. *Journal of Hydrodynamics*, 23(1). [https://doi.org/10.1016/S1001-6058\(10\)60094-7](https://doi.org/10.1016/S1001-6058(10)60094-7)

Liu, L. (2018). Application of a Hydrodynamic and Water Quality Model for Inland Surface Water Systems. In *Applications in Water Systems Management and Modeling*. <https://doi.org/10.5772/intechopen.74914>

Lourakis, M. I. a. (2005). A Brief Description of the Levenberg-Marquardt Algorithm

Implemented by levmar. *Matrix*, 3.

Lynch, D. R., Greenberg, D. A., Bilgili, A., McGillicuddy Jr, D. J., Manning, J. P., & Aretxabaleta, A. L. (2014). *Particles in the coastal ocean: Theory and applications*. Cambridge University Press.

Madrigal Guridi, X., Novelo Retana, A., & Chacón Torres, A. (2004). Flora y vegetación acuáticas del Lago de Zirahuén, Michoacán, México. *Acta Botanica Mexicana*, 68. <https://doi.org/10.21829/abm68.2004.977>

Marinone, S. G., Ulloa, M. J., Parés-Sierra, A., Lavín, M. F., & Cudney-Bueno, R. (2008). Connectivity in the northern Gulf of California from particle tracking in a three-dimensional numerical model. *Journal of Marine Systems*, 71(1–2). <https://doi.org/10.1016/j.jmarsys.2007.06.005>

Martin, J. L., McCutcheon, S. C., & Schottman, R. W. (2018). Hydrodynamics and Transport for Water Quality Modeling. In *Hydrodynamics and Transport for Water Quality Modeling*. <https://doi.org/10.1201/9780203751510>

Martínez-Almeida, V., & Tavera, R. (2005). A hydrobiological study to interpret the presence of desmids in Lake Zirahuén, México. *Limnologica*, 35(1–2). <https://doi.org/10.1016/j.limno.2005.01.002>

Mathworks. (2016). *MATLAB, PDE Toolbox™ User 's Guide R*.

Mendoza, R., Silva, R., Jiménez, A., Rodríguez, K., & Sol, A. (2015). Lake Zirahuén, Michoacán, Mexico: An approach to sustainable water resource management based on the chemical and bacterial assessment of its water body. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 2. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2015.10.001>

Mitarai, S., Siegel, D. A., Watson, J. R., Dong, C., & McWilliams, J. C. (2009). Quantifying connectivity in the coastal ocean with application to the Southern California Bight. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 114(10). <https://doi.org/10.1029/2008JC005166>

- Mora, C., & Sale, P. F. (2002). Are populations of coral reef fish open or closed? In *Trends in Ecology and Evolution* (Vol. 17, Issue 9).  
[https://doi.org/10.1016/S0169-5347\(02\)02584-3](https://doi.org/10.1016/S0169-5347(02)02584-3)
- Moré, J. J. (1978). *The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory*. <https://doi.org/10.1007/bfb0067700>
- Mouamba, L. P.; Moussata C. S.; Mampassi, N.; Nkounkou, B. . (2020). On the Existence and Uniqueness of the Solution of Pollutants Transport Problem in a River. *Journal of Advances in Applied Mathematics*, 5, 35–39.  
<https://doi.org/https://dx.doi.org/10.22606/jaam.2020.51005>
- Ndungu, J. N., Chen, W., Augustijn, D. C. M., & Hulscher, S. J. M. H. (2015). Analysis of the Driving Force of Hydrodynamics in Lake Naivasha, Kenya. *Open Journal of Modern Hydrology*, 05(04).  
<https://doi.org/10.4236/ojmh.2015.54009>
- Nocedal, J., & Wright, S. (2006). Numerical optimization, series in operations research and financial engineering. In *Springer*.
- Oñate, E. (2013). Structural Analysis with the Finite Element Method Linear Statics. In *Springer: Vols. 2 Beams, P*.
- Ortega, B., Vázquez, G., Caballero, M., Israde, I., Lozano-García, S., Schaaf, P., & Torres, E. (2010). Late Pleistocene: Holocene record of environmental changes in Lake Zirahuén, Central Mexico. *Journal of Paleolimnology*, 44(3).  
<https://doi.org/10.1007/s10933-010-9449-x>
- Ortiz Paniagua, & Rendón López. (2010). *Espejo de los dioses: estudios sobre ambiente y desarrollo en la cuenca del lago de Zirahuén*.
- Peeters, F., & Hofmann, H. (2015). Length-scale dependence of horizontal dispersion in the surface water of lakes. *Limnology and Oceanography*, 60(6), 1917–1934. <https://doi.org/10.1002/lno.10141>

- Pinton, D., Canestrelli, A., & Fantuzzi, L. (2020). A UAV-based dye-tracking technique to measure surface velocities over tidal channels and salt marshes. *Journal of Marine Science and Engineering*, 8(5).  
<https://doi.org/10.3390/JMSE8050364>
- Powers, C., Hanlon, R., & Schmale, D. G. (2018). Tracking of a fluorescent dye in a freshwater lake with an unmanned surface vehicle and an unmanned aircraft system. *Remote Sensing*, 10(1). <https://doi.org/10.3390/rs10010081>
- Pozrikidis, C. (2014). Introduction to Finite and Spectral Element Methods Using MATLAB. In *Introduction to Finite and Spectral Element Methods Using MATLAB*. <https://doi.org/10.1201/b17067>
- Qian, Q., Clark, J. J., Voller, V. R., & Stefan, H. G. (2009). Depth-Dependent Dispersion Coefficient for Modeling of Vertical Solute Exchange in a Lake Bed under Surface Waves. *Journal of Hydraulic Engineering*, 135(3).  
[https://doi.org/10.1061/\(asce\)0733-9429\(2009\)135:3\(187\)](https://doi.org/10.1061/(asce)0733-9429(2009)135:3(187))
- Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2010). The finite element method in heat transfer and fluid dynamics third edition. In *The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics, Third Edition*.
- Rendón L, M. B., Chacón T, A., Vergara de Paz, Y., & Rosas M, C. (2010). El uso de los índices tróficos en un lago de altitud mexicano. In C. F. Ortiz Paniagua & M. B. Rendón López (Eds.), *Espejo de los Dioses: Estudios sobre Ambiente y Desarrollo en la Cuenca del Lago de Zirahuén* (pp. 71–88).
- Richter, M. (2016). *Richter, M. (2016). Inverse problems: Basics, theory and applications in geophysics*. Springer International Publishing.  
<https://doi.org/10.1007/978-3-319-48384-9>
- Simmons, G. F. (1996). *Calculus with analytic geometry*. McGraw-Hill.
- Smith, G. D. (1985). *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. Oxford University Press.

- Soulignac, F., Vinçon-Leite, B., Lemaire, B. J., Scarati Martins, J. R., Bonhomme, C., Dubois, P., Mezemate, Y., Tchiguirinskaia, I., Schertzer, D., & Tassin, B. (2017). Performance Assessment of a 3D Hydrodynamic Model Using High Temporal Resolution Measurements in a Shallow Urban Lake. *Environmental Modeling and Assessment*, 22(4). <https://doi.org/10.1007/s10666-017-9548-4>
- Starosolszky. (1974). Lake hydraulics. *Hydrological Sciences Bulletin*, 19(1). <https://doi.org/10.1080/02626667409493874>
- Sunarsih, S., Purwantoro Sasongko, D., Sutrisno, S., Agnes Putri, G., & Hadiyanto, H. (2020). Analysis of wastewater facultative pond using advection-diffusion model based on explicit finite difference method. *Environmental Engineering Research*. <https://doi.org/10.4491/eer.2019.496>
- T., V., & Strikwerda, J. C. (1990). Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations. *Mathematics of Computation*, 55(192). <https://doi.org/10.2307/2008454>
- Tavera, R., & Martínez-Almeida, V. (2005). Atelomixis as a possible driving force in the phytoplankton composition of Zirahuén, a warm-monomictic tropical lake. In *Hydrobiologia* (Vol. 533, Issue 1). <https://doi.org/10.1007/s10750-004-2418-5>
- Tinoco-Guerrero, G., Domínguez-Mota, F. J., & Tinoco-Ruiz, J. G. (2020). A study of the stability for a generalized finite-difference scheme applied to the advection–diffusion equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 176. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2020.01.020>
- Vergara de Paz, Y., Rendón L, M. B., Chacón T, A., Bernal-Brooks, F. W., Rosas M, C., & Dominguez, M. (2010). Dinamica de nutrientes del lago de zirahuén, michoacán, méxico. In C. F. Ortiz Paniagua & M. B. Rendón López (Eds.), *Espejo de los Dioses: Estudios sobre Ambiente y Desarrollo en la Cuenca del Lago de Zirahuén* (pp. 143–152).

- Vreugdenhil, C. B. (1994). Numerical Methods for Shallow-Water Flow. *Book*.
- Wang, G. (2013). *DESIGN AND APPLICATION OF FLUX CORRECTED TRANSPORT FOR REACTIVE SOLUTE TRANSPORT MODELING*.  
University of Illinois at Urbana-Champaign.
- Wetzel, R. G. (2001). Limnology: Lake and River Ecosystems. In *Journal of Phycology* (Vol. 37). Academic Press. <http://doi.wiley.com/10.1046/j.1529-8817.2001.37602.x>
- WMO. (2012). International Glossary of Hydrology. In *IHP/OHP-Berichte* (Issue 12).
- Zhao, J., Rao, Y. R., & Sheng, J. (2012). Numerical study of dispersion and hydrodynamic connectivity of near-surface waters in Lake Huron. *Water Quality Research Journal of Canada*, 47(3–4).  
<https://doi.org/10.2166/wqrjc.2012.121>
- Zijlema M. (2015). *Computational modelling of flow and transport*.  
<http://resolver.tudelft.nl/uuid:5e7dac47-7610159-4af3-b1d8-32d37d2a8406>