

# MODELACIÓN NUMÉRICA DEL PROBLEMA INVERSO EN EL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN MEDIOS POROSOS

## NUMERIC MODELING OF THE INVERSE PROBLEM IN THE TRANSPORT OF POLLUTANTS IN POROUS MEDIA

DAVID ERNESTO MARÓN DOMÍNGUEZ

E-mail: dmaron@civil.ispjae.edu.cu  
Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría

**RESUMEN:** Se muestra un modelo numérico para la resolución del problema inverso en el transporte de contaminantes. Se emplearon elementos cuadráticos y cúbicos en la discretización por el Método de los Elementos Finitos (MEF) de la ecuación de la dispersión. Se verifican y se comparan los algoritmos del modelo inverso con una solución analítica reportada en la literatura. Se muestra la aplicación del modelo a la calibración de los parámetros de un humedal utilizado como medio poroso filtrante. El humedal se construyó en el laboratorio y se utilizaron mediciones de concentraciones de fluoresceína sódica de una prueba de trazador. Se calibraron el coeficiente de dispersión, el coeficiente de retardo, el coeficiente de degradación y el parámetro de peso de la discretización en el tiempo. Se comprueba la buena aproximación obtenida del coeficiente de dispersión con un valor estimado por otro método. Se muestran las gráficas de los ajustes obtenidos.

**Palabras clave:** flujo, transporte de contaminantes, calibración automatizada, problema inverso, Método de los Elementos Finitos, Método de las Diferencias Finitas, acuífero.

**ABSTRACT:** A numeric model is shown for the resolution of the inverse problem in the pollutant transport. Quadratic and cubic elements were used in the discretization by the Finite Element Method (FEM) of the equation of the dispersion. They are verified and the algorithms of the inverse pattern are compared with analytic solutions reported in the literature. The application is shown from the pattern to the calibration of the parameters of a humedal used as medium porous filtrante. The humedal was built in the laboratory and measurements of concentrations of sodium fluoresceína of a test were used of tracer. They were gauged the dispersion coefficient, the retard coefficient, the degradation coefficient and the parameter of weight of the discretization in the time. The obtained results are shown being proven the good obtained approach of the dispersion coefficient with a value estimated by another method. The graphs of the obtained adjustments are shown.

**Key words:** flow, transport of pollutants, automated calibration, inverse problem, Method of the Finite Elements, Method of the Finite Differences, aquifer.

### INTRODUCCIÓN

Un problema que se presenta en la modelación del transporte de contaminantes en un medio poroso es el desconocimiento de algunos de los parámetros que intervienen en el mismo; por ejemplo, el coeficiente de dispersión, el coeficiente de retardo, el coeficiente de decaimiento, etc. Conocer los valores de estos parámetros es muy importante para el especialista para caracterizar el medio poroso desde el punto de vista hidráulico, así como para predecir el comportamiento o movimiento en el espacio y en el tiempo de un contaminante en el medio. Éste es el llamado problema inverso, para el cual es necesario disponer de observaciones de concentraciones del contaminante en algunos puntos adicionales del medio (Klotz *et al.*, 1992; Maloszewski & Zuber, 1992). Para resolver este problema se puede emplear la vía de prueba y error, cambiando los valores de los parámetros que se van a calibrar hasta encontrar valores de los parámetros que

minimicen la función objetivo de las diferencias entre los valores de las concentraciones observadas y las calculadas. También se puede utilizar la regresión no lineal como un problema de ajuste de curvas. Kelly *et al.*, (1994) utilizan la regresión no lineal para determinar el coeficiente de dispersión en un problema 1D y la dispersividad longitudinal y la dispersividad transversal en un problema 2D a partir de la solución analítica del pulso instantáneo en 1D y 2D. Otros trabajos utilizan la vía automatizada con el empleo de técnicas de optimización para minimizar la función objetivo. Mesa (2000) propone un modelo numérico que emplea un algoritmo evolutivo para la calibración de los coeficientes de la conductividad y el almacenamiento en un modelo de flujo 2D, con el que se obtienen resultados satisfactorios. Entre los medios porosos que estudia la hidráulica se encuentran los humedales, los cuales son áreas construidas por el hombre para el tratamiento de las aguas residuales. Sin embargo, la hidráulica de los humedales con flujo subsuperficial

(González, 2000) no está bien definida o caracterizada, de aquí que el estudio con trazadores en este tipo de medio sea una herramienta fundamental para la posterior utilización de este ecosistema en el tratamiento de las aguas residuales.

El artículo propone un modelo numérico para la resolución del problema inverso en el transporte de contaminantes. En el modelo inverso se hace uso del modelo directo que se obtuvo de la aplicación conjunta del MEF en el espacio y del MDF en el tiempo a la ecuación de la dispersión-convección. La solución numérica que se propone tiene un carácter más general, ya que utiliza cualquier tipo de condiciones de fronteras y de condiciones iniciales. Este modelo se aplicó en la calibración de los parámetros hidráulicos de un humedal, construido en el laboratorio, como caso particular de un medio poroso, teniendo caracterizado desde el punto de vista hidráulico el humedal. Los resultados obtenidos son satisfactorios, así como los ajustes obtenidos entre los valores observados y los calculados de las concentraciones. Estos resultados comprueban y verifican los obtenidos por González (2000). Con el modelo numérico que se propone, el especialista que trabaja en el tratamiento de aguas, utilizando los humedales como medio filtrante, dispone de una herramienta útil para determinar las propiedades hidráulicas desconocidas del medio y caracterizar el humedal.

### PLANTEAMIENTO NUMÉRICO DEL PROBLEMA INVERSO

La ecuación diferencial del transporte de soluto en una dimensión en un medio poroso saturado es:

$$\theta U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \theta R_T \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda \theta R_T C = 0 \quad (1)$$

donde  $\theta$  es la porosidad del medio,  $U$  es la velocidad real del fluido,  $C$  es la concentración del soluto o contaminante,  $R_T$  es el coeficiente de retardo o adherencia en el medio,  $\lambda$  es el coeficiente de degradación o decaimiento y  $D$  es el coeficiente de dispersión.

En la confección del modelo inverso se utiliza un algoritmo numérico desarrollado para la ecuación (1), en el cual se aplicaron el Método de los Elementos Finitos (MEF) para la discretización en el espacio, según la variante de Galerkin, y el Método de las Diferencias Finitas (MDF) para la discretización en el tiempo con un parámetro de peso (Szymkiewicz, 1995). Se emplearon en el modelo directo elementos cuadráticos y cúbicos, y se demostró a partir del criterio de Von Neumann (Remson *et al.*, 1971) que la condición de estabilidad es la restricción  $W \geq 0.5$  para el parámetro de peso de la discretización en el tiempo.

En el proceso de calibración se utiliza la función objetivo, definida como la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores observados y los valores calculados de las concentraciones según la expresión:

$$F.O: f(P) = \sum_{k \in Tobs} \sum_{i \in Nobs} (C_{ik}^{obs} - C_{ik}^{cal}(P))^2 \quad (2)$$

donde  $P$  indica el conjunto de parámetros para calibrar, el subíndice  $i$  recorre el conjunto de nodos con observaciones de concentraciones (Nobs) y el subíndice  $k$  recorre el conjunto de tiempos con observaciones (Tobs). Existe una estrecha relación entre el modelo directo y el modelo inverso, ya que en el proceso de la búsqueda del mínimo de la función objetivo (2) se hace uso del modelo directo para determinar los valores de las concentraciones calculadas  $C_i^{cal}(P)$ .

### VERIFICACIÓN DEL MODELO NUMÉRICO DEL PROBLEMA INVERSO

Para verificar o comprobar el modelo numérico del problema inverso se utiliza una solución analítica que corresponde al pulso continuo con dispersión no nula como caso particular de respuesta-estímulo utilizado en los estudios de trazadores. La concentración inicial es nula,  $C(x, 0) = 0$ , para todos los puntos del medio. Las condiciones de fronteras vienen dadas como valores de concentración conocidos en los extremos. Se considera un valor constante en la entrada y un valor nulo en la salida según se muestra a continuación:

$$C(0, t) = Ce \quad \text{para } x = 0, \quad t > 0 \quad (3)$$

$$C(+\infty, t) = 0 \quad \text{para } t > 0$$

La solución analítica para este caso se obtiene aplicando la Transformada de Laplace a la ecuación (1) y viene dada por la expresión siguiente, en la cual interviene la función error complementario denotada por *erfc*.

$$C(x, t) = \frac{Ce}{2} e^{\frac{\theta ux}{2D}} \left[ e^{2\sigma} \operatorname{erfc} \left( \alpha + \frac{\sigma}{\alpha} \right) + e^{-2\sigma} \operatorname{erfc} \left( \alpha - \frac{\sigma}{\alpha} \right) \right] \quad (4)$$

siendo

$$\sigma = \frac{x \sqrt{\theta R_T \beta}}{2 \sqrt{D}}$$

$$\beta = \frac{\theta u^2}{4 D R_T} + \lambda$$

$$\alpha = \frac{x \sqrt{\theta R_T}}{2 \sqrt{t D}}$$

Se tomó el juego de datos siguiente:

Velocidad real del fluido:	$U = 5$ m/día.
Concentración en la entrada:	$Ce = 50$ g/m <sup>3</sup>
Porosidad:	$\theta = 0,1$
Tiempo final de simulación:	$Tf = 40$ días
Longitud de la región:	$L = 480$ m
Coefficiente de dispersión:	$D = 0,05 U = 0,25$ m <sup>2</sup> /día
Coefficiente de retardo:	$R_T = 1$
Coefficiente de degradación:	$\lambda = 0$ 1/día
Parámetro de peso:	$W = 1$

Para poder realizar las comparaciones se tomaron 2 valores de  $\Delta x$  correspondientes a  $NE = 24$  y  $48$  elementos para los elementos cuadráticos, y a  $NE = 24$  y  $16$  ele-

mentos para los elementos cúbicos en el espacio y se tomó un valor de  $\Delta t$  correspondiente a  $NT=20$  número de subdivisiones en el tiempo. Se seleccionaron para la calibración los parámetros:  $D$ ,  $R_T$ ,  $\lambda$  y  $W$ , ya que en el caso real de estudio que posteriormente se muestra en este trabajo, éstos fueron los parámetros calibrados. En todos los casos se consideró que el parámetro de dispersión y el de retardo eran constantes en el espacio y en el tiempo. Se tomaron 5 casos de juego de datos de estos parámetros variando algunos de ellos según se muestra a continuación:

- Caso 1:  $D = 0,25$ ,  $R_T = 1$ ,  $\lambda = 0$ ,  $W = 1$
- Caso 2:  $D = 0,25$ ,  $R_T = 2$ ,  $\lambda = 0$ ,  $W = 1$  (caso con retardo)
- Caso 3:  $D = 0,25$ ,  $R_T = 1$ ,  $\lambda = 0,001$ ,  $W = 1$  (caso con degradación)
- Caso 4:  $D = 0,25$ ,  $R_T = 1$ ,  $\lambda = 0$ ,  $W = 0,8$
- Caso 5:  $D = 0,25$ ,  $R_T = 2$ ,  $\lambda = 0,001$ ,  $W = 0,8$  (caso con retardo y degradación)

Se tomaron las cotas siguientes para cada parámetro por calibrar, las cuales se mantuvieron constantes para los 5 casos.

$$0 \leq D \leq 1, 1 \leq R_T \leq 5, 0 \leq \lambda \leq 1, 0,5 \leq W \leq 1$$

En las Tablas 1, 2, 3, 4 y 5 se muestran los resultados de los valores de los parámetros calibrados para los elementos cuadráticos (CUA) y para los cúbicos (CUB), el valor de la evaluación de la función objetivo (EvalFO) en el punto de mínimo, el Coeficiente de Regresión (Coef-Reg) del ajuste obtenido, considerando los valores exactos como los valores observados y el tiempo empleado en la calibración (Tcalib), respectivamente. Como puede

observarse, en todos los casos los resultados son satisfactorios. Todos los valores de los coeficientes calibrados se lograron reproducir con una gran exactitud. Una medida del buen ajuste logrado lo muestran los valores del coeficiente de regresión y los valores de la función objetivo en el punto de mínimo. En todos los casos el tiempo empleado fue pequeño. Este análisis de sensibilidad con los parámetros permitió comprobar o verificar que el modelo numérico propuesto para el problema inverso puede ser aplicado a un caso real de estudio.

**CASO REAL DE ESTUDIO**

En el laboratorio del Centro de Investigaciones Hidráulicas del Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría se desarrolló una investigación relacionada con el estudio de los humedales utilizados como medios porosos filtrantes en el tratamiento de las aguas en los países tropicales (Sánchez, 1998; Deas, 2000; González, 2000). Uno de sus objetivos o propósitos era caracterizar el humedal desde el punto de vista hidráulico. Para caracterizar un medio poroso es necesario conocer los parámetros de ese medio. Algunos de ellos se pueden determinar en el laboratorio, por ejemplo, la porosidad, la conductividad, la velocidad del fluido, pero hay otros que es difícil su determinación, debido a la falta de información o de conocimiento del fenómeno físico que se estudia. Éste es el caso del coeficiente de dispersión, el coeficiente de retardo y el coeficiente de decaimiento. Se construyó un humedal en el laboratorio para realizar una prueba de trazador utilizando la fluoresceína sódica o Uranina. El humedal confeccionado es un tanque de acero

**TABLA 1. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO 1**

		<b>CASO 1</b>						
		D	$R_T$	$\lambda$	W	EvalFO	CoefReg	Tcalib (min)
CUA	NE=48	0,25	1	$3,95 \cdot 10^{-9}$	1	$6,98 \cdot 10^{-9}$	0,9978	5,92
	NE=24	0,25	1	0	1	$7,47 \cdot 10^{-11}$	0,9915	2,43
CUB	NE=48	0,25	1	0	1	$2,55 \cdot 10^{-8}$	0,999	7,94
	NE=16	0,25	1	$6,5 \cdot 10^{-9}$	1	$4,4 \cdot 10^{-9}$	0,9918	2,33

**TABLA 2. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO 2**

		<b>CASO 2 (<math>R_T = 2</math>)</b>						
		D	$R_T$	$\lambda$	W	EvalFO	CoefReg	Tcalib (min)
CUA	NE=48	0,25	2	0	1	$2,85 \cdot 10^{-8}$	0,993	7,32
	NE=24	0,25	2	0	1	$1,15 \cdot 10^{-7}$	0,9748	3,26
CUB	NE=48	0,25	2	$1,05 \cdot 10^{-8}$	1	$1,06 \cdot 10^{-6}$	0,997	16,38
	NE=16	0,25	2	$2,07 \cdot 10^{-9}$	1	$5,38 \cdot 10^{-9}$	0,9755	4,56

**TABLA 3. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO 3****CASO 3 ( $\lambda = 0,001$ )**

		D	$R_T$	$\lambda$	W	EvalFO	CoefReg	Tcalib (min)
CUA	NE=48	0,2501	1	$9,99 \cdot 10^{-4}$	1	$2,27 \cdot 10^{-8}$	0,9978	6,43
	NE=24	0,2502	1	0,001	1	$7,95 \cdot 10^{-8}$	0,9914	2,92
CUB	NE=48	0,25	1	0,001	1	$1,26 \cdot 10^{-9}$	0,999	11,34
	NE=16	0,25	1	$9,99 \cdot 10^{-4}$	1	$1,07 \cdot 10^{-8}$	0,9717	3,2

**TABLA 4. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO 4****CASO 4 ( $W = 0,8$ )**

		D	$R_T$	$\lambda$	W	EvalFO	CoefReg	Tcalib (min)
CUA	NE=48	0,25	1	$4,8 \cdot 10^{-9}$	0,8	$2,27 \cdot 10^{-8}$	0,9973	5,3
	NE=24	0,25	1	0	0,8	$7,95 \cdot 10^{-8}$	0,9899	2,59
CUB	NE=48	0,2599	1	$5,99 \cdot 10^{-9}$	0,8	$1,26 \cdot 10^{-9}$	0,9989	10,27
	NE=16	0,25	1	$4,29 \cdot 10^{-9}$	0,8	$1,07 \cdot 10^{-8}$	0,9903	2,95

**TABLA 5. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO 5****CASO 5 ( $D = 0,25$ ,  $R_T = 2$ ,  $\lambda = 0,001$  y  $W = 0,8$ )**

		D	$R_T$	$\lambda$	W	EvalFO	CoefReg	Tcalib (min)
CUA	NE=48	0,2501	2	$9,99 \cdot 10^{-4}$	0,8	$3,61 \cdot 10^{-7}$	1	7,85
	NE=24	0,25	2	$9,99 \cdot 10^{-4}$	0,8	$5,26 \cdot 10^{-8}$	1	3,6
CUB	NE=48	0,25	2	0,001	0,8	$1,44 \cdot 10^{-8}$	1	16,17
	NE=16	0,25	2	$9,99 \cdot 10^{-4}$	0,8	$2,68 \cdot 10^{-9}$	1	4,14

laminado de 2,8 metros de largo, 1,5 metro de ancho y 0,57 metro de altura. La sección transversal es rectangular y se apoya en el suelo. La prueba se realizó durante un tiempo de simulación de 18 horas. Se hicieron mediciones de concentración en la entrada y en la salida con un intervalo constante de 30 minutos entre cada una de ellas. Como no se conocía el valor del coeficiente de dispersión, se obtuvo un valor estimado igual a  $D_{EST} = 0,00023152 \text{ m}^2/\text{min}$  a partir de los resultados logrados por Deas (2000), quien establece una equivalencia entre el humedal y una laguna de estabilización, y obtiene una relación aproximada para el cálculo del coeficiente de dispersión (Polprasert & Bhattarai, 1993). Tampoco se conocía el valor de los coeficientes de retardo  $R_T$ , de degradación  $\lambda$  y del parámetro de peso  $W$ , por lo que fue necesario efectuar la calibración de estos 4 parámetros. Para la calibración se realizaron mediciones

de fluoresceína en 8 puntos adicionales. Los 4 primeros puntos se encuentran en una sección transversal a una distancia de 0,9 metro y los otros 4 puntos en una sección a 1,9 metro de la entrada del humedal, respectivamente. Debido a la uniformidad encontrada en la distribución de las concentraciones en cada una de dichas secciones transversales, se asumió el modelo en una dimensión, dado por la ecuación (1), y se promediaron los valores de las concentraciones en dichas secciones transversales. En la Tabla 6 se muestran los valores de las concentraciones contra tiempo en la entrada, en la salida y en las dos secciones promediadas o puntos de observación. Como medio poroso filtrante se tomó una grava con una porosidad de  $\theta = 0,36$  determinada en el laboratorio. Se determinó que el flujo es lineal a partir de la ecuación binómica de Pérez Franco (1982) con un gradiente de  $l = 0,0000157$  y con una velocidad real constante de

**TABLA 6. DATOS DE LAS CONCENTRACIONES CONTRA TIEMPO EN LA ENTRADA, EN LA SALIDA Y EN LOS PUNTOS DE OBSERVACIÓN, PARA LA PRUEBA DE 18 HORAS DE TIEMPO DE MEDICIÓN**

Tiempo (min)	Entrada C (g/m <sup>3</sup> )	PObs1 (0,9 m) C (g/m <sup>3</sup> )	PObs2 (1,9 m) C (g/m <sup>3</sup> )	Salida C (g/m <sup>3</sup> )
0	726,1	0,0	0,0	0,0
30	247,9	0,0	0,0	0,0
60	146,3	52,075	0,0	0,0
90	138,8	103,575	0,0	0,0
120	122,6	152,875	3,75	0,8
150	100,7	173,975	14,425	1,5
180	89,6	177,975	30,775	3,2
210	76,6	171,175	51,55	3,4
240	72,9	154,1	71,225	3,7
270	63,7	133,6	89,575	5,4
300	55,6	119,6	104,5	7,3
330	49,2	105,325	117,65	10,7
360	39,3	94,125	128,425	17,1
390	33,3	82,875	133,5	30,3
420	28,1	73,0	134,3	47,0
450	22,9	64,25	129,875	62,0
480	20,2	56,25	122,625	77,0
510	16,3	49,475	113,30	88,0
540	14,2	43,425	103,75	100,0
570	11,3	38,65	96,0	111,0
600	8,3	32,5	88,0	119,0
630	7,5	28,75	80,75	125,0
660	6,8	25,6	74,25	127,0
690	5,9	22,25	69,25	126,0
720	5,3	19,0	64,25	122,0
750	4,8	17,575	58,8	116,0
780	4,4	15,375	53,85	110,0
810	4,2	12,725	49,175	104,0
840	4,1	11,95	44,75	98,0
870	4,0	10,725	41,45	93,0
900	4,0	9,325	37,325	87,0
930	3,5	8,375	33,875	82,0
960	3,4	7,175	30,5	75,0
990	3,5	6,775	26,0	71,0
1020	3,5	6,25	23,25	64,0
1050	3,5	6,0	20,025	58,0
1080	3,4	4,55	17,1	51,0

$U = 0,00387$  m/min. Esto correspondió a un gasto de  $Q = 0,00092$  m<sup>3</sup>/min, con un nivel del agua en la entrada del humedal de  $h = 0,44$  m.

#### APLICACIÓN DEL MODELO INVERSO A LA CALIBRACIÓN DEL HUMEDAL

En la Tabla 7 se muestran los resultados obtenidos de los 4 parámetros calibrados, así como el coeficiente de regresión (CoefReg) y el tiempo de ejecución de la calibración (Tcalib). Los resultados mostrados fueron calculados con ayuda de los algoritmos de calibración desarrollados con los elementos cuadráticos y los cúbicos. Para los dos casos se tomó  $NE = 3$  elementos. El tamaño del intervalo en el espacio fue variable debido a la distancia existente entre los puntos de observación, la entrada y la salida. Atendiendo al número de mediciones en el tiempo, se tomó

**TABLA 7. RESULTADOS NUMÉRICOS PARA EL CASO REAL DE ESTUDIO**

	Elementos cuadráticos	Elementos cúbicos
D (m <sup>2</sup> /min)	0,000222	0,00025588
$R_T$	1	1
$\lambda$ (1/mi)	0,0004411	0,0003008
W	0,74	0,72
CoefReg	0,9744	0,9777
Tcalib (min)	0,693	1,1827

$NT = 36$  correspondiente a un valor de  $\Delta t = 30$  min para un tiempo final de  $T_f = 1080$  min. Las cotas para la calibración son  $0 \leq D \leq 1$ ;  $1 \leq R_T \leq 5$ ;  $0 \leq \lambda \leq 1$ ;  $0.5 \leq W \leq 1$ .

Según los resultados mostrados para este caso se puede concluir que no existe retardo del trazador en el humedal, lo cual no ocurre así con la degradación. Según el trabajo de Deas (2000) esta sustancia puede ser destruida por la luz solar, lo cual puede justificar la presencia de cierta degradación en el resultado de la calibración. Los dos valores del coeficiente de dispersión están bastante próximos y también con respecto al valor estimado inicialmente  $D_{EST} = 0,00023152$  m<sup>2</sup>/min. El valor del parámetro de peso no coincidió con el valor de  $W = 1$ , lo cual coincide con lo dicho por diferentes autores en la literatura. Si  $W$  es un valor cercano a 0,5 se obtiene mejor exactitud pero puede ocasionar oscilaciones, mientras que si el parámetro está cerca del valor 1 se obtiene buena estabilidad pero puede producir dispersión (Szymkiewicz, 1995). Los resultados obtenidos son buenos, teniendo en cuenta que sólo hay dos puntos en el espacio con observaciones conocidas, lo que resulta en un número total de  $2NT = 72$  observaciones. Con respecto al tiempo de ejecución se puede observar que el caso del elemento cúbico emplea casi el doble del utilizado en el elemento cuadrático, aunque en ambos casos fueron pequeños. También puede comprobarse un

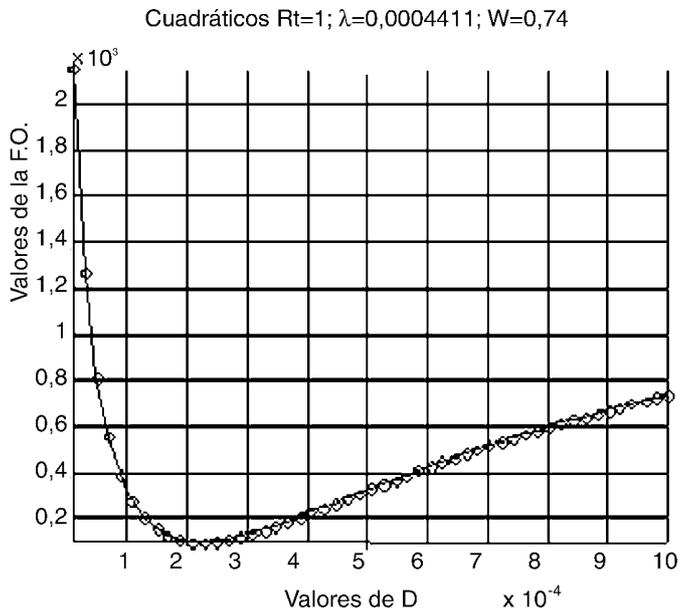


Figura 1. Valores de la Función Objetivo en función del coeficiente de dispersión D para los elementos cuadráticos.

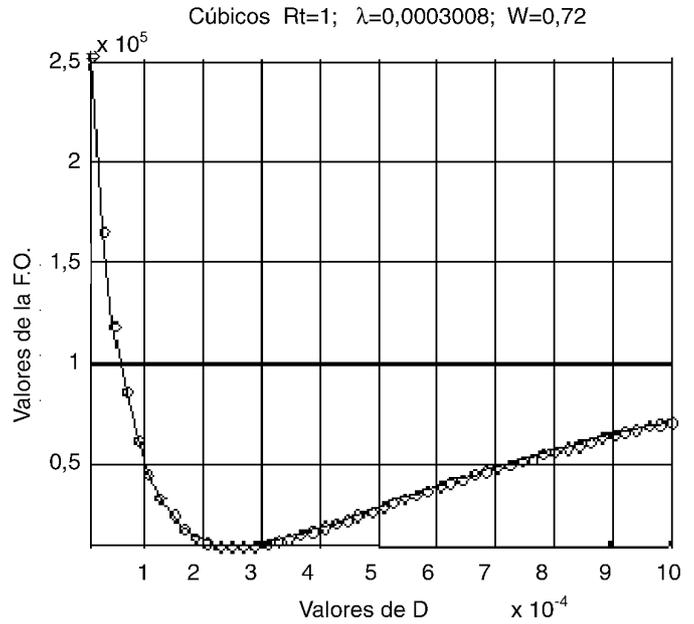


Figura 2. Valores de la Función Objetivo en función del coeficiente de dispersión D para los elementos cúbicos.

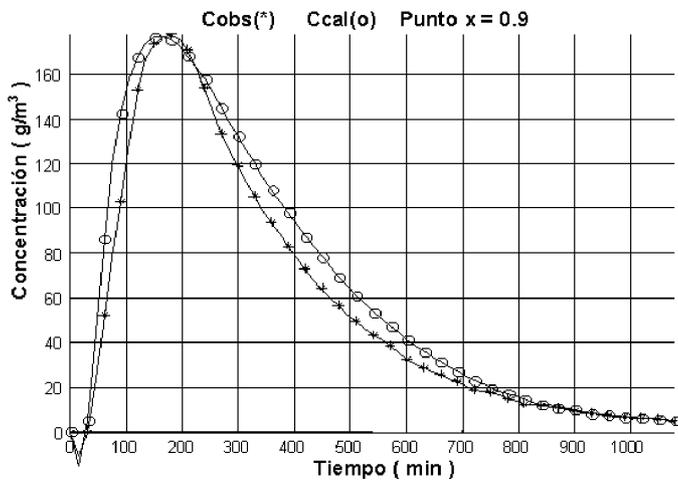


Figura 3. Concentraciones calculadas y observadas contra tiempo en el punto  $x=0,9$  metro utilizando el elemento cuadrático.

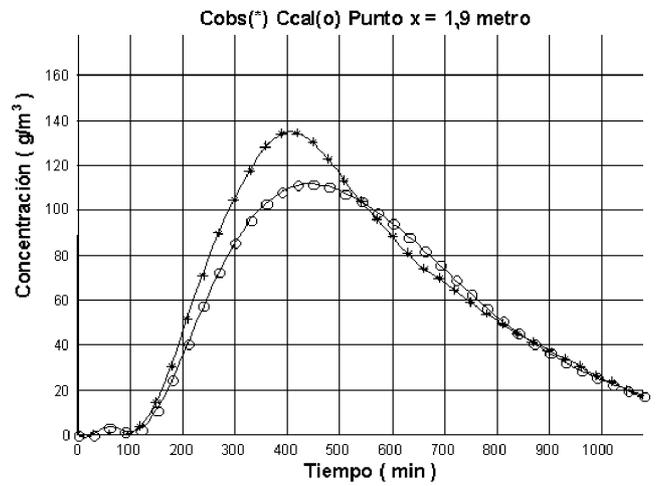


Figura 4. Concentraciones calculadas y observadas contra tiempo en el punto  $x=1,9$  metro utilizando el elemento cuadrático.

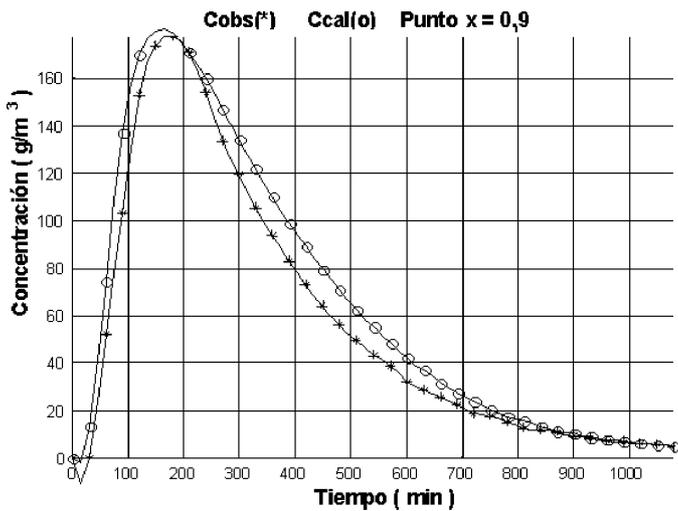


Figura 5. Concentraciones calculadas y observadas contra tiempo en el punto  $x=0,9$  metro utilizando el elemento cúbico.

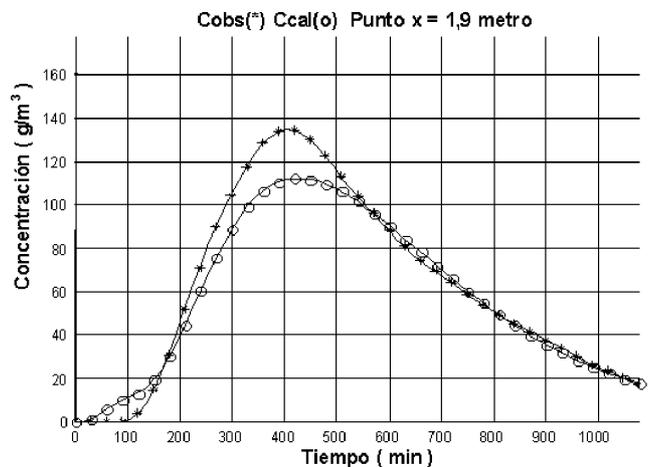


Figura 6. Concentraciones calculadas y observadas contra tiempo en el punto  $x=1,9$  metro utilizando el elemento cúbico

resultado ligeramente mejor, obtenido con el elemento cúbico atendiendo al coeficiente de regresión.

En las figuras 1 y 2 se muestran las gráficas de los valores de la función objetivo en función del parámetro de dispersión  $D$  para los elementos cuadráticos y cúbicos respectivamente, y se demuestra gráficamente la existencia de un único punto de mínimo de la función objetivo. En las figuras 3, 4, 5 y 6 se muestran las gráficas de las concentraciones calculadas y las observadas contra tiempo en los puntos de observación para los dos tipos de elementos finitos utilizados y se demuestra el ajuste satisfactorio encontrado entre los valores observados y los calculados.

### CONCLUSIONES

Se confeccionó un modelo numérico del problema inverso para el caso del transporte de contaminantes en un medio poroso. Se utilizó el asistente matemático MATLAB versión 5.1 para la implementación computacional de todos los algoritmos. Se aplicó el modelo del problema inverso en la calibración del coeficiente de dispersión, del parámetro de peso, del coeficiente de retardo y del coeficiente de decaimiento de un humedal como medio poroso filtrante, utilizando mediciones de concentraciones de una prueba de trazador con fluoresceína sódica. Se obtuvieron buenos resultados numéricos y gráficos para los dos tipos de elementos finitos utilizados en el modelo inverso.

Este modelo puede trabajar con cualquier tipo de condiciones de fronteras y condiciones iniciales, de forma que no es necesario restringirse solamente a la utilización de las expresiones que corresponden con las soluciones analíticas de los casos del pulso instantáneo o del pulso continuo como casos particulares de respuesta-estímulo utilizados en las pruebas de trazadores. Tiene la posibilidad de simular medios heterogéneos y además puede ser seleccionado otro conjunto distinto de parámetros para calibrar. Aunque el modelo está desarrollado para un medio poroso, tiene la posibilidad también de ser aplicado a canales y ríos con flujo uniforme si se considera el coeficiente de la porosidad con valor  $\theta = 1$  y el coeficiente de retardo con valor  $R_T = 1$ .

Con este modelo el especialista en tratamiento de aguas en humedales dispone de una herramienta útil para la determinación de los parámetros hidráulicos desconocidos del humedal (porosidad, dispersión, retardo, decaimiento, etc.) con la ayuda de una prueba de trazador. Para esto sólo necesita disponer de mediciones de concentración del trazador en algunos puntos interiores del medio. Estos parámetros son utilizados por el especialista para poder evaluar los modelos de tratamiento, por ejemplo, los modelos de tipo biológico o de otro tipo, de ahí la importancia de poder determinar estos parámetros que son datos de entrada de los modelos de tratamiento.

### BIBLIOGRAFÍA

- DEAS, G.: "Estudio del comportamiento de humedales artificiales con flujo subsuperficial horizontal", Tesis de Maestría, Facultad de Ingeniería Civil, ISPJAE, La Habana, 2000.
- GONZÁLEZ, D. O.: "Estudio del comportamiento de humedales con flujo subsuperficial horizontal en el tratamiento de aguas residuales", Tesis doctoral, Facultad de Ingeniería Civil, ISPJAE, La Habana, 2000.
- KELLY, W. E., O. MAZAC AND S. MARES: "Dispersion parameters from the impulse response using regression", *Journal of Hydrology*, 163: 85-94, 1994.
- KLOTZ, D., D. LAZIK AND P. MALOSZEWSKI: *Modelling of nonequilibrium pollutant behaviour in saturated porous media: interpretation of column experiments*, Tracer Hydrology, A. A. Balkema, Rotterdam, 1992.
- MALOSZEWSKI, P. AND A. ZUBER: "On the Calibration and Validation of Mathematical Models for the Interpretation of Tracer Experiments in Groundwater", *Advances in Water Resources*, 15:47-62, 1992.
- MESA, H. R.: "Solución del problema inverso en modelos de flujo del agua subterránea mediante un algoritmo de convergencia global", Tesis doctoral, Facultad de Ingeniería Civil, ISPJAE, 2000.
- PÉREZ FRANCO, D.: *Hidráulica subterránea*, Serie Científico-Técnica, La Habana, 1982.
- POLPRASERT, C. AND K. BHATTARAI: "Modelo de dispersión para estanques de estabilización de aguas residuales", *Lagunas de Estabilización*, 47: 82-92, 1993.
- REMSON, I., G. M. HORNBERGER AND F. J. MOLZ: *Numerical Methods in Subsurface Hydrology*, John Wiley & Sons, 1971.
- SÁNCHEZ, C. C.: "Estudio del comportamiento hidráulico en sistemas naturales con flujo subsuperficial", Tesis de Diploma, Facultad de Ingeniería Civil, ISPJAE, La Habana, 1998.
- SZYMKIEWICZ, R.: "Method to Solve 1D Unsteady Transport and Flow Equations", *Journal of Hydraulic Engineering ASCE* 121 (5):396-403, 1995.