



Dr. Daniel Alejandro  
Cervantes Cabrera

Doctor en Ciencias  
Matemáticas

Investigadora o  
Investigador Nacional,  
Nivel 1 (SNII-1)  
(2023-2028)

Datos de contacto:

[daniel.cervantes@infotec.mx](mailto:daniel.cervantes@infotec.mx)  
(55) 5624 2800 ext. 6135



## Inteligencia Artificial aplicado en problemas de calidad de agua

### Datos Generales

#### Resumen ejecutivo

En este proyecto de investigación se plantea la modelación de la calidad de agua, por medio de la simulación de dispersión de contaminantes utilizando técnicas libres de mallas basadas en Aprendizaje Profundo para la solución numérica de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) gobernantes del fenómeno físico de difusión-advección (DA).

#### Línea General y Aplicación del Conocimiento (LGAC)

10. Inteligencia computacional en la Ciencia de Datos

#### Palabras clave

#### Objetivo General

Modelación de calidad de agua a través de la solución numérica de las EDPs de difusión-advección (DA), utilizando métodos libres de malla basados en Aprendizaje Profundo, para la simulación de la asimilación y dilución de contaminantes presentes en cuerpos de agua.

#### Objetivos específicos

- Implementación de métodos computacionales optimizados para la solución numérica de la ecuación de DA con técnicas de Aprendizaje Profundo (Deep-Galerkin, Deep-Ritz) con biblioteca Guixhe++.
- Simulación de problemas de dispersión de contaminantes en una, dos y tres dimensiones sobre dominios no triviales.
- Envío de artículo científico para su revisión y publicación en revista internacional indexada JCR.

### Datos del proyecto

#### Descripción

El acceso de agua para el consumo humano tanto en zonas rurales como urbanas representa un problema de alta prioridad desde hace muchos años que afecta a millones de personas en todo el mundo. Uno de los principales factores que han ocasionado esta problemática tiene que ver con la contaminación de cuerpos de agua como ríos y lagos ocasionado principalmente por actividades industriales, asentamientos urbanos, turismo, etc.. En donde se vierten grandes cantidades de residuos contaminantes sin ningún tratamiento previo. Los procesos de simulación computacional basados en modelos matemáticos, representan herramientas tecnológicas que contribuyen en la comparación de asimilación dilución de contaminantes presentes en cuerpos de agua, tanto a nivel superficial como profundo, permitiendo realizar comparaciones de éstos con los establecidos en la norma oficial mexicana NOM-001-SEMARNAT-2021.

#### Antecedentes del problema a resolver

Los modelos de calidad de agua son herramientas que contribuyen en la prevención y toma de decisiones en el manejo de los recursos hídricos, los cuales posibilitan estudiar y evaluar la contaminación de residuos contaminantes vertidos y su impacto en el medio receptor. Existen diferentes modelos matemáticos principalmente aquellos que describen la dinámica de la física y química del transporte de contaminantes en cuerpos de agua por medio de sistemas de EDP de DA, cuyas solución numérica está basada en esquemas de discretización con elementos finitos sobre mallas del dominio de estudio, este tipo de esquemas pueden tener limitaciones debido a que la construcción de estas mallas, puede ser computacionalmente costosas. Sin embargo actualmente los esquemas basados en métodos libres de malla como el de Aprendizaje Profundo permite abordar de forma conveniente la solución sobre dominios complicados y en altas dimensiones.





**Justificación y pertinencia**

Muchos de los esquemas del modelado de calidad de agua están basados en sistemas de EDP los cuales representan los fenómenos físicos de difusión, asimilación y dilución de los contaminantes. Estos sistemas, además consideran condiciones iniciales y de frontera del problema y en muchos casos su solución analítica es complicada o imposible de obtener. Una alternativa son los métodos de aproximación numérica de elementos finitos los cuales requieren la construcción de mallas de discretización sobre los dominios de estudio añadiendo dificultades sobre todo en casos de regiones complicadas, sin embargo existen alternativas de métodos los libres de malla los cuales permiten abordar de forma conveniente la aproximación en dominios reales y complejos, lo cual es particularmente útil para la simulaciones sobre cuerpos de agua. Los métodos de aproximación de Aprendizaje Profundo forma parte de estos esquemas permitiendo además aprovechar optimización computacional a través de GPUs.

**Metas**

•Definición de metodología de solución numérica de EDP de DAR. •Implementación computacional de algoritmos de aproximación de solución numérica de EDP de DAR para la biblioteca Guixhe++. •Envío de artículo de investigación a revista internacional indexada JCR.

**Metodologías**

Las técnicas basadas en Aprendizaje Profundo, resultan ser muy convenientes estos problemas, ya que representan un método libre de mallas lo que facilita abordar problemas con dominios reales y no triviales en altas dimensiones de forma conveniente y optimizada. Esto debido a que la discretización de la EDP está basada sobre conjuntos de puntos distribuidos de forma aleatoria en la región de estudio. El funcional de pérdida o aprendizaje, estará formado por términos de la EDP tanto para la región interior como la condición de frontera, esta última típicamente se considera un factor de penalización. A continuación los coeficientes de peso y sesgos de la red neuronal artificial (RNA) se aproximan iterativamente a través de una optimización tipo gradiente descendiente para la minimización del funcional, (esta etapa es conocida como aprendizaje) resultando así la función de aproximación de la solución de la EDP a través de la RNA. Algunas de las metodologías más conocidas en el estado del arte donde se han establecido estos métodos son Deep Ritz, Deep Galerkin y Physics-informed neural networks. Adicionalmente, de acuerdo a la problemática planteada en este proyecto, implementaremos las ventajas que ofrece el uso de las RNAs, la cuales resultan muy convenientes debido a su robustez, principalmente en problemas reales y no lineales que permiten la atenuación de ruido por ejemplo proveniente de dispositivos de medición en campo, además de que son muy parametrizables en el sentido de que es posibles adaptarlas a diferentes problemáticas y requerimientos particulares, ésto por medio del número de neuronas, capas iniciales, de salida y ocultas (topología de red), así como la selección de diferentes tipos de funciones de activación: por red, capa o inclusive por neurona. Además, por construcción, el cálculo de las direcciones de descenso del proceso de optimización (gradientes del funcional de costo) es altamente paralelizable de tal manera que las implementaciones computacionales pueden utilizar tecnologías con multinúcleos de memoria compartida (CPUs) o en tarjetas gráficas (GPUs).

**Resultados esperados**

•Definición de metodología para la solución numérica de sistemas de EDP de DA utilizando técnicas de Aprendizaje Profundo (Deep-Galerkin, Deep-Ritz y Physics-Informed Neural Network) con biblioteca Guixhe++. •Simulación de problemas de dispersión de contaminantes en una, dos y tres dimensiones sobre dominios no triviales. •Envío de artículo científico para su revisión y publicación en revista internacional indexada JCR.

**Cronograma de trabajo**

#	Entregable(s) comprometido(s)	Fecha inicio	Fecha fin
1	Artículo de investigación en revista especializada	02/01/2024	20/12/2024
2	Impartición de docencia.	02/01/2024	30/11/2024
3	Participación en comité tutorial, dirección o codirección de trabajo de titulación.	02/01/2024	30/11/2024
4	Participación en comité tutorial, dirección o codirección de trabajo de titulación.	02/01/2024	30/11/2024
5	Divulgación	01/03/2024	01/03/2024
6	Divulgación	05/04/2024	05/04/2024
7	Difusión	26/04/2024	26/04/2024

**Bibliografía relevante**

1.Li, L. and Yin, Z. (2017) Numerical Simulation of Groundwater Pollution Problems Based on Convection Diffusion Equation. American Journal of Computational Mathematics, 7, 350-370. doi: 10.4236/ajcm.2017.73025. 2.Justin Sirignano, Konstantinos Spiliopoulos, DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations, Journal of Computational Physics, Volume 375, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.08.029>. 3.E, W., Yu, B. The Deep Ritz Method: A Deep Learning-Based Numerical Algorithm for Solving Variational Problems. Commun. Math. Stat. 6, 1-12 (2018). <https://doi.org/10.1007/s40304-018-0127-zp>.

