

EL PROBLEMA INVERSO DE LA HIDROLOGIA SUBTERRANEA: ESTADO DEL ARTE Y METODO DE SOLUCION

JESUS CARRERA*
y
SHLOMO P. NEUMAN**

RESUMEN

El problema inverso de la hidrología subterránea, que consiste en la obtención de los parámetros hidráulicos de un acuífero a partir de datos de niveles piezométricos, ha sido objeto de un intenso proceso de investigación en los últimos años. En la primera parte de este artículo, se pasa revista a los trabajos más relevantes de dicho proceso. Ello da pie, en la segunda parte, a proponer un método, basado en la teoría máxima verosimilitud, que permite obtener transmisividades, coeficientes de almacenamiento y goteo en recarga y caudales y niveles en los contornos, con datos en régimen transitorio y/o estacionario en dominios bi- o cuasitri-dimensionales. El método se basa en la teoría del estado adjunto, lo cual se traduce en un ahorro considerable de memoria y tiempo de ordenador. La eficacia del algoritmo se muestra con un ejemplo.

SUMMARY

The inverse problem of groundwater hydrology consists in obtaining the aquifer parameters from head data. Lately, it has been the subject of an intense research effort. The first part of this paper reviews the most relevant works and leads us to some of the ideas to be used in our own approach. This is presented in the second part and is based on maximum likelihood theory. It allows the estimation of transmissivities, storage and leakage coefficients, areal recharge rates, and boundary heads and flows, under transient and/or steady-state conditions, and bi- or quasitri-dimensional domains. The minimization algorithm is based on adjoint-state theory, which leads to considerable savings in terms of both computer storage and CPU time. The method is illustrated with an example.

INTRODUCCION

A partir de la década de los setenta se ha generalizado el uso de modelos numéricos para el estudio de aguas subterráneas, hasta el punto de que muchos de los informes hidrogeológicos están dirigidos a la construcción de un modelo. Esto es una consecuencia lógica de la necesidad de cuantificar los efectos de los bombeos, recargas o impactos que se planifiquen. Es decir, la toma de decisión respecto a un posible impacto sobre el acuífero ha de hacerse sobre la base de la aceptabilidad económica,

* E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos.
Universidad Politécnica de Catalunya, Barcelona, España.

** Department of Hydrology. University of Arizona,
Tucson, Arizona, U.S.A.

Recibido: Julio 1985

ambiental e institucional de los efectos previstos. Esta necesidad cuantificadora sólo se ve parcialmente satisfecha por los métodos analíticos, ya que la heterogeneidad inherente a los medios reales dificulta la obtención de soluciones a las ecuaciones diferenciales. Por ello, el desarrollo de los métodos numéricos ha sido considerable, y existen programas para simular el flujo bajo las condiciones más diversas. Sin embargo, este desarrollo de herramientas de simulación no ha ido convenientemente acompañado de un desarrollo paralelo de las de estimación. Así es frecuente que la disparidad entre lo calculado y la realidad no sea debida tanto a dificultades numéricas como a la falta de concordancia entre el sistema real y el modelo. Esta puede ser debida a errores en la conceptualización de la realidad o a errores en los valores asignados a las propiedades del medio, dando lugar, respectivamente, a los problemas de identificación de la estructura del modelo y de estimación de los parámetros, o problema inverso. El objetivo de este artículo es trazar la evolución histórica y proponer un método de solución para el segundo, que, si bien está íntimamente ligado al primero, ha sido objeto de mucha más atención. El problema de la identificación del modelo será tratado en otro artículo.

En principio, podría parecer que el procedimiento más lógico para asignar valores numéricos a los parámetros físicos que entran en un modelo (transmisividades, coeficientes de almacenamiento y goteo, etc) es medirlos. Sin embargo, aunque las medidas son necesarias, no resultan suficientes, ya que son caras, sujetas a errores importantes, normalmente escasas, su obtención suele requerir mucho tiempo y, sobre todo, pueden no ser representativas del medio, sino sólo de un pequeño entorno alrededor del punto de medida. Por otro lado, las medidas de la respuesta del acuífero (niveles en los piezómetros) también tienen errores. En resumidas cuentas, cuando se introducen en el modelo los valores de los parámetros medidos directamente, los niveles calculados difieren sensiblemente de los observados, lo que resta fiabilidad al modelo. De hecho, si la fiabilidad se basa en dicho ajuste, parece lógico modificar los valores medidos de los parámetros para maximizarlo, proceso que se denomina calibración.

La mayoría de los modelos de acuíferos siguen alguna forma de calibración manual. Esto es, el hidrólogo, empieza con los valores medidos y los va variando, más o menos subjetivamente, de forma que se minimicen los residuos (diferencias entre valores calculados y medidos) de niveles. La calibración manual presenta varios inconvenientes: consume mucho tiempo, por lo que es cara, no existen criterios para variar los parámetros, a veces es preciso ignorar algunos datos, no está clara la ponderación que debe darse a las distintas piezas de información, ni cuando debe detenerse el proceso, etc. El resultado es un modelo que depende fundamentalmente de la paciencia del hidrólogo y cuya fiabilidad es desconocida. Estos inconvenientes han motivado, en los últimos años, un esfuerzo considerable y pocas veces fructífero para poner a punto algoritmos de calibración automática. El hecho de que este esfuerzo no haya conducido a los resultados esperados puede atribuirse a varios factores: poca eficiencia de los métodos (alto coste de ordenador), falta de generalidad, no consideración de la información existente sobre los parámetros, aparente no unicidad y/o inestabilidad, ausencia de un marco estadístico, etc. Sin embargo, el problema principal radica en la imposibilidad de incluir los datos subjetivos del hidrólogo, que con frecuencia son los más importantes, dada la naturaleza cualitativa de muchas de las fuentes de información.

En lo que resta del artículo se pasa revista a la evolución histórica del problema inverso, lo que da pie a proponer un método que, superando algunas de las dificultades listadas en la párrafo anterior, mantiene los suficientes grados de libertad como para permitir la inclusión de fuentes de información subjetivas.

EL PROBLEMA "DIRECTO"

El flujo del agua en medios porosos sigue la ecuación

$$\nabla \cdot (K \cdot \nabla h) + q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \text{ en } D \tag{1}$$

donde D es el dominio del problema, K es el tensor de permeabilidades (o transmisividades en el caso bidimensional), h es el nivel piezométrico q es un término de fuentes y sumideros internos, S_s es el coeficiente de almacenamiento, y ∇ es el operador "nabla" (divergencia cuando actúa escalarmente sobre un vector, o gradiente si actúa sobre un escalar). El problema directo consiste en resolver la ecuación (1) con las condiciones iniciales y de contorno:

$$h(x,0) = h_0(x) \quad \text{en } D \tag{2}$$

$$K \cdot \nabla h \cdot n = \alpha(H - h) + Q \quad \text{en } \Gamma \tag{3}$$

donde Γ es el contorno de D, H es el nivel exterior en el contorno, Q es flujo normal a Γ, n es el vector unitario ortogonal a Γ y dirigido hacia afuera, y α es un escalar que controla el tipo de condición de contorno. Si α = 0, la ecuación (3) representa una condición de caudal fijo (tipo Neumann); si α = ∞, (3) es una condición de nivel fijo (tipo Dirichlet); de lo contrario, (3) representa el caso en que el caudal en el contorno es función lineal del nivel h (tipo mixta) y α es el coeficiente de goteo. En régimen estacionario, la derivada temporal en la ecuación (1) se anula, resultando una ecuación del tipo de Poisson con las condiciones de contorno dadas por la ecuación (3).

En la mayoría de las situaciones reales, la forma arbitraria de los contornos y la variabilidad espacial de los parámetros (K, S_s, q, H, Q y α) imposibilitan la solución analítica de esta ecuación, por lo que hay que recurrir a métodos numéricos. En lo sucesivo emplearemos el método de los elementos finitos, con elementos triangulares lineales. Siguiendo el método de Galerkin se llega de forma inmediata a las ecuaciones:

$$A h = G \tag{4}$$

para régimen estacionario, donde A es una matriz (NXN) función de K y de las condiciones de contorno, N es el número de nudos, h es el vector (de dimensión N) de niveles en todos los nudos, y G es un vector de flujos, que depende de q, α, H y Q. En régimen transitorio, el esquema implícito daría lugar a

$$(A + D/\Delta t) h^{k+1} = G + D h^k/\Delta t \tag{5}$$

donde Δt es el incremento de tiempo, D es una matriz, normalmente diagonal, función de S_s, y k representa el número de intervalo de tiempo. Empezando con h⁰, dado por las condiciones iniciales, se resuelve la ecuación (5) para obtener h¹, con éste se calcula h², y así sucesivamente.

Obviamente, la solución de estas ecuaciones requiere conocer los valores de los niveles iniciales y parámetros en todos los puntos del dominio D y su contorno. Es práctica común suponer que los parámetros son constantes sobre regiones, que constan de uno o varios elementos, llamadas zonas. Respecto a los niveles iniciales, con frecuencia se supone que éstos corresponden al régimen estacionario, dado por la solución de la ecuación (4).

DESARROLLO HISTORICO

La idea de determinar la distribución de transmisividades en un dominio, a partir de niveles medidos en pozos, es tan vieja como la práctica de la modelación del flujo. Trabajando con modelos analógicos, se observa que si se pretendía reproducir los niveles observados, era necesario permitir la variación espacial de transmisividades. Stallman⁵⁶ cita un informe de Bennet y Meyer⁵ en el que los parámetros hidráulicos se obtienen a partir de redes de flujo dibujadas en base a los niveles medidos. El trabajo del propio Stallman parece ser el primero en el que se intenta hacer algo similar de forma numérica. Para ello, se calculaban los niveles en los nudos de una malla de diferencias finitas, mediante interpolación de los valores medidos, con lo que se podía calcular la distribución de valores relativos de transmisividad. Curiosamente, ya Stallman observó algunos de los problemas que desde entonces han plagado la solución del problema inverso, entre los que se incluyen inestabilidad, necesidad de agrupamiento de los parámetros por zonas, etc.

Estas ideas fueron formalizadas por Nelson^{45, 46, 47}, que planteó la estimación de parámetros como el problema de Cauchy que resulta, en el caso estacionario, de suponer conocidas con precisión h y q en todo el dominio. Además, para asegurar la unicidad se hace necesario definir K , o el caudal, en un punto de cada línea de corriente. Sin embargo, cuando los niveles medidos contienen errores, lo cual es inevitable, estos pueden ampliarse considerablemente al calcular los gradientes hidráulicos, que son los coeficientes de K en la ecuación (1)⁴⁹. El resultado final es que los parámetros calculados de esta forma presentan graves oscilaciones espaciales, que no son compatibles con la realidad física. Este es uno de los síntomas de la inestabilidad que inexorablemente sufren este tipo de enfoques. En realidad, esta dificultad ya había sido predicha por Hadamard^{33, 34} en conexión con algunos problemas "mal-definidos" originados por ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. De hecho, Allison¹ justifica la falta de herramienta matemática para atacar estas inestabilidades en la influencia de dicho matemático, empleando sus palabras (traducidas libremente):

"Hadamard había declarado que para que un problema matemático tenga sentido, ha de ser "bien definido", es decir la solución debe existir y ser única y estable con respecto a pequeñas variaciones en los datos de entrada. El respeto por Hadamard era tan grande que generaciones de matemáticos consideraron tabú los problemas "mal definidos". Sólo recientemente se ha puesto de manifiesto que hay problemas, los llamados problemas inversos, que tienen mucho sentido y són casi siempre inestables respecto a pequeñas variaciones en los datos de entrada.

De hecho, la inestabilidad es con frecuencia una propiedad interna invariante de estos problemas, independientemente de cómo se propongan, por lo que el término "mal definidos" puede resultar confuso".

Resulta, pues, evidente que la formulación inmediata del problema inverso a partir de la ecuación de flujo (1), resultará inestable; esto es sin contar con que requiere datos que normalmente no están disponibles. Ello puso de manifiesto la necesidad de agrupar los parámetros por zonas, para reducir el número de incógnitas respecto al de ecuaciones, lo que requerirá una solución por mínimos cuadrados, o similar. La primera aplicación de mínimos cuadrados al problema inverso, en conexión con modelos de depósitos petrolíferos, es la de Jacquard y Jain³⁸ que dividen el dominio en zonas de permeabilidad constante y emplean un método variacional para minimizar la suma de los cuadrados de los residuos (diferencias entre presiones o niveles medidos y calculados). Jahns⁴⁰ formuló el problema de manera semejante, pero lo resolvió empleando las ecuaciones normales, o inversión generalizada (véase, por ejemplo, Graybill³²).

Los métodos referidos establecen los dos enfoques clásicos del problema inverso,

denominados "directos" e "indirectos" por Neuman⁴⁸. En estos últimos se formula un criterio que mide la diferencia entre los niveles medidos y calculados como, por ejemplo, el de la suma de los cuadrados de los residuos, empleado por Jacquard y Jain³⁸ y Jahns⁴⁰. El conjunto de parámetros que minimizan dicho criterio constituye la solución del problema inverso. Dado que la relación entre niveles y parámetros es no lineal, el método indirecto requiere un proceso iterativo de solución, con al menos una simulación por iteración, lo que suele hacerlo relativamente caro.

En los métodos directos, las transmisividades se consideran como función de los niveles, o sus gradientes, resultando problemas de Cauchy del tipo descrito por Stallman⁵⁶, Nelson^{46, 47}, Scarascia y Ponzini⁵⁵, Frind y Pinder³⁰ e Irmay³⁷ entre otros. Cuando el número de incógnitas es menor que el de ecuaciones, pueden emplearse mínimos cuadrados o programación lineal. Sin embargo, en estos casos, lo que se minimizan no son los errores en los niveles, sino los residuos de las ecuaciones nodales, que representan el error del balance de masas en cada nudo. Por ejemplo, Kleinecke⁴¹ minimiza la suma, extendida sobre todos los nudos, del máximo error en el tiempo del balance de masas de cada nudo; este criterio le permite emplear programación lineal. Precisamente, la relación lineal entre transmisividades y errores de balance de masas elimina la necesidad de cálculos iterativos, reduciendo los costes respecto a los métodos indirectos. Sin embargo, a pesar de que se mejora parcialmente, el problema sigue estando mal definido y la solución suele ser inestable, lo que se manifiesta en forma de oscilaciones espaciales de los parámetros calculados. Una posible solución sería la de imponer límites superiores e inferiores en el rango de transmisividades admisibles. Esto, sin embargo, no ha tenido éxito ya que los valores calculados tienden a coincidir con los límites impuestos y simplemente oscilar entre ellos⁵¹. Aunque la apariencia mejora, los resultados siguen careciendo de sentido.

Los métodos indirectos mejoran esta situación ya que, consciente o inconscientemente, los criterios, y en especial el de mínimos cuadrados, tienden a filtrar parte de los errores en los datos de niveles, cosa que le resulta imposible a los métodos directos. A pesar de esto, los resultados son inestables y, como antes, la simple imposición de límites superiores e inferiores no hace sino modular la amplitud de las oscilaciones.

Korganoff⁴² y Emsellem y De Marsily²⁸ fueron los primeros en reconocer la necesidad de "regularizar" la solución para eliminar las oscilaciones. Para ello, emplearon el método directo, buscando la solución con un número de zonas mínimo y con error de balance de masas y fluctuaciones espaciales aceptables. Se puede demostrar que esto es equivalente a añadir un criterio de "regularización" o "penalty" al criterio original, que mide las desviaciones de los parámetros respecto a su media y cuyo efecto es penalizar las soluciones con fluctuaciones al aumentar el valor del criterio conjunto, combinación lineal de los anteriores.

Otro método que intenta estabilizar la solución es el propuesto por Distefano y Rath²⁷ que representan la transmisividad mediante un spline continuo, definido por los valores en un número discreto de nudos.

Chang y Yeh¹⁴ propusieron estimar solamente aquellas combinaciones de parámetros a las que los niveles son más sensibles. Bastin y Duque³ sugirieron un criterio de regularización basado en la hipótesis de que las transmisividades siguen un proceso autoregresivo en el espacio. Yeh y Yoon⁶⁵ vuelven sobre las ideas de Emsellem y De Marsily, y más tarde⁶⁶ las complementan con el método de Kriging, con la idea de "suavizar" los niveles observados.

En el campo de modelos de depósitos petrolíferos, cabe destacar los trabajos de Chen et al¹⁸ y Gavalas et al³¹, que pueden considerarse la primera formulación en un marco estadístico. En el segundo, los autores adoptan un enfoque Bayesiano en el que los parámetros se ven como variables aleatorias con media constante y matriz de

covarianza conocidas. Esto da lugar también a un criterio de regularización que tiende a dejar los valores calculados cerca de su valor medio.

La limitación de las técnicas de regularización propuestas hasta aquí es que no emplean los valores de las transmisividades obtenidos mediante ensayos, estos son ignorados salvo para calcular medias regionales. Para aprovechar esta valiosa información, Neuman^{48, 51}, propone criterios de regularización, llamados de plausibilidad por dicho autor, que miden las desviaciones entre los valores calculados de la transmisividad y la estimación previa de la misma sobre cada zona, obtenida en base a los resultados de ensayos de bombeo.

La necesidad de un marco estadístico adecuado se fue haciendo más clara. Además del trabajo de Gavalas et al³¹, Cooley^{21, 22} desarrolló un algoritmo de regresión para régimen estacionario que funcionaba bien cuando el número de parámetros era pequeño. Wilson et al⁶¹ y Wilson y Dettinger⁶² propusieron algoritmos basados en el filtro de Kalman. Neuman y Yakowitz⁵⁴ integraron los métodos de regularización propuestos por Neuman^{48, 51} en un método bayesiano. Cooley^{23, 24} presenta un enfoque similar, introduciendo la información previa de la forma propuesta por Theil⁵⁷. Carrera⁹ y Carrera y Neuman¹⁰ emplean el método de máxima verosimilitud que, mantiene el espíritu de los anteriores y permite una definición precisa de la ponderación relativa entre las distintas fuentes de información.

Desde el punto de vista numérico, se han empleado todo tipo de algoritmos para la minimización de las funciones objetivo, desde métodos puramente empíricos hasta programación lineal o cuadrática (en el caso de enfoques directos). Los que parecen haber tenido más éxito son los derivados del método de Newton y los métodos de gradiente. Entre los primeros, Jahns⁴⁰ empleó las ecuaciones normales, Yeh y Tauxe⁶⁴ emplearon el denominado método de cuasilinearización, que da una primera aproximación del hessiano en cada iteración, y Cooley^{23, 24} emplea una variación del método de Marquardt. Todos estos métodos requieren el cálculo del jacobiano (matriz de derivadas de los niveles respecto a los parámetros), lo que supone una simulación por parámetro en cada iteración. Más económicos son los métodos del gradiente, que sólo requieren una simulación por iteración para calcular el gradiente. El que parece más generalizado es el basado en el estado adjunto, desarrollado para diferencias finitas por Chavent^{15, 16}. Neuman⁴⁹ lo extiende a elementos finitos para el cálculo de transmisividades en régimen estacionario y, posteriormente, en régimen transitorio⁵⁰. Carrera⁹ y Carrera y Neuman¹¹ derivan las ecuaciones del estado adjunto para calcular también coeficientes de almacenamiento y goteo, recarga y niveles y flujos en el contorno, en problemas bidimensionales y, posteriormente, en problemas cuasitridimensionales^{13, 53}. La comparación más completa entre los distintos métodos es posiblemente la de Cooley²⁵, que concluye que el mejor es el de Marquardt, identificando algunas limitaciones en los métodos de gradientes conjugados. Algunas de estas, sin embargo, ya habían sido identificadas y obviadas por Carrera⁹, sin merma en la eficiencia de los métodos de gradientes conjugados.

Para finalizar esta revisión, las tendencias actuales parecen converger en la necesidad del empleo de la información previa^{9, 10, 11, 12, 23, 24, 60}. En cuanto a la caracterización estadística de dicha información previa, Neuman⁵² recomendó en 1979 en uso de métodos geoestadísticos, tales como el de Kriging que permiten obtener estimaciones de los valores medios de la transmisividad (o su logaritmo) en cada una de las zonas, así como la correspondiente matriz de covarianza. Ejemplos de esto son los trabajos de Binsariti⁶, Clifton¹⁹, Clifton y Neuman²⁰, Fennessy y Neuman²⁹ y Jacobson.

En lo que resta de este artículo se presenta, con algunas modificaciones, el método propuesto por Carrera⁹ que emplea el método de máxima verosimilitud y permite el cálculo de varios tipos de parámetros en régimen permanente y/o estacionario, en medios bi- o cuasitridimensionales.

ESTIMACION POR MAXIMA VEROSIMILITUD

Tanto la introducción como la posterior discusión sobre la evolución histórica del problema inverso sugieren la necesidad de adoptar un marco estadístico para su solución. Existen muchas posibilidades, pero la mayoría pueden considerarse casos particulares de dos: la basada en el Teorema de Bayes, y la derivada del concepto de máxima verosimilitud. La primera, estimación bayesiana, trata los parámetros, \mathbf{p} , como variables estocásticas con una función de distribución dada y consiste en maximizar la probabilidad de \mathbf{p} , condicionada por los valores medidos, \mathbf{z}^* , de parámetros y niveles. La segunda consiste en maximizar la verosimilitud de \mathbf{p} dado \mathbf{z}^* , que se define como la probabilidad de ocurrencia de \mathbf{z}^* si los parámetros fuesen ciertos. La selección de un método u otro no está exenta de controversia y con frecuencia se basa en cuestiones de actitud ya que muchas veces los resultados son iguales. En nuestro caso, hemos elegido el segundo método por dos motivos. Por un lado, el método de máxima verosimilitud (MMV) no requiere la hipótesis de que el modelo numérico reproduzca exactamente el sistema real². Esto, además de dejarle a uno con la conciencia tranquila, no tendría mayor importancia práctica si no fuera porque el reconocer el carácter aproximado del modelo numérico conduce, de forma natural, a criterios para comparar la validez de distintos modelos. Por otro lado, en el MMV los parámetros se consideran fijos pero desconocidos. Ello parece responder de forma más intuitiva a la realidad física que la alternativa de suponer los parámetros intrínsecamente estocásticos.

En el resto de esta sección se desarrolla la aplicación del MMV al caso de modelos de flujo en medios porosos, hasta llegar a una forma de función objetivo susceptible de optimización. Supondremos que \mathbf{z} sigue una distribución normal multivariada, lo cual puede conseguirse, como veremos, tras una transformación adecuada de variables. Además de los parámetros hidráulicos, \mathbf{p} , normalmente habrá que calcular otros estadísticos $\underline{\theta}$, que cuantifican las funciones de distribución de los anteriores. Sea $\underline{\beta}$ el vector de todos los parámetros, \mathbf{p} y $\underline{\theta}$. Entonces la función de verosimilitud de $\underline{\beta}$ dado \mathbf{z}^* (probabilidad de ocurrencia de \mathbf{z}^* si los parámetros y el modelo fuesen ciertos) vendrá dada por:

$$L(\underline{\beta}/\mathbf{z}^*) = (2\pi)^{-n_h/2} |\mathbf{C}|^{-1/2} \exp [(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)] \quad (6)$$

donde \mathbf{C} es la matriz de covarianza de \mathbf{z}^* , y las n_h primeras componentes de \mathbf{z} representan los niveles, $\mathbf{h}(\mathbf{p})$, calculados con los parámetros \mathbf{p} , mientras que las restantes son las propias componentes de \mathbf{p} de las que se dispone de información previa.

Con esta formulación, sólo restaría definir la matriz \mathbf{C} y las transformaciones a realizar en las variables para que sigan una distribución normal. Dado que, en la práctica, la estimación de parámetros es independiente de la medición de niveles, supondremos que, a priori, los errores de estos no están correlacionados con los de aquéllos, por lo que \mathbf{C} puede descomponerse en dos bloques, \mathbf{C}_h y \mathbf{C}_p , correspondientes a niveles y parámetros, respectivamente. Pasemos a estudiar estas independientemente.

Las discrepancias entre niveles medidos y calculados tienen orígenes muy diversos (fluctuaciones temporales, heterogeneidades, errores de interpretación, de medida etc...). El hecho de que el número de fuentes de error sea grande, su valor esté acotado y actúen independiente y aditivamente sugiere la hipótesis de normalidad, sin necesidad de transformaciones. En cuanto a las varianzas, el hecho de que con frecuencia sea más fácil cuantificar la incertidumbre en términos relativos que en absolutos nos lleva a adoptar la propuesta por Neuman y Yakowitz⁵⁴:

$$\mathbf{C}_h = \sigma_h^2 \mathbf{V}_h \quad (7)$$

donde V_h es una matriz conocida simétrica y positiva definida, y σ_h^2 es un escalar desconocido. Argumentos hidrológicos sugieren que la correlación entre los errores en distintos pozos tenga una estructura independiente del tiempo, y que la correlación temporal entre errores en cada punto no varíe drásticamente de un pozo a otro (9). Esto nos permite escribir V_h de forma mucho más simplificada como:

$$V_{hijkl} = V_{xij} V_{tkl} \quad (8)$$

donde V_{hijkl} es la covarianza entre los errores de niveles l_{ik} (en el punto x_i y tiempo t_k) y l_{jl} ; V_{xij} es la covarianza entre errores en los puntos x_i y x_j ; y V_{tkl} es la correlación entre l_{ik} y l_{il} para cualquier x_i . La estructura espacial de errores dada por V_x , depende de si los niveles observados se emplean directamente o se interpolan previamente sobre los nudos de la malla. En el primer caso está justificado el emplear una matriz diagonal en la que V_{xii} es la suma de las varianzas de todos los factores que contribuyen al error en el punto x_i . En el segundo caso, la estructura depende del método de interpolación empleado, es de uso frecuente el método de Krigeadó ("Kriging"), que permite calcular V_x . En cuando a la estructura temporal, se podría aplicar una discusión similar. Por su simplicidad, hemos empleado varias veces la matriz de covarianza V_t que resulta de suponer un proceso autoregresivo de orden 1 para los errores temporales.

Respecto a los parámetros, cada tipo requeriría una discusión independiente (ver, por ejemplo⁹). Existe evidencia suficiente^{26, 43} para apoyar la hipótesis de que las permeabilidades siguen una distribución logarítmico-normal, por tanto, su logaritmo está normalmente distribuido. La matriz de covarianza suele obtenerse por el método de Kriging (véase, por ejemplo²⁰), que también proporciona los valores medios de la permeabilidad (o transmisividad) sobre cada zona a partir de los valores obtenidos en los ensayos de bombeo. Una discusión similar es aplicable a los demás parámetros. El coeficiente de goteo puede seguir también una distribución logarítmico-normal. La del coeficiente de almacenamiento no está clara, por lo que de momento hemos dejado abierta la posibilidad de hacer una transformación logarítmica o aritmética. Respecto a recargas y caudales en los contornos, el tipo de distribución de los errores de estimación previa depende de la metodología seguida en dicha estimación. Como, en condiciones normales, la distribución de errores no debe tener colas de mucho peso y ser más o menos simétrica, cabe esperar que el emplear la de Gauss conduzca a resultados robustos. Por último, los niveles externos suelen conocerse de forma determinista. De lo contrario, la discusión de los niveles en el acuífero también podría aplicarse aquí.

Supondremos, por último, que las correlaciones entre los distintos tipos de parámetros son despreciables, lo cual es consecuencia de la independencia de los métodos seguidos para estimarlos. Esta hipótesis puede ser bastante débil en el caso de estimación conjunta de transmisividades y coeficientes de almacenamiento⁴. En cualquier caso, respecto a las matrices de covarianza de los parámetros adoptaremos una actitud similar a la de los niveles, reconociendo la posibilidad de que no se cuantifiquen todas las fuentes de error. Por tanto, dicha matriz vendrá dada para cada tipo de parámetro p_i ($i=K, Ss, q, H, Q$ y α , o sus transformadas) por:

$$C_i = \sigma_i^2 V_i \quad (9)$$

donde C_i es la matriz de covarianza de los errores de estimación previa de los parámetros p_i , V_i es una matriz conocida, simétrica y positiva definida y σ_i^2 es un escalar

incógnita. Con esto quedan expresados todos los términos que entran en la función de verosimilitud. Nuestro algoritmo minimiza el logaritmo de la verosimilitud cambiado de signo, a veces llamado soporte

$$S = -2 \ell_n [L (\beta / z^*)] \quad (10)$$

Sustituyendo las ecuaciones (7), (8) y (9) en (10), teniendo en cuenta que $|V_h| = |V_x|^{N_t} |V_t|^{N_x}$, resulta

$$S = \frac{J_h}{\sigma_h^2} + \sum_i \frac{J_i}{\sigma_i^2} + N_x \ell_n |V_t| + N_t \ell_n |V_x| + \sum_i \ell_n |V_i| + \\ + N_h \ell_n |\sigma_h^2| + \sum_i N_i \ell_n \sigma_i^2 + N \ell_n (2 \pi) \quad (11)$$

donde J_h es el criterio de ajuste del modelo

$$J_h = (h^* - h)^T V_h^{-1} (h^* - h) \quad (12)$$

J_i es el criterio de plausibilidad para el parámetro p_i

$$J_i = (p_i^* - p_i)^T V_i^{-1} (p_i^* - p_i) \quad (13)$$

N_x es el número de puntos de observación, N_t es el número de medidas en el período transitorio en cada pozo, N_h es el número total de datos de niveles (normalmente $N_x * N_t$), N_i es el número de parámetros de tipo i para los que se dispone de datos, y N es el número total de datos ($N_h + \sum_i N_i$).

En el caso particular en que los parámetros estadísticos (σ_h^2 , σ_i^2 , coeficiente de autocorrelación en V_t etc) sean conocidos, la minimización de S es equivalente a la del criterio

$$J = J_h + \sum_i \lambda_i J_i \quad (14)$$

donde $\lambda_i = \sigma_h^2 / \sigma_i^2$ pueden considerarse como coeficientes de ponderación relativa entre las distintas piezas de información. En la caso en que los parámetros estadísticos sean desconocidos, suele ser conveniente minimizar J para una serie de λ_i , obtener S , sustituyendo directamente en la ecuación (10), y elegir el conjunto de parámetros que lo hacen mínimo. Este proceso se reduce a dos o tres pasos, en los casos estudiados si empezando con un conjunto arbitrario de λ_i se minimiza J con nuevos valores obtenidos mediante $\lambda_i = \tilde{\sigma}_h^2 / \tilde{\sigma}_i^2$, con $\tilde{\sigma}_h^2 = J_h / N_h$ y $\tilde{\sigma}_i^2 = J_i / N_i$. Esto se repite hasta que se estabilizan los valores calculados de λ_i .

Asintóticamente, los parámetros siguen una distribución normal multivariada, por lo que quedan completamente definidos por su media y su matriz de covarianza. La media viene dada por la propia estimación. Un límite inferior de la matriz de covarianza, Σ , está dado por la inversa de la matriz de información de Fisher⁸, F , que se define como

$$F_{mn} = \frac{1}{2} E \left[\frac{\partial^2 S}{\partial \beta_m \partial \beta_n} \right] \quad (15)$$

En la práctica, sólo interesan las componentes de esta matriz correspondientes a los parámetros hidráulicos, que se obtienen a partir de (11). Derivando esta expresión y despreciando los términos de segundo orden se llega a

$$\underline{\Sigma}_p = \left[\frac{1}{\sigma^2} \mathbf{J}^T \mathbf{V}_h^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1} \right]^{-1} \quad (16)$$

donde \mathbf{J} es la matriz jacobiana ($J_{kl} = \partial h_k / \partial p_l$) y \mathbf{C}_p es una matriz diagonal por bloques, siendo estas las matrices $\mathbf{C}_i = \sigma_i^2 \mathbf{V}_i$.

Esta matriz tiene, per se, varias aplicaciones inmediatas, tales como el estudio de errores en la predicción diseño de redes de observación, estudio de la información contenida en las distintas fuentes de datos, etc. Sin embargo, no es conveniente para un análisis cualitativo de la incertidumbre asociada a cada parámetro, que puede quedar "escondida" por las interacciones entre parámetros. Para ello es más aconsejable trabajar con los autovalores y autovectores.

UNICIDAD Y ESTABILIDAD DE LA SOLUCION

La cuestión de unicidad y estabilidad de la solución del problema inverso ha sido un tema muy polémico en la literatura hidrológica reciente^{44, 63}. El análisis exhaustivo de estos temas cae fuera del marco de este artículo, por lo que nos limitaremos a resumir las conclusiones de Carrera⁹. Diremos que un sistema es identificable si los niveles calculados en los puntos de observación son sensibles a variaciones de los parámetros o combinaciones lineales de los mismos. Esta condición es equivalente a la de que el rango del jacobiano sea igual al número de parámetros. Por otro lado, diremos que la solución es única si no existe otro conjunto de parámetros que satisfagan la condición de mínimo. Una condición suficiente para la unicidad global es que el hessiano sea definido-positivo sobre el campo de variación de los parámetros. La importancia de la diferenciación entre los conceptos de identificabilidad y unicidad radica en que, contrariamente a una extendida creencia, no son equivalente. Así, en ausencia de información previa, la identificabilidad es condición necesaria pero no suficiente para la unicidad. Si existe información previa, entonces no es ni siquiera condición necesaria. Así, las condiciones necesarias derivadas para la identificabilidad también lo serán para la unicidad (en ausencia de información previa sobre los valores de los parámetros).

En general, no puede asegurarse la unicidad global de la solución. De hecho, existen contraejemplos⁹ con mínimos locales diferenciados. Sin embargo, la inclusión de información previa aumenta las posibilidades de convexidad global, al añadir un término definido-positivo al hessiano (véase ec. 16), y, por tanto, de unicidad.

Si el problema es identificable, lo que como dijimos es fácil de comprobar, entonces la solución es Lipschitz continua en los datos¹⁷ y, por tanto, localmente única y estable. La expresión de la constante de Lipschitz es demasiado compleja para ser de utilidad en problemas reales, si bien sirve para dar algunas normas prácticas, de tipo cualitativo, para mejorar la estabilidad.

Por último, el criterio que se deriva de la teoría de máxima verosimilitud es del tipo propuesto por Tihonov^{58, 59} para regularizar la solución de problemas mal definidos. Si bien, la hipótesis de linealidad requerida por Tihonov no se satisface en nuestro caso, creemos que el espíritu del método va más allá del dominio de las funciones lineales, lo cual, de momento, no ha sido contradicho por los resultados. En cualquier caso, no deja de ser reconfortante que una formulación basada en criterios estadísticos

(físicos) coincida con la derivada de la necesidad de estabilizar la solución, lo que nos hace volver sobre la idea de Hadamard de que sólo las soluciones de problemas bien definidos tienen sentido físico.

ALGORITMO DE MINIMIZACION

Para la minimización de J , ec. (14), se emplean varios métodos de gradientes conjugados, que precisan el cálculo del gradiente de J . Dado que los J_i son formas cuadráticas de $(p_i^* - p_i)$, el cálculo de su gradiente es inmediato. Sin embargo, el de J_h se complica por la relación no lineal entre niveles y parámetros. Lo más común es iterar empleando la matriz jacobiana, cuyas columnas son las derivadas de los niveles en todos los puntos y tiempos de observación respecto a los parámetros del modelo. Cuando el número de medidas y/o parámetros son grandes, el almacenamiento y tiempo de CPU pueden resultar prohibitivos, por lo que se propone el empleo del método del estado adjunto, que se describe a continuación.

Para la obtención de las ecuaciones del estado adjunto y del gradiente de J_h conviene escribir éste en su forma continua, es decir

$$J_h = \int_R \int_T \int_{R'} \int_{T'} [h^*(x', t') - h(x', t')] W(x', x, t', t) \cdot [h^*(x, t) - h(x, t)] dt' dx' dt dx + \int_R \int_R [h_o^*(x') - h_o(x')] U(x', x) [h_o^*(x) - h_o(x)] dx' dx \quad (17)$$

donde $W(x, x', t, t') = W(x', x, t', t)$ y $U(x, x') = U(x', x)$. Nótese que esta ecuación se reduce a la original, (12), sin más que sustituir W y U por sumas de productos de deltas de Dirac. Por conveniencia para las derivaciones subsiguientes hemos descompuesto J_h en suma de dos integrales, la primera agrupa los niveles en régimen transitorio, así como las covarianzas de estos con los de régimen estacionario; La segunda agrupa sólo estos últimos.

Los estados adjuntos, $\psi(x, t)$ en régimen transitorio y $\psi_o(x)$ en régimen estacionario, son dos funciones diferenciables que se definen para obtener el gradiente de J_h y que vienen dadas, como se indica en el apéndice A, por

$$\nabla \cdot (K \cdot \nabla \psi) = -S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} - 2 \int_R \int_T [h^*(x', t') - h(x', t')] W(x', x, t', t) dt' dx' \quad (18)$$

que tiene que resolverse empezando por el tiempo final, τ , en el que se impone la condición "inicial"

$$\psi(\tau) = 0 \quad (19)$$

y con condiciones de contorno

$$K \cdot \nabla \psi \cdot n = -\alpha \psi \quad (20)$$

El estado adjunto estacionario está dado por

$$\nabla \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla \psi_o) = -S_s \psi(o) - 2 \int_{R'} [h_o^*(\mathbf{x}') - h_o(\mathbf{x}')] U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) d\mathbf{x}' \quad (21)$$

con condiciones de contorno

$$\mathbf{K} \cdot \nabla \psi_o \cdot \mathbf{n} = -\alpha \psi_o \quad (22)$$

Si el funcional J_h estuviese escrito en su forma discreta, (12), las integrales en los segundos miembros de (18) y (21) tendrían que sustituirse por sumas.

Para obtener el gradiente de J_h , es necesario "parametrizar" los "parámetros" del modelo. Es decir, en nuestras derivaciones hemos supuesto que \mathbf{K} , S_s , etc son funciones del espacio y del tiempo. Sin embargo, para poder hablar del gradiente, hemos de expresarlas mediante un número finito de variables. Para ello se recurre al concepto de zonas, mencionadas anteriormente, de forma que los parámetros hidráulicos vengan dados por ecuaciones de la forma

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_k} \mathbf{K}_i \phi_{ki}(\mathbf{x}) \quad (23)$$

donde N_k es el número de zonas de conductividad hidráulica, y $\phi_{ki}(\mathbf{x})$ es una función de forma definida como $\phi_{ki}(\mathbf{x}) = 0$ si \mathbf{x} no pertenece a la zona i , y $\phi_{ki}(\mathbf{x}) = \text{constante}$ si \mathbf{x} pertenece a la zona i (en realidad, se permite la variación de forma prefijada de dicha constante para cada elemento de una zona). Para los demás parámetros se definen expresiones análogas. Nótese que, estrictamente hablando, los únicos parámetros del modelo son los \mathbf{K}_i , S_{si} , H_i etc.

Con esta definición, las componentes del gradiente de J_h , que se derivan en el apéndice B, son

$$\frac{\partial J_h}{\partial \mathbf{K}_i} = \int_R \nabla \psi_o \otimes \nabla h_o \phi_{ki} d\mathbf{x} + \int_R \int_T \nabla \psi \otimes \nabla h \phi_{ki} dt d\mathbf{x} \quad (24)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial S_{si}} = \int_R \int_T \psi \frac{\partial h}{\partial t} \phi_{si} dt d\mathbf{x} \quad (25)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial q_{oi}} = - \int_R \psi_o \phi_{oi} d\mathbf{x} \quad (26)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial q_i} = - \int_R \int_T \psi \phi_{oi} dt d\mathbf{x} \quad (27)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial H_i} = - \int_{\Gamma} \int_T \alpha \psi \phi_{Hi} dt d\mathbf{x} \quad (28)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial H_{oi}} = - \int_{\Gamma} \alpha \psi_o \phi_{Hi} dx \quad (29)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial Q_i} = - \int_{\Gamma} \int_T \psi \phi_{Qi} dt dx \quad (30)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial Q_{oi}} = - \int_{\Gamma} \psi_o \phi_{Qi} dx \quad (31)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial \alpha_i} = \int_{\Gamma} (h_o - H_o) \psi_o \phi_{\alpha i} dx + \int_{\Gamma} \int_T (h-H) \psi \phi_{\alpha i} dt dx \quad (32)$$

En los contornos de nivel fijo $\alpha \rightarrow \infty$ y las integrales (28) y (29) son indeterminadas. Para eliminar esta indeterminación basta sustituir en ella las ecuaciones (20) y (22), lo que conduce a

$$\frac{\partial J_h}{\partial H_i} = \int_{\Gamma} \int_T \mathbf{K} \cdot \nabla \psi \cdot \mathbf{n} \phi_{Hi} dt dx \quad (33)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial H_{oi}} = \int_{\Gamma} \mathbf{K} \cdot \nabla \psi_o \cdot \mathbf{n} \phi_{Hi} dx \quad (34)$$

Tanto las ecuaciones del estado adjunto como las del gradiente de J_h se resuelven empleando el método de los elementos finitos. Para las primeras se obtiene, en régimen transitorio,

$$\left(\mathbf{A} + \frac{\mathbf{D}}{\Delta t} \underline{\psi}^k \right) = -2\mathbf{r}^k + \frac{\mathbf{D}}{\Delta t} \underline{\psi}^{k+1} \quad (35)$$

y, en régimen estacionario,

$$\mathbf{A} \underline{\psi}_o = \mathbf{D} \psi(o) - 2\mathbf{r}_o \quad (36)$$

donde las componentes de \mathbf{r}^k y \mathbf{r}_o son

$$r_n^k = \sum_l \sum_m \sum_j [(h_m^{*j} - h_m^j) W_{m \bar{l} k} \xi_n(\mathbf{x}_l)] \quad (37)$$

$$r_{on} = \sum_m \sum_l [h_{om}^* - h_{orn}] U_{lm} \xi_n(\mathbf{x}_l) \quad (38)$$

donde W y U son componentes de la inversa de la matriz de covarianza de niveles (8), y $\xi_n(\mathbf{x}_l)$ es el valor de la función de forma del nudo \mathbf{x}_n en el punto de observación \mathbf{x}_l . Las matrices \mathbf{A} y \mathbf{D} en (35) y (36), tienen exactamente la misma forma que las de la ecuación de flujo, (4) y (5). Por tanto, se puede emplear la misma decomposición triangular para calcular los niveles y el estado adjunto.

Para el gradiente de J_h , la discretización de elementos finitos conduce a expresiones de la forma

$$\frac{\partial J_h}{\partial q_i} = - \sum_n \sum_k \psi_n^k \frac{A^e}{3} \phi_{qi} \frac{(\Delta t^k + \Delta t^{k+1})}{2} \quad (39)$$

(En el caso en que q sea independiente del tiempo) donde la primera sumatoria se extiende sobre todos los nudos n que pertenecen a elementos, e , contenidos en la i -ésima zona de q , A^e es el área del elemento e , y Δt^k es el incremento de tiempo del período k . Fórmulas análogas se emplean para el caso de q variable en el tiempo, y para los demás parámetros.

Estas ecuaciones se han incluido en un programa de ordenador que minimiza J empleando tres algoritmos de gradientes conjugados (Broyden, Fletcher-Reeves y Fletcher-Powell-Davidon). La magnitud del paso, variación de los parámetros en las direcciones dadas por los gradientes conjugados, se determina por el método de Newton. La experiencia acumulada en distintos problemas, tanto sintéticos como reales, no permite concluir que alguno de los métodos sea universalmente superior a los demás. De hecho, en algunos casos, ninguno de los métodos converge. Sin embargo, el cambio automático de un algoritmo a otro cuando el primero se detiene o disminuye el ritmo de convergencia, aumenta considerablemente la rapidez y asegura casi siempre la convergencia.

EJEMPLO

El algoritmo descrito en la sección anterior se ha ensayado en numerosos casos sintéticos y reales^{7, 9, 11, 13, 35, 36, 53}. Con el fin de discutir algunos de los aspectos del método propuesto, se presenta aquí un caso sintético. El dominio (figura 1) es un cuadrado de 6 km de lado, dividido en 9 zonas en las que la transmisividad es constante. Las condiciones de contorno son de caudal nulo en los lados superior y derecho, caudal fijo (aprox 250 m³/km. día) en el lado izquierdo y nivel fijo (100 m) en el inferior. En las dos franjas superiores de 1 km de ancho tiene lugar una recarga de 5 y 10 cm/año (.137.10⁻³ y .274.10⁻³ m³/m²/día). El coeficiente de almacenamiento es constante y vale 0.001.

Con estos datos y empleando una malla cuadrada de 49 nudos, que puede considerarse excesivamente gruesa para obtener resultados precisos pero que es adecuada a nuestros fines, se simula el sistema en régimen estacionario. Este sirvió como condición inicial para el transitorio que se crea al bombear los dos pozos interiores (figura 1) con caudales de 1000 m³/día. Los niveles calculados en los 18 puntos de observación en régimen estacionario y en transitorio (para $t=50, 200$ y 1000 días) se contaminaron con ruidos de desviación standard 0.01, 0.1 y 1 m, con lo que se obtuvieron conjuntos de datos de niveles "observados". En cuanto a la información previa de transmisividades, esta se obtuvo añadiendo un error, de distribución normal y desviación standard de 0.1, a los valores verdaderos del logaritmo de la transmisividad. Con estos datos se pasó el programa bajo diversas condiciones en cuanto al tipo de parámetro a estimar, niveles de ruido, etc. En lo que resta se resumen algunos de estos resultados.

En primer lugar discutimos el caso de estimación de transmisividades empleando sólo datos de niveles en régimen estacionario. Si estos son los obtenidos con ruidos de desviación 0.01 ó 0.1 m, las transmisividades calculadas se aproximan mucho a las

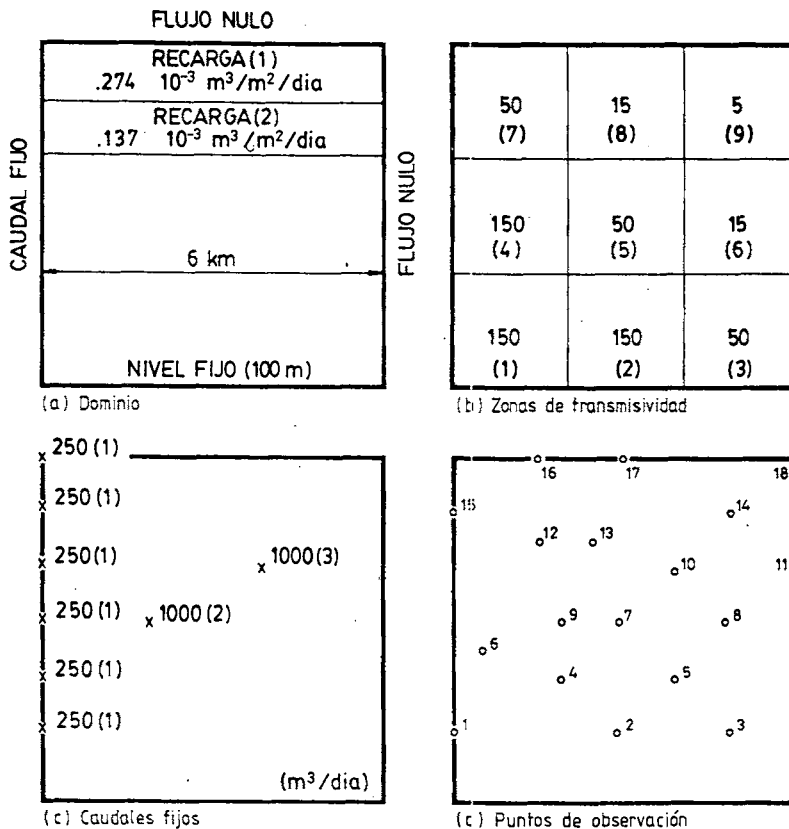


Figura 1. Descripción del ejemplo (Los números entre paréntesis representan número de zona).
 a. Dominio del problema y condiciones de contorno.
 b. Zonas de transmisividad y valores de la misma (en $\text{m}^2/\text{día}$).
 c. Caudales fijos.
 d. Puntos de observación.

verdaderas (errores inferiores al 1%) aunque la información previa sea pobre, ya que la buena calidad de los datos de niveles implica una ponderación baja de los de transmisividades. En casos reales, la calidad de la información previa es desconocida por lo que también hay que estimar los coeficientes de ponderación relativa, lo que se hace también maximizando la verosimilitud, o minimizando el criterio S (ecuación 11). La figura 2 muestra la variación de dicho criterio así como las de la suma de los cuadrados de los residuos de niveles y de los errores en las transmisividades. Obviamente, este último es la mejor medida de la calidad de la estimación, pero sólo puede plantearse en casos sintéticos como el que nos ocupa. Es, por tanto, alentador que el mínimo de los errores en transmisividades coincida casi exactamente con el mínimo de nuestra función objetivo, S. Nótese también que la suma de los cuadrados de los residuos, criterio empleado con frecuencia, conduce a errores mucho mayores en las transmisividades estimadas.

Obviamente la calidad de los resultados está condicionada a la de los datos. Sin embargo, cabría preguntarse hasta qué punto las piezas de información malas pueden afectar a las buenas. El segundo caso discutido aquí se refiere a la estimación conjunta de recarga superficial y transmisividad, empleando una información previa muy pobre para la primera. La tabla 1 resume los valores calculados de los parámetros, que

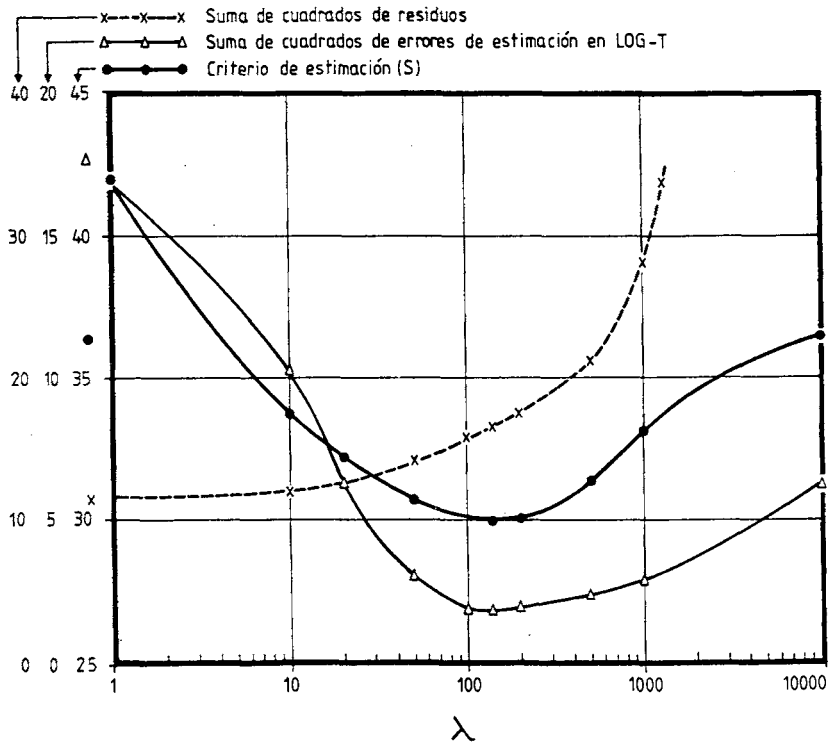


Figura 2. Variación, en función de la suma de los cuadrados de los residuos de niveles, suma de los cuadrados de los errores en log-transmisividad, y criterio de estimación de máxima verosimilitud (S). Nótese la coincidencia de los mínimos de estas dos últimas curvas.

Transmisividad (m ² /día)				
Zona	Verdadera	Inf. Previa	Calculda	Error*
1	150.	154.9	147.9	.006
2	150.	87.1	157.7	-.022
3	50.	30.9	48.9	.010
4	150.	168.4	152.1	-.006
5	50.	90.5	50.0	.000
6	15.	10.9	15.4	-.011
7	50.	60.1	50.8	-.007
8	15.	15.5	15.3	-.009
9	5.	4.5	5.1	-.009
Recarga (x10 ⁻⁴ m/día)				
1	1.37	2.4	1.37	0.003
2	2.74	4.0	2.80	0.060

* Error en los logaritmos para transmisividades y error aritmético para recarga.

Tabla 1. Valores de transmisividad y recarga obtenidos con datos de niveles en régimen estacionario.

pueden considerarse buenos. Lo más interesante, sin embargo, es la observación (figura 3) de que los valores optimos de λ_y y λ_q son muy pequeños. Especialmente el coeficiente λ_q de ponderación relativa entre información previa de recarga y niveles, que vale 0.0013, lo que indica que el criterio de máxima verosimilitud "reconoce" la mala calidad de los datos de recarga.

Dado que no es posible demostrar, con generalidad, la unicidad de la solución, de hecho pueden encontrarse contraejemplos con mínimos locales aislados, la comprobación de que la solución es única sólo puede hacerse empíricamente, resolviendo el

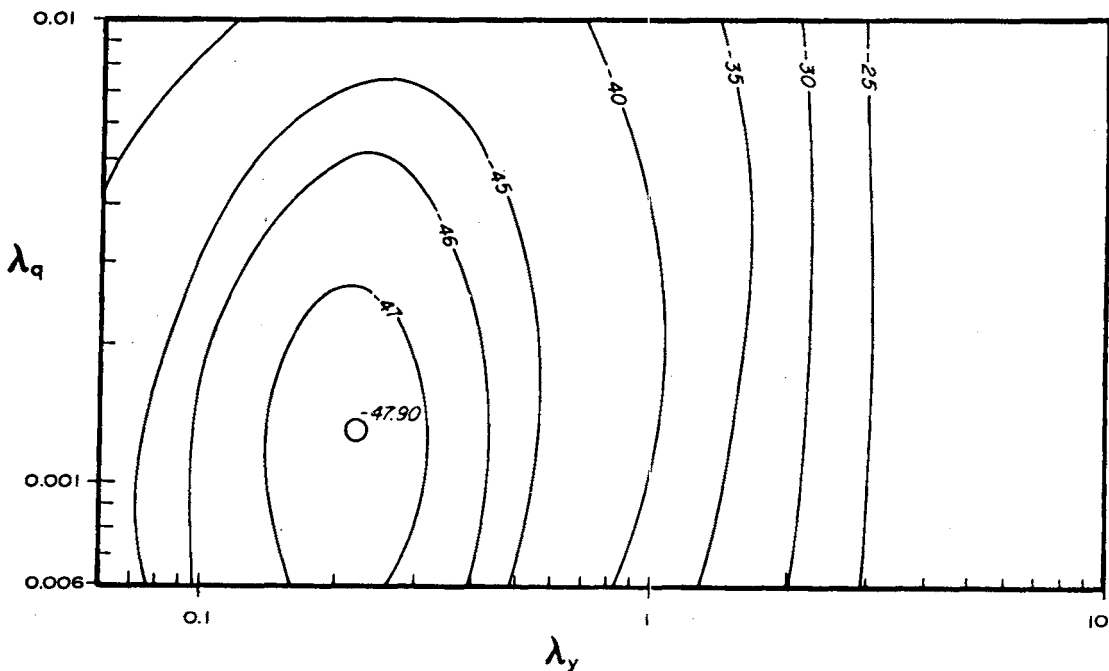


Figura 3. Curvas de nivel del criterio de estimación (S) en el plano de los coeficientes de ponderación relativa entre información previa y niveles, (log-transmisividades) y (recarga).

problema con distintos conjuntos de valores iniciales y observando si la solución es la misma en todos los casos. Esto, si bien no puede llevar a una afirmación rigurosa de la unicidad, sirve cuando menos para aumentar nuestra "confianza" en la solución. En los ejemplos analizados, el resultado final ha sido independiente de la solución inicial en la mayoría de los casos. En los únicos en que hubo dificultades, las diferencias pueden atribuirse a problemas de convergencia más que de no unicidad, y todos fueron resueltos mediante un reescalado lineal de las variables. La tabla 2 resume los resultados obtenidos en uno de estos, al estimar con datos transitorios (desviación standard 1 m), las transmisividades, recarga superficial y caudal y nivel en el contorno. Como puede verse, los resultados son francamente buenos.

	Zona	Verdadero	I. Previa	Inicial	Calculado
Loq-Verosimilitud, S	—	—	—	—	179.7
Suma de cuadrado de los residuos	—	—	—	$1.6 \cdot 10^5$	65.3
Función objetivo $J = J_h + \lambda_y J_y$	—	—	—	$1.6 \cdot 10^5$	74.2
Transmisividad (m ² /día)	1	150.	163.	163.	181.
	2	150.	113.	113.	115.
	3	50.	48.	48.	39.
	4	150.	204.	204.	167.
	5	50.	47.	47.	46.
	6	15.	10.	10.	14.
	7	50.	55.	55.	51.
	8	15.	13.	13.	15.
	9	5.	7.	7.	5.
Recarga ($\cdot 10^{-4}$ m/día)	1	1.37	—	1.37	1.07
	2	2.74	—	2.74	2.75
Nivel en contorno	1	1.00	—	0.50	0.998
Caudal en contorno	1	1.00	—	1.50	1.22

Tabla 2. Valores calculados de transmisividad, recarga y nivel y caudal en los contornos, con datos en régimen transitorio ($\sigma_h = 1$ m.), e información previa para transmisividades.

CONCLUSIONES

De la revisión de estado de arte en la estimación de parámetros en hidrología subterránea se deduce la tendencia a plantear el problema inverso en un marco estadístico, así como la necesidad de definir criterios de regularización para disminuir los efectos de inestabilidad.

Se ha propuesto un método que permite la estimación de transmisividades, coeficientes de almacenamiento y goteo, recarga y caudales y niveles en el contorno. El método consiste en la minimización de un funcional basado en la función de verosimilitud, que permite incluir no sólo los datos de niveles sino también la información previa sobre los valores de los parámetros del modelo, lo que conduce a problemas con solución estable en la mayoría de los casos. La minimización se realiza mediante la teoría del estado adjunto en conjunción con una combinación de métodos de gradiente conjugado. Para la solución de las ecuaciones del estado adjunto y para la integración de las del gradiente se ha empleado el método de los elementos finitos. El algoritmo resultante es relati-

vamente económico, ya que basta una simulación para el cálculo del gradiente, en comparación con los métodos tradicionales, basados en el jacobiano, que requieren un número de simulaciones igual al de parámetros a estimar.

El método, que se ha usado con éxito en varios casos reales, se ilustra con un ejemplo sintético, que permite demostrar las ventajas del método de máxima verosimilitud así como las posibilidades de estimar distintos tipos de parámetros, con o sin información previa, bajo diversas condiciones.

APENDICE A: Derivación de las ecuaciones del estado adjunto

Considerando el funcional J_h , definido por (17), su variación primera viene dada por

$$\begin{aligned} \partial J_h = & - \int_D \int_{D'} 2[h_o^*(\mathbf{x}') - h_o(\mathbf{x}')] U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \delta h_o(\mathbf{x}) d\mathbf{x}' d\mathbf{x} \\ & - \int_D \int_T \int_{D'} \int_{T'} 2[h^*(\mathbf{x}', t') - h(\mathbf{x}', t')] W(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t', t) \delta h(\mathbf{x}, t) dt' d\mathbf{x}' dt d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (41)$$

Las variaciones primeras de las ecuaciones (1) a (3), y de las correspondientes en régimen estacionario son

$$\nabla \cdot [\mathbf{K} \cdot \nabla(\delta h) + \delta \mathbf{K} \cdot \nabla h] + \delta q - \delta S_s \frac{\partial h}{\partial t} - S_s \frac{\partial(\delta h)}{\partial t} = 0 \quad (A2)$$

$$\delta h(\mathbf{x}, 0) = \delta h_o(\mathbf{x}) \quad (A3)$$

$$[\mathbf{K} \cdot \nabla(\delta h) + \delta \mathbf{K} \cdot \nabla h] \cdot \mathbf{n} = -\delta \alpha(h-H) - \alpha(\delta h - \delta H) + \delta Q \quad (A4)$$

$$\nabla \cdot [\mathbf{K} \cdot \nabla(\delta h_o) + \delta \mathbf{K} \cdot \nabla H_o] + \delta q_o = 0 \quad (A5)$$

$$[\mathbf{K} \cdot \nabla(\delta h_o) + \delta \mathbf{K} \cdot \nabla H_o] \cdot \mathbf{n} = -\delta \alpha(h_o - H_o) - \alpha(\delta h_o - \delta H_o) + \delta Q_o \quad (A6)$$

Sean $\psi(\mathbf{x}, t)$ y $\psi_o(\mathbf{x})$ funciones diferenciables que llamaremos estados adjuntos en régimen transitorio y estacionario, respectivamente. Multiplicando (A2) por ψ e integrando sobre D y T , multiplicando (A5) por ψ_o e integrando sobre D , sumando estas dos expresiones, aplicando la primera identidad de Green y sustituyendo (A4) y (A6) en las integrales resultantes, se llega a una expresión que sustraída de (A1) y reorganizada conduce a

$$\begin{aligned} \partial J_h = & \int_{\Gamma} [\delta \alpha(h_o - H_o) - \alpha \delta H_o - \delta Q_o] \psi_o d\mathbf{x} + \int_D (\nabla \psi_o \cdot \partial \mathbf{K} \cdot \nabla h_o - \psi_o \delta q_o) d\mathbf{x} \\ & + \int_{\Gamma} \int_T [\delta \alpha(h-H) - \alpha \delta H - \delta Q] \psi dt d\mathbf{x} + \int_D \int_T [\nabla \psi \cdot \delta \mathbf{K} \cdot \nabla h \\ & - (\delta q - \delta S_s \frac{\partial h}{\partial t}) \psi] dt d\mathbf{x} + F \end{aligned} \quad (A7)$$

donde F es

$$\begin{aligned}
 F = & \int_{\Gamma} \alpha \psi_0 \delta h_0 \, dx + \int_D \nabla \psi_0 \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla (\delta h_0) \, dx + \int_{\Gamma} \int_T \alpha \psi \delta h \, dt \, dx \\
 & - \int_D \int_T [\nabla \psi \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla (\delta h) + \psi S_s \frac{\partial (\delta h)}{\partial t}] \, dt \, dx - 2 \int_D \int_{D'} (h_n^* - h_0) U \delta h_0 \, dx' \, dx \\
 & - 2 \int_D \int_T \int_{D'} \int_{T'} (h^* - h) W \delta h \, dt' \, dx' \, dt \, dx \quad (A8)
 \end{aligned}$$

Los estados adjuntos, ψ y ψ_0 se definen precisamente de forma que $F=0$. Para ello se vuelve a aplicar la primera identidad de Green al segundo integrando y al primer término del cuarto, y se integra por partes el segundo término del mismo integrando. Eligiendo $\psi(\tau) = 0$, siendo τ el extremo superior del intervalo de integración en el tiempo, y notando que $\delta h(0) = \delta h_0$ y que las variaciones δh y δh_0 son arbitrarias es evidente que los integrandos de cada una de las integrales sobre $D, \Gamma, D \times T$ y $\Gamma \times T$ deben anularse independientemente para que F sea cero. Esto resulta de forma inmediata en las ecuaciones del estado adjunto (18) - (22).

APENDICE B: Gradiente de J_h

Para calcular las derivadas de J_h respecto a los parámetros escribiremos este funcional de la forma

$$J_h = \int_D g(\mathbf{x}) \, dx \quad (B1)$$

La variación primera de (B1) respecto a los parámetros es

$$\begin{aligned}
 \delta J_h = & \int_{\Gamma} \left(\frac{\partial g}{\partial \alpha} \delta \alpha + \frac{\partial g}{\partial H_0} \delta H_0 + \frac{\partial g}{\partial H} \delta H + \frac{\partial g}{\partial Q} \delta Q + \frac{\partial g}{\partial Q_0} \delta Q_0 \right) \, dx \\
 & + \int_D \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{K}} \cdot \delta \mathbf{K} + \frac{\partial g}{\partial S_s} \delta S_s + \frac{\partial g}{\partial q} \delta q + \frac{\partial g}{\partial q_0} \delta q_0 \right) \, dx \quad (B2)
 \end{aligned}$$

Identificando (B2) y (A7) término a término se llega a las derivadas variacionales

$$\left. \frac{\partial g}{\partial \alpha} \right| = \psi_0 (h_0 - H_0) + \int_{\Gamma} \psi (h - H) \, dt \quad (B3)$$

$$\left. \frac{\partial g}{\partial H_0} \right| = -\alpha \psi_0 \quad (B4)$$

$$\left. \frac{\partial g}{\partial H} \right| = -\alpha \int_T \psi \, dt \quad (B5)$$

y expresiones similares para $\frac{\partial g}{\partial Q}$, $\frac{\partial g}{\partial Q_0}$, $\frac{\partial g}{\partial q}$, $\frac{\partial g}{\partial q_0}$, $\frac{\partial g}{\partial S_s}$ y $\frac{\partial g}{\partial \mathbf{K}}$. Para obtener las

derivadas de J_h respecto a los parámetros del modelo, basta discretizar cada uno de los parámetros hidráulicos (ecuación 23) e integrar sobre D , lo que conduce a las ecuaciones (24)-(32).

REFERENCIAS

1. H. Allison, Inverse Unstable Problems and Some of Their Applications. *Math Scientist*, **4**, pp 9-30 (1979).
2. Y. Baram, y N. R. Sandell, An Information Theoretic Approach to Dynamical Systems Modeling and Identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. **AC-23**, N° 1, pp. 61-66 (1978).
3. G. Bastin y C. Duque, Modelling of Steady State Groundwater Flow Systems: Deterministic and Stochastic Approaches. Artículo presentado al *LASTED International symposium on Modelling, Identification and Control* Davos, Switzerland. (1981).
4. A. Benbarka y D.R. Davis, Aquifer Test Design and Error Analysis. (enviado para publicación). (1986).
5. R.R. Bennet y R.R. Meyer, *Geology and Groundwater Resources of the Baltimore Area*. Maryland Dept. Geology, Mines and Water Resources Bul. **4**, pp. 573. (1952).
6. A.A. Binsari, Statistical Analyse and Stochastic Modelling of the Cortaro Aquiferin Southern Arizona. *Ph. D. Dissertation*, Dept. of Hydrology and Water Res. Univ. of Arizona, Tucson. (1980).
7. G. Blankenangel, Inverse Modelling of the San Luis Rio Potosi Aquifer, Mexico. *M. Sc. Thesis* Dept. of Hydrology and Water Resources. University of Arizona, Tucson. Arizona, (1985).
8. K.V. Bury, *Statistical Models in Applied Science*, John Wiley and Sons, New York, pp. 625, (1975).
9. J. Carrera, Estimation of Aquifer Parameters under Transient and Steady-State Conditions. *Ph. D. Dissertation*, Dept. of Hydrology, Univ. of Arizona, Tucson. Arizona, (1984).
10. J. Carrera y S.P. Neuman, Estimation of Aquifer Parameters under Transient and Steady-State Conditions. I Maximun Likelihood Method Incorporating Prio Information. *Water Resour. Res* Vol. **22**, n° 2, (1986).
11. J. Carrera y S.P. Neuman, Estimation of Aquifer Parameters under Steady-State an Transient Conditions: II. Uniqueness, stability, and solution algorithms. *Water Resour. Res.* Vol. **22**, n° 2, (1986).
12. J. Carrera y S.P. Neuman, Estimation of Aquifer Parameters under Steady-State and Transient Conditions: III. Applications. *Water Resour. Res.* Vol. **22**, n° 2, (1986).
13. J. Carrera, M. Kuhn, H. Bentley, J. Fabryka-Martin y J. Swanick, Transient inverse modeling of saline pond leakage. Publicado en los *Proccedings del Simposium on Practical Applications of Ground Water Models*, Columbus, Ohio, (1984).
14. S. Chang y W.W. Yeh, A proposed algorithm for the solution of the large-scale inverse problem in groundwater. *Water Resour. Res.* Vol. **12**, n° 3, pp. 365-374 (1976).
15. G. Chavent, Analyse fonctionelle et identification de coefficients repartis dans les equations aux derivees partielles. *These de docteur en sciences*, Univ. de París, París VI, (1971).
16. G. Chavent, History matching by use of optimal control theory. *Soc. Petrol. Eng. Journal*, Vol. **15**, n° 1 pp. 74-86, (1975).
17. G. Chavent, Local stability of the output L. S. parameter estimation technique. *Rapports de recherche* n° 136. Institut national de recherche en Informatique et en Automatique Rocquencourt, France, (1982).
18. W.H. Chen, G.R. Gavalas, J.H. Seinfeld y M.L. Wasserman, A new algorithm for automatic history matching. *Soc. Pet. Eng. Jour.* pp. 593-608. *Trans. AIME*, Vol. **257**, (1979).
19. P.M. Clifton, Statistical Inverse Modelling and Geostatistical Analysis of the Avra Valley Aquifer, *M. Sc. Thesis*, Dept. Hydrol. and Water Resour., Univ. of Arizona, Tucson, (1981).
20. P.M. Clifton y S.P. Neuman, Effects of Kriging and Inverse Modelling on Conditional Simulation of the Avra Valley Aquifer in Southern Arizona. *Water Resour. Res.*, Vol. **18**, n° 4, pp. 1215-1234, (1982).
21. R.L. Cooley, A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady state groundwater flow. 1 Theory and numerical properties. *Water Resour. Res.* Vol. **13**, n° 2, pp. 318-324, (1977).

22. R.L. Cooley, A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady state groundwater flow. 2. Application of statistical analysis. *Water Resour. Res.* Vol. **15**, n.º 3, pp. 603-617, (1979).
23. R.L. Cooley, Incorporation of prior information on parameters into nonlinear regression groundwater flow models, 1, Theory. *Water Resour. Res.*, Vol. **18**, n.º 4, pp 965-976 (1982).
24. R.L. Cooley, Incorporation of prior information on parameters into nonlinear regression groundwater flow models, 2, Applications. *Water Resour. Res.*, Vol. **19**, n.º 3, pp 662-676 (1983).
25. R.L. Cooley, A comparison of several methods of solving nonlinear regression groundwater flow problems. *Water Resour. Res.*, Vol. **21**, n.º 10, pp. 1525 - 1538, (1985).
26. S.N. Davis, Porosity and permeability of natural materials. En *Flow Through Porous Media*, por J.M. De Wiest (Ed.). Academic Press, (1969).
27. N. Distéfano y A. Rath, An identification approach to subsurface hydrological systems. *Water Resour. Res.*, Vol. **11**, n.º 6, pp. 1005-1012, (1975).
28. Y. Emsellem, y G. de Marsily, An automatic solution for the inverse problem. *Water Resour. Res.*, Vol. **7**, n.º 5, pp. 1264-1283, (1971).
29. P.J. Fennessy y S.P. Neuman, Geostatistical analysis of aquifer tests and water level data from the Madrid Basin, Spain. *Proc. de la reunión anual número 26 de Arizona-Nevada Academy of Science*, Tempe, Arizona, (1982).
30. E.O. Frind y G.F. Pinder, Galerkin solution of the inverse problem for aquifer transmissivity. *Water Resour. Res.* Vol. **9**, n.º 5, pp. 1397-1410, (1973).
31. G.R. Galavas, P.C. Shah y J.H. Seinfeld, Reservoir history matching by Bayesian estimation. *Soc. Pet. Eng. Jour.*, pp. 337-350, *Trans. AIME*, Vol. **261**, (1976).
32. F.A. Graybill *Theory and application of the linear model*. Duxbury Press. North Scituate, Massachusetts (1976).
33. J. Hadamard, Sur les problemes aux derivees partielles et leur signification physique. *Bull. Univ. Princeton*. Vol. **13**, pp. 49-52, (1902).
34. J. Hadamard, *Le probleme de Cauchy et les equations aux derivees partielles lineaires hyperboliques*. Hermann, París, (1932).
35. Hydro Geo Chem, Numerical simulation of the Pajarita well field. preparado para el *Bureau of Indian Affairs*, (1983).
36. Hydro Geo Chem, Hydrologic investigation of existing pond leakage at Jim Bridge Power Plant. Preparado para *Pacific Power and Light Co*, (1984).
37. S. Irmay, Piezometric determination of inhomogeneous hydraulic conductivity. *Water Resources Research*, Vol. **16**, n.º 4, pp. 691-694, (1980).
38. P. Jacquard y C. Jain, Permeability distribution from field pressure data. *Soc. of Pet. Eng. Jour.* pp. 281-294, *Trans. AIME*, Vol. **234**, (1965).
39. E. Jacobson, A statistical parameter estimation method using principal component analysis and application to Avra Valley in Southern Arizona. *Ph. D. Dissertation*, University of Arizona, Tucson, Arizona. (En preparación), (1985).
40. H.O. Jahns, A rapid method for obtaining a two-dimensional reservoir description from well pressure response data. *Soc. of Pet. Eng. Jour.*, pp. 315-327, (1966).
41. D. Kleinecke, Use of linear programming for estimating geohydrologic parameters of groundwater basins. *Water Resour. Res.*, Vol. **7**, n.º 2, pp. 367-374, (1971).
42. A. Korganoff, Sur la resolution de problemes "inverses" en hydrogeologie. *Bulletin of the International Association of Scientific Hydrology*, XV, **2**, pp. 67-78, (1970).
43. J. Law, A statistical approach to the interstitial heterogeneity of sand reservoirs: *Trans. AIME*, Vol. **155**, pp. 202-222, (1944).
44. A.G. Margevicius, Identifiability issues in groundwater parameter estimation. *M.Sc. Thesis*. Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, (1983).
45. R.W. Nelson, In-place measurement of permeability in heterogeneous media. 1. Theory of a proposed method. *Journal of Geophysical Research*, Vol. **65**, n.º 6, pp. 1753-1760, (1960).
46. R.W. Nelson, In place measurement of permeability in heterogeneous media. 2. Experimental and computational considerations. *Journal Geophysical Research*, Vol. **66**, pp. 2469-2478, (1961).
47. R.W. Nelson, Conditions for determining areal permeability distributions by calculation. *Soc. Pet. Eng. Jour.*, pp. 223-224, (1962).

48. S.P. Neuman, Calibration of distributed parameter groundwater flow models viewed as a multiple-objective decision process under uncertainty. *Water Resour. Res.*, Vol. **9**, n.º 4, pp. 1006-1021, (1973).
49. S.P. Neuman, A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology. 3. Improved solution method and added perspective. *Water Resour. Res.*, Vol. **16**, n.º 2, pp. 331-346, (1980).
50. S.P. Neuman, Adjoint-state finite element equations for parameter estimation. *Finite elements in water resources*. Proc. de la tercera conferencia internacional sobre elementos finitos en recursos de agua (Ed. por S. W. Wang, C.V. Alonso, C.A. Brebbia, W.G. Gray y G.F. Pinder). University of Mississippi, University, Mississippi, (1980).
51. S.P. Neuman, The inverse problem of groundwater hydrology. Proc. de IBM Int., *Seminar on groundwater hydrology and modelling*, Venecia, Italia, pp. 210-250, (1976).
52. S.P. Neuman, Statistical Characterization of aquifer heterogeneities: An overview. *In recent trends in Hydrogeology* edited by T.N. Narasimham. G.S.A. Special Paper 189, pp. 81-102, (1982).
53. S.P. Neuman y J. Carrera, Maximum likelihood adjoint state finite element estimation of groundwater parameters under steady and nonsteady state conditions. *Applied Mathematics and Computation: Modelling de Environment*, Vol. **17**, pp. 405 - 432, (1985).
54. S.P. Neuman y S. Yakowitz, A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology: 1. Theory *Water Resour. Res.* Vol. **15**, n.º 4, pp. 845-860 (1979).
55. S. Scarascia y G.S. Ponzini, An approximate solution for the inverse problem in hydraulics. *L'Energica Elettrica*, Vol. **49**, n.º 8, (1971).
56. R.W. Stallman, Numerical analysis of regional water levels to define aquifer hydrology. *Transac. of American geophysical Union*, Vol. **37**, n.º 4, pp. 451-460, (1956).
57. H. Theil, On the use of incomplete prior information in regression analysis. *Am. Stat. Assoc. Journal*, Vol. **58**, n.º 302, pp. 401-414, (1963).
58. A.N. Tihonov, Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. *Soviet Mathematic Doklady*, Vol. **4**, pp. 1035-1039, (1963).
59. A.N. Tihonov, Regularization of incorrectly posed problems. *Soviet Mathematic Doklady*, Vol. **4**, pp. 1624-1627, (1963).
60. L.R. Townley, Numerical models of groundwater flow: Prediction and parameter estimation in the presence of uncertainty. *Ph. D. Dissertations*, Massachusetts Institute of Technology, (1983).
61. J. Wilson, P. Kitanidis y M. Dettinger, State and parameter estimation in groundwater models. En *Applications of Kalman filter to hydrology, Hydraulics and Water Resources*. Chao-Lin Chiu, editor. Dept. of Civil Engineering, Univ. of Pittsburgh (1978).
62. J.L. Wilson y M. Dettinger, Steady state vs transient parameter estimation. *Artículo presentado a la conferencia de ASCE sobre "Verification of mathematical and physical models in hydraulics engineering"*. Univ. of Maryland, (1978).
63. S. Yakowitz y L. Duckstein, Instability in aquifer identification: Theory and case study. *Water Resources Research*, Vol. **16**, n.º 6, pp. 1045-1064, (1980).
64. W.W. Yeh y G.W. Tauxe, Quasilinearization and the identification of aquifer parameters. *Water Resour. Res.* Vol. **7**, n.º 2, pp. 375-381, (1971).
65. W.W. Yeh y Y.S. Yoon, Aquifer parameter identification with optimum dimension in parameterization. *Water Resources Research*, Vol. **17**, n.º 3, pp. 664-672, (1981).
66. W.W. Yeh, Y.S. Yoon y K.S. Lee, Aquifer parameter identification with kriging and optimum parameterization. *Water Resour. Res.* Vol. **19**, n.º 1, pp. 225-233, (1983).