

03094



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MÉXICO

Posgrado en Ciencias de la Tierra
Instituto de Geofísica

TÉCNICAS DE INVERSION PARA EL CALCULO DE LA
TRANSMISIVIDAD HIDRÁULICA EN UN ACUÍFERO
CONFINADO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE :

DOCTORA EN CIENCIAS (MODELACIÓN MATEMÁTICA Y
COMPUTACIONAL DE SISTEMAS TERRESTRES)

P R E S E N T A

ROSA MARGARITA ALVAREZ GONZALEZ

CIUDAD UNIVERSITARIA, MÉXICO, D.F. 2004



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Para el desarrollo y conclusión de esta importante etapa de mi formación académica, tuve invaluable apoyo entre los que destaca el haber contado a nivel institucional con una Beca del Programa DGEP-UNAM y un complemento otorgado por CONACYT vía el Proyecto de Investigación 35458-A.

También me es grato hacer un reconocimiento a quienes, desde la perspectiva de sus disciplinas, cooperaron con sus conocimientos, observaciones y sugerencias, tanto a mi enriquecimiento personal como al de la investigación cuyos resultados aquí se reportan. Particularmente a los Doctores: Susana Gómez, Álvaro Aldama, Leticia Flores, Fernando Brambila, Ángel Pérez, Leopoldo Rodarte y Carlos Cruickshank.

Para José

Contenido

1	Introducción	3
1.1	Presentación general y objetivos	3
1.2	Metodología y esquema de desarrollo	4
2	Formulación del Modelo de Flujo y Solución del Problema Directo Asociado	8
2.1	Modelación del acuífero	8
2.1.1	Descripción geofísica, parámetros y leyes constitutivas .	9
2.1.2	Construcción del modelo matemático	13
2.2	Problema Directo	18
2.2.1	Solución Numérica del Problema Directo	21
3	El Problema Inverso de Identificación de Parámetros	27
3.1	Métodos de regularización	36
3.1.1	Regularización de Tikhonov	38
3.1.2	Regularización vía Optimización Multiescala	53
4	Métodos de Optimización para Estimar la Transmisividad Hidráulica	61
4.1	El cálculo de mínimos locales	62
4.1.1	Método de Newton	62
4.1.2	Newton Truncado con gradientes conjugados	72
5	Implementación, ejemplos y resultados computacionales	80
5.1	Ejemplo sintético	82
5.1.1	Estudio comparativo entre la regularización de Tikhonov (L-curva y PDR) y el método de optimización multiescala	86

5.2	Acuífero de Ariguanabo	87
5.2.1	Subcuenca Aeropuerto	88
5.2.2	Ariguanabo completo. Caso Real	94
6	Conclusiones, comentarios y referencias	101

Capítulo 1

Introducción

1.1 Presentación general y objetivos

El agua como recurso estratégico es ya uno de los grandes temas a nivel internacional y nuestro país no es ajeno a este fenómeno, razón por la cual resulta indispensable la producción de investigaciones y desarrollos tecnológicos que ayuden al establecimiento de políticas racionales para la explotación del vital recurso hídrico.

En particular, el uso del agua subterránea, tanto para el consumo doméstico como para actividades industriales y agrícolas ocupa un alto porcentaje - alrededor del 70% en el caso de México - del volumen total que se utiliza de dicho recurso, provocando, entre otras cosas, la sobreexplotación de dichas reservas naturales. Con respecto a esto último se hace imprescindible generar políticas de administración que controlen el nivel de agua en los sistemas subterráneos en explotación, para impedir que se deterioren de manera irreversible las propiedades geológicas del medio.

Nuestra investigación se ubica en el marco general de las Ciencias de la Tierra, y más específicamente en el ámbito de la Modelación de Sistemas Terrestres, donde las matemáticas constituyen una herramienta fundamental para la construcción de modelos. El trabajo de tesis se orienta hacia un aspecto fundamental del proceso de administración óptima: la caracterización

de acuíferos, ejercicio indispensable para la modelación del flujo, que nos proporciona la información sobre la cantidad de agua disponible en un sistema en explotación, lo que convierte a dicho modelo de flujo en el eje central de cualquier política de utilización racional del agua.

Por otra parte, nuestro estudio resulta perfectamente enmarcable en la teoría general de sistemas abiertos, donde tenemos un cuerpo o sistema - el acuífero - hecho de partes materiales más una serie de procesos tanto internos como de interacción con el medio que constituye su entorno. De ahí pues, su vocación multidisciplinaria en la que intervienen disciplinas como la Física, la Geología, la Hidrología, las Matemáticas, el Cómputo Científico, más estudios ambientales y económicos. Y si bien es éste el marco específico en el que nuestro estudio adquiere su justa dimensión, nuestro aporte, desde el ámbito de las Matemáticas Aplicadas y el Cómputo Científico se puede resumir en los siguientes

Objetivos:

- Desarrollo y/o adaptación de algoritmos para la estimación automática eficiente de los parámetros de transmisividad hidráulica y del coeficiente de almacenamiento que caracterizan al medio poroso del acuífero, y que son indispensables para poder modelar matemáticamente el flujo de agua en un acuífero.
- Implementación computacional de las propuestas del punto anterior y su uso para la estimación de la transmisividad hidráulica en el acuífero cubano de Ariguanabo.
- Estudio comparativo y de validación de resultados a través, primero, de la generación de problemas sintéticos donde se conoce la solución, para pasar después a la solución de un caso real.

1.2 Metodología y esquema de desarrollo

Con base en nuestra experiencia previa, y buscando cumplir satisfactoriamente los objetivos que nos hemos planteado, adoptamos una metodología cuyos puntos centrales enumeramos a continuación:

- Descripción, en líneas generales, de la construcción del modelo

$$M(p) : \frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h}{\partial y} \right) - S \frac{\partial h}{\partial t} = q,$$

que representa a un acuífero confinado, donde p simboliza uno o varios de los parámetros o coeficientes del modelo. A continuación, se escribe $M(p)$ en términos operacionales, como

$$L(h) = q, \quad \text{donde } L \text{ es el operador}$$

$$L \equiv \left[T \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} - S \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

y se presenta una estrategia numérica para resolver $L(h) = q$ suponiendo conocidos T y S , lo que se conoce como el problema directo.

- A partir de lo anterior, y dado que en la práctica lo que usualmente se tiene es una \tilde{h} observada experimentalmente, se plantea el cálculo del parámetro \tilde{T} de transmisividad hidráulica que permita reproducir la \tilde{h} observada, lo que se conoce como el problema inverso. Una vez calculada la \tilde{T} , se calcula el coeficiente de almacenamiento \tilde{S} usando la misma metodología.
- El esquema general adoptado por nosotros para el cálculo de \tilde{T} puede resumirse como sigue:
 1. Se da una estimación inicial T_0 de \tilde{T} y se resuelve el problema directo con esta T_0 para obtener una h_0 calculada.
 2. Si $h_0 = \tilde{h}$, se concluye el proceso, si no, a partir de T_0 se genera una sucesión $\{T_k\}$, $k = 1, 2, \dots$, donde T_{k+1} es una corrección de T_k , en el sentido de que se garantice la propiedad de convergencia:

$$T_k \rightarrow \tilde{T}, \quad k \rightarrow \infty.$$

Ahora bien, debido a los errores que se cometen, tanto de aproximación en la modelación, como los de tipo numérico que aparecen al resolver la ecuación de flujo, y los ya mencionados de tipo experimental contenidos

en \tilde{h} , es natural esperar que no exista una \tilde{T} que permita reproducir de forma exacta la \tilde{h} observada, por lo que es común estimar \tilde{T} como la solución, que llamaremos T^* , de un problema de optimización del tipo

$$\min_T F(T), \quad F(T) = \|h_k(T) - \tilde{h}\|^2 \quad (1.1)$$

donde $h_k(T)$ es la solución del problema directo, obtenida al resolverlo usando la aproximación T_k .

Resulta importante observar que el problema inverso - esto es, la estimación de \tilde{T} a partir de \tilde{h} -, pertenece a la clase de los problemas mal planteados a la Hadamard (cuestión que será aclarada en su momento), lo que en particular se manifiesta en una alta inestabilidad de la solución \tilde{T} con respecto a pequeñas variaciones en los datos \tilde{h} , situación que es heredada por el problema de optimización (1.1), lo que obliga al uso de estrategias - conocidas genéricamente como de regularización -, que permitan el cálculo estable de T^* a pesar del mal planteamiento. Además, puesto que cada iteración requerirá resolver el problema directo más de una vez, resulta vital disponer de una forma eficiente para la resolución de la ecuación diferencial. El tratamiento de estas cuestiones representa el núcleo de nuestro trabajo y es aquí donde haremos algunas propuestas de tipo algorítmico, cuya validación computacional se hará para casos sintéticos y reales.

- Aplicación de los desarrollos realizados a:
 1. La resolución de un problema de prueba o sintético.
 2. La estimación de la transmisividad hidráulica para el caso de datos reales con errores de medición, en el acuífero cubano de Ariguanabo.

En este rubro nos planteamos el diseño de experimentos adecuados, para comparar diferentes técnicas de optimización, en cuanto a su eficiencia y precisión en los resultados. También se incluye el uso de dos estrategias de regularización: Tikhonov y Optimización Multiescala, comparando resultados y estudiando la aparición o no del **efecto convexificador** que nos da solución única en cada caso, punto muy importante de nuestro trabajo.

Una vez hecha la calibración o estimación de la transmisividad, en el caso del acuífero cubano, se propone validar dichos resultados haciendo comparaciones, que se detallan en el Capítulo 5, con observaciones de la altura piezométrica en periodos de tiempo futuros no usados en el proceso de estimación de T .

El contenido antes descrito aparece de la siguiente manera: En el **Capítulo 2** se presenta la construcción del modelo de flujo de aguas subterráneas, para un acuífero confinado, usando ecuaciones de balance y leyes constitutivas propias del fenómeno geofísico en estudio. Una vez obtenida la formulación de dicho proceso se describe la metodología usada para resolver la ecuación diferencial o problema directo, para T y S conocidas. En el **Capítulo 3** se plantea el **problema inverso** de estimación de parámetros y se discute su característica de **mal planteado**, problema central hacia el que está enfocado este trabajo de investigación. Se recogen los resultados principales referentes a cómo enfrentar este problema para el caso lineal y su posible aplicación a casos no lineales como el que nos ocupa, llevando a cabo un estudio de los métodos de regularización de Tikhonov y de Optimización Multiescala. También en este capítulo se proponen algunas variantes para la estimación del parámetro de regularización en el caso del método de Tikhonov. Dado que para cualquiera de los dos métodos de regularización estudiados se hace necesaria la resolución de problemas de optimización del tipo de mínimos cuadrados no lineales, con restricciones de acotación, en el **Capítulo 4** estudiamos los métodos más importantes de optimización, y precisamos las características de las implementaciones computacionales correspondientes utilizadas en el proceso de experimentación numérica de la tesis. Para finalizar, el **Capítulo 5** comprende el diseño de experimentos, resultados numéricos para cada caso y validación de resultados para el acuífero cubano de Ariguanabo.

Capítulo 2

Formulación del Modelo de Flujo y Solución del Problema Directo Asociado

2.1 Modelación del acuífero

Como hemos dicho, estamos interesados de manera especial en aspectos relacionados con el diseño de estrategias para el aprovechamiento óptimo del agua contenida en un acuífero, por lo que resulta importante profundizar en su conocimiento, cosa que haremos desde la perspectiva de las ciencias de la tierra, las matemáticas y el cómputo científico.

En este sentido, nos proponemos de entrada, partiendo de datos geofísicos relevantes (tipo de matriz sólida, porosidad, etc.) y de conceptos y resultados de la Física de Medios Continuos y el Análisis Funcional, construir un modelo matemático que represente el flujo en un acuífero confinado. Por lo que respecta a la presentación, seguiremos el enfoque conceptual y metodológico expuesto en [2, 6, 7].

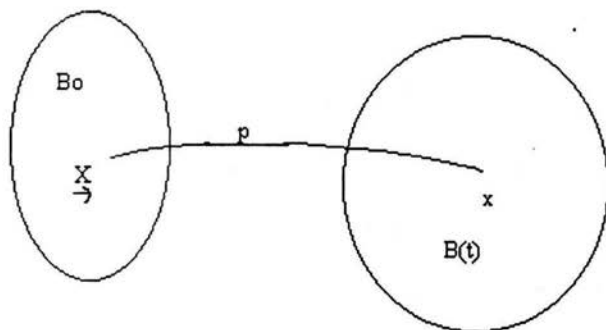


Figura 2.1: Representación del cambio de posición de una partícula en un sistema físico dinámico

2.1.1 Descripción geofísica, parámetros y leyes constitutivas

Partiremos de un sistema de partículas o cuerpo, al que simbolizaremos por $B(t)$, donde t representa el tiempo, dado que supondremos que B es un sistema dinámico, esto es, que evoluciona o cambia con el tiempo (**Figura 2.1**). Introduciremos ahora algunas notaciones:

- $\partial B(t)$ frontera de $B(t)$
- $\underline{\chi}$ partícula de B en el tiempo inicial. También se le conoce como coordenada material.
- \underline{x} posición de la partícula $\underline{\chi}$ en el tiempo t ($\underline{x} = \underline{p}(\underline{\chi}, t)$).

Existe un conjunto de propiedades del sistema $B(t)$, importantes para nuestro estudio, que se conocen como propiedades intensivas y extensivas.

- **Propiedades intensivas:** Son funciones de \underline{x} y de t .

Por ejemplo:

$$\underline{v}(\underline{x}, t) : \text{velocidad}$$

$\rho(\underline{x}, t)$: densidad

$\epsilon(\underline{x}, t)$: porosidad

$c(\underline{x}, t)$: concentración

• **Propiedades extensivas:** Se representan como la integral de una propiedad intensiva. A continuación escribimos algunas:

Masa de un fluido libre :

$$M_l(t) = \int_{B(t)} \rho(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

Masa de un fluido en medio poroso saturado :

$$M_p(t) = \int_{B(t)} \rho(\underline{x}, t) \cdot \epsilon(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

Volumen de poros en un sólido :

$$v_p(t) = \int_{B(t)} \epsilon(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

Volumen de un fluido :

$$V(t) = \int_{B(t)} d\underline{x}$$

• **Representación Lagrangiana y Euleriana** de una propiedad intensiva:

$$\begin{aligned} \phi(\underline{\chi}, t) &\longrightarrow \text{Lagrangiana} \\ \psi(\underline{x}, t) &\longrightarrow \text{Euleriana} \end{aligned}$$

Existe una correspondencia entre ambas que es

$$\phi(\underline{x}, t) \equiv \psi(\underline{x}, t) = \psi(\underline{p}(\underline{x}, t), t)$$

- **Derivada material** de una propiedad intensiva:

Si tenemos la representación Lagrangiana de dicha propiedad, entonces la derivada material es

$$\frac{\partial \phi(\underline{x}, t)}{\partial t}$$

También se puede obtener la derivada material en su representación Euleriana. Veamos:

Como $\phi(\underline{x}, t) = \psi(\underline{p}(\underline{x}, t), t)$, resulta que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\underline{x}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial \psi(\underline{p}(\underline{x}, t), t)}{\partial t} + \sum \frac{\partial \psi(\underline{p}(\underline{x}, t))}{\partial x_i} \frac{\partial p_i(\underline{x}, t)}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial \psi(\underline{x}, t)}{\partial t} + \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \nabla \psi(\underline{x}, t) \end{aligned}$$

quedando como expresión Euleriana de la derivada material

$$\frac{D\psi}{Dt} \equiv \frac{\partial \psi(\underline{x}, t)}{\partial t} + \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \nabla \psi(\underline{x}, t)$$

- **Ecuaciones de balance global y local**

La forma general de la ley de balance global, para una propiedad intensiva ψ , es

$$\frac{dE(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int \rho \psi \, d\underline{x} = \int_{B(t)} \rho g \, d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \quad (2.1)$$

donde $E(t)$ es la propiedad extensiva correspondiente, dada como $E(t) = \int \rho \psi \, d\underline{x}$, y

ψ : puede ser un escalar, un vector o un tensor, cuyos valores cambian en el espacio y en el tiempo.

$\rho\psi$: es una densidad, lo que en términos físicos significa que debe ser definida por unidad de volumen en $B(t)$.

$\underline{\tau}$: representa el flujo de $\rho\psi$ por la superficie o frontera $\partial B(t)$.

g : representa el suministro de ψ .

\underline{n} : vector normal a $\partial B(t)$

Como se observa, esta ecuación de balance global es de tipo integral, pero se puede transformar en una de balance diferencial o local. Para esto se utilizan los siguientes resultados:

Teorema 1 (*Teorema de Gauss o de la divergencia*): Sea \underline{f} una función vectorial continuamente diferenciable en $B(t)$, entonces $\int_{B(t)} \nabla \cdot \underline{f} \, dx = \int_{\partial B(t)} \underline{f} \cdot \underline{n} \, dx$

Teorema 2 (*Transporte de Reynolds*): Sea f una función de valores reales definida en $B(t)$, continuamente diferenciable, entonces

$$\frac{d}{dt} \int_{B(t)} f \, dx = \int_{B(t)} \left(\frac{Df}{Dt} + f \nabla \cdot \underline{v} \right) dx$$

Ahora, aplicando el teorema de Gauss al segundo término del lado derecho de (2.1), y el teorema de Reynolds al lado izquierdo de (2.1), se tiene que

$$\int_{B(t)} \left[\frac{D}{Dt} (\rho\psi) + \rho\psi \nabla \cdot \underline{v} - \nabla \cdot \underline{\tau} - \rho g \right] dx = 0 \quad (2.2)$$

Veamos ahora otro resultado:

Lema 1 (*duBois-Reymond*): Sea $f(x)$ una función continua en una región U y $\int_V f(x) dx = 0 \quad \forall V \subset U$, entonces $f(x) = 0 \quad \forall x \in U$

Aplicando esto a la función integrando en (2.2), podemos concluir que

$$\frac{D}{Dt}(\rho\psi) + \rho\psi\nabla \cdot \underline{v} - \nabla \cdot \underline{\tau} - \rho g = 0 \quad \text{en } B(t) \quad (2.3)$$

y como la derivada material para $\rho\psi$ tiene la expresión

$$\frac{D}{Dt}(\rho\psi) = \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla(\rho\psi) \quad ,$$

sustituyendo en la ecuación (2.3) se tiene

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla(\rho\psi) + \rho\psi\nabla \cdot \underline{v} = \nabla \cdot \underline{\tau} + \rho g$$

Ahora bien, sabemos que

$$\nabla \cdot (\rho\psi \underline{v}) = \underline{v} \cdot \nabla(\rho\psi) + \rho\psi\nabla \cdot \underline{v}$$

de donde resulta la ecuación de balance diferencial o local

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\psi) + \nabla \cdot (\rho\psi \underline{v}) = \nabla \cdot \underline{\tau} + \rho g$$

2.1.2 Construcción del modelo matemático

En la construcción de la representación matemática que estamos buscando para nuestro acuífero, intervienen de manera importante:

- 1) Propiedades extensivas y/o intensivas.
- 2) Ecuaciones de balance
- 3) Ecuaciones constitutivas

donde las ecuaciones constitutivas están asociadas a la ciencia específica donde se ubica el problema en estudio.

Flujo de fluidos libres

Sabemos que la masa del fluido en este caso está dada por

$$M_l(t) = \int_{B(t)} \rho(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

Entonces podemos plantearnos la ecuación de balance de masa local en sus dos variantes:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \\ \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \end{cases}$$

Si se considera que hay conservación de masa, o sea que $g = \underline{\tau} = 0$ entonces, por ejemplo, la segunda forma de la ecuación de balance local quedaría como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (2.4)$$

que se conoce como *Ecuación de Continuidad en Mecánica de Fluidos*.

Ahora veamos cómo se transforman las ecuaciones ya vistas si consideramos que el fluido es *incompresible*.

Un fluido se considera compresible o incompresible teniendo en cuenta si la densidad varía o no cuando cambia la presión, o sea que

$$\rho = \rho(p)$$

Entonces podemos escribir que

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{d\rho}{dp} \frac{Dp}{Dt}$$

pero para un fluido incompresible $\frac{d\rho}{dp} = 0$ por lo que la Ecuación de estado se reduce a

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0$$

Sustituyendo en (2.4) se tiene que la Ecuación de conservación de masa para un fluido incompresible es

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0$$

Flujo de fluidos en medios porosos

Sabemos que en este caso la masa de fluido está dada por

$$M_p(t) = \int_{B(t)} \rho(\underline{x}, t) \cdot \epsilon(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

por lo que si planteamos la ecuación de balance local de masa en sus dos formas, tenemos

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\epsilon \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \\ \frac{D(\rho\epsilon)}{Dt} + \rho\epsilon \nabla \cdot \underline{v} = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \end{cases}$$

donde el lado derecho de ambas ecuaciones se hace cero si se asume que hay conservación de masa. Así, dado este supuesto, la primera ecuación queda como

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\epsilon \underline{v}) = 0 \quad (2.5)$$

Ahora, una de las leyes básicas del flujo en medios porosos es la *Ley de Darcy* que plantea lo siguiente:

$$\underline{U} = \frac{-k}{\mu} (\nabla p + \rho g_r \nabla z) \quad (2.6)$$

donde

- $\underline{U} = \epsilon \underline{v}$: es la velocidad de Darcy
- p : presión del fluido
- ρ : densidad del fluido
- $\rho g_r \nabla z$: vector aceleración de la gravedad
- k : tensor de permeabilidad absoluta del medio poroso
- μ : viscosidad dinámica del fluido
- z : altura o grosor del acuífero
- g_r : magnitud de la gravedad

Como la densidad y la porosidad dependen de la presión, si nos planteamos derivar $\rho\epsilon$ con respecto al tiempo, tendremos que

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} = \left(\rho \frac{d\epsilon}{dp} + \epsilon \frac{d\rho}{dp} \right) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.7)$$

Es usual definir los coeficientes de compresibilidad de la matriz porosa y del fluido, respectivamente, como

$$\alpha = \frac{d\epsilon}{dp} \quad , \quad \beta = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp}$$

y reescribir (2.7) usando dichos coeficientes, lo que da lugar a

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} = \rho(\alpha + \epsilon\beta) \frac{\partial p}{\partial t}$$

Entonces la ecuación de balance (2.5) adopta la forma

$$S_s \frac{\partial p}{\partial t} + g_r \nabla \cdot (\rho \underline{U}) = 0 \quad (2.8)$$

donde

$S_s = \rho g_r (\alpha + \epsilon\beta)$: coeficiente de almacenamiento específico, que indica la relación entre los cambios en la cantidad de agua almacenada en el acuífero y los correspondientes cambios en las elevaciones o alturas piezométricas. En acuíferos confinados está definido como el volumen de agua extraída o añadida al acuífero por unidad horizontal de área.

Haciendo uso de la Ley de distribución hidrostática de presiones:

$$\rho g_r (h - z) = p - p_0 \quad (2.9)$$

donde p_0 indica la presión atmosférica, podemos transformar la ecuación (2.8) como una expresión en función de la altura piezométrica o columna del fluido, generalmente denominada por h , de la siguiente manera:

De (2.9) se tiene

$$h = \frac{p - p_0}{\rho g_r} + z$$

por lo que, suponiendo que ρ es constante

$$\nabla h = \frac{1}{\rho g_r} \nabla p + \nabla z$$

Ahora bien, despejando ∇p y ∇z de la igualdad anterior y sustituyendo sus expresiones en (2.6) tenemos

$$\underline{U} = \frac{-k}{\mu} \rho g_r \nabla h \quad (2.10)$$

Por otro lado, como z no depende del tiempo

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p - p_0}{\rho g_r} + z \right) = \frac{1}{\rho g_r} \frac{\partial p}{\partial t} \implies \frac{\partial p}{\partial t} = \rho g_r \frac{\partial h}{\partial t}$$

Sustituyendo ahora las expresiones de $\frac{\partial p}{\partial t}$ y de \underline{U} , dada en (2.10), en la ecuación (2.8), se tiene que

$$\rho g_r S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \rho g_r \nabla \cdot \left(\frac{k}{\mu} \rho g_r \nabla h \right) = 0 \quad (2.11)$$

Ahora, multiplicando (2.11) por $\frac{1}{\rho g_r}$ y definiendo el tensor de conductividad del fluido como $K = \rho g_r \frac{k}{\mu}$, llegamos a escribir (2.8) en función de h como

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (K \nabla h) = 0 \quad (2.12)$$

Ahora bien, para obtener la ecuación de flujo (2.12) en acuíferos confinados hemos considerado, hasta ahora, la existencia de conservación de masa y por eso eliminamos los términos g y $\underline{\tau}$, que representan la entrada y salida, respectivamente, de fluido a dicho sistema de aguas subterráneas, pero en general no tiene por qué cumplirse esto. De hecho, en los casos considerados en este trabajo no hay conservación de masa, por lo que definimos a q como la diferencia entre la salida y la entrada de fluido al acuífero.

Tomando en cuenta lo anterior e introduciendo el **coeficiente T de transmisividad hidráulica**, dado en términos del tensor K de conductividad y del grosor del acuífero, es posible (como se muestra en la referencia [38]) reformular la ecuación (2.12) para obtener el modelo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + q \quad (2.13)$$

donde $h = h(x, y, t)$, $S = S(x, y)$, $q = q(x, y, t)$ y $T = T(x, y)$

(2.13) es el modelo matemático para nuestro acuífero confinado, al que habremos de referirnos de ahora en adelante, que también puede expresarse en términos operacionales procediendo como sigue:

Desarrollando (2.13) se obtiene

$$\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} + T \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial h}{\partial y} + T \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - S \frac{\partial h}{\partial t} = q$$

o bien

$$T \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial h}{\partial y} - S \frac{\partial h}{\partial t} = q$$

que puede verse como

$$L h = q \quad (2.14)$$

donde

$$L \equiv \left[T \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} - S \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

es un operador lineal definido de H en Q , esto es, $L : H \rightarrow Q$, con H y Q espacios de funciones tales que $h \in H$ y $q \in Q$, usualmente considerados de Hilbert; lo que resulta coherente con todo lo hecho hasta aquí dado que nuestro objeto en estudio, el acuífero modelado por (2.13), es un objeto del mundo físico cuya representación o modelo natural es R^3 , caso típico de un espacio de Hilbert.

2.2 Problema Directo

Como hemos mencionado, uno de los propósitos finales hacia el que apunta esta investigación es el desarrollo de herramientas que permitan dar criterios para administrar y explotar racionalmente el agua de una reserva subterránea o acuífero, haciendo predicciones a futuro con relación a diferentes políticas de uso de dicho recurso natural. Pero cualquier modelo de administración requiere conocer con precisión la cantidad de agua disponible, dada por la carga hidráulica h , por lo que es necesario disponer de una herramienta que permita resolver la ecuación de flujo de manera estable y eficiente, para lo cual necesitamos de un conocimiento adecuado de las propiedades del medio poroso, como transmisividad y porosidad, así como la recarga y extracción, para poder predecir cuál será el comportamiento de los niveles de agua en el acuífero y el impacto ambiental que tendrá una u otra estrategia de explotación.

Suponiendo que conocemos las propiedades mencionadas, asociadas con los parámetros T y S , es posible entonces resolver el modelo de flujo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S(x, y) \frac{\partial h}{\partial t} + q \quad (2.15)$$

con condiciones iniciales y de frontera adecuadas, y obtener como respuesta los niveles de agua o altura piezo-métrica h , que es la variable que nos reporta la cantidad de agua disponible en cierto momento. Esto puede interpretarse en los siguientes términos: conocida la **causa** (parámetros, dados por las propiedades del fluido y del medio poroso) podemos conocer el **efecto** (cantidad de agua disponible), y a este escenario se le conoce como **Problema Directo**. Más adelante volveremos sobre esto.

Un requerimiento que no se puede pasar por alto, para una descripción geomatemática completa del modelo de flujo en cuestión, es la inclusión de las llamadas condiciones iniciales y de frontera; las primeras están dadas por el conocimiento de la altura piezométrica en un estado de tiempo inicial t_0 , esto es, se supone conocida

$$h(x, y, t_0) = h^0(x, y).$$

A su vez, las condiciones de frontera representan la interacción hidráulica del acuífero con otras componentes del ciclo hidrológico y generalmente son de tres tipos:

1. **Condiciones de Dirichlet:** aparecen cuando en una parte de la superficie fronteriza se conoce el potencial o altura piezo-métrica en varios estados de tiempo, lo que se expresa como

$$h(x, y, t) = h^*(x, y, t).$$

2. **Condiciones de Newmann:** aparecen cuando en una parte de la frontera se conoce el flujo normal a ella; esto es, se tiene

$$qn = -K \frac{\partial h}{\partial n} = g^*(x, y, t), \quad n: \text{normal a la frontera}$$

3. **Condiciones de Cauchy o mixtas:** se utilizan cuando se conoce tanto el potencial como su gradiente normal. La formulación correspondiente es:

$$\alpha T(x, y) \frac{\partial h}{\partial n} = \beta h - \gamma, \quad \alpha, \beta, \gamma \neq 0.$$

Con los elementos ya establecidos y haciendo uso del lenguaje operacional, el **problema directo** puede formularse ahora en los siguientes términos:

Dado que la carga hidráulica h , solución de (2.14) depende (además de x , y y t), de los parámetros T y S , tiene sentido escribir $h(T, S)$, donde, dados P y H , espacios de parámetros y soluciones, respectivamente, si definimos el operador

$$\Phi : P \longrightarrow H ,$$

entonces, si $(T, S) \in P$, se tiene

$$\Phi(T, S) = h \equiv h(T, S) . \quad (2.16)$$

A esta formulación del problema directo nos referiremos en lo que sigue.

Tanto el planteamiento conjunto de la ecuación de flujo (2.15) con las condiciones iniciales y de frontera, como el conocimiento de los parámetros que en ellas intervienen, aseguran que el Problema Directo al que nos hemos referido y con el que estaremos trabajando, tiene solución única, que además depende continuamente de la condición inicial, esto es, a pequeñas variaciones en $h^0(x, y)$, la solución h del modelo varía poco, lo que según Hadamard, clasifica al **Problema Directo** como un problema **bien planteado**, dado que satisface la siguiente

Definición 1 Sean X, Y espacios de Banach y sea $K : X \longrightarrow Y$ un operador -lineal o no lineal-. La ecuación $Kx = y$ se llama bien planteada, si:

1. Para toda $y \in Y$ existe al menos una $x \in X$ tal que $Kx = y$.
2. Para toda $y \in Y$ existe a lo más una $x \in X$ tal que $Kx = y$.
3. La solución x depende continuamente de y ; esto es, para toda sucesión $\{x_n\} \subset X$ con $Kx_n \longrightarrow Kx$, cuando $n \longrightarrow \infty$, se tiene que $x_n \longrightarrow x$ cuando $n \longrightarrow \infty$.

Cualquier ecuación $Kx = y$ para la cual al menos una de estas condiciones no se cumpla, se llama mal planteada.

En particular la condición 3., llamada de estabilidad, resulta de especial interés para nosotros, y para el caso de nuestro problema directo $\Phi(T, S) = h$,

mostraremos que ésta se satisface, considerando el caso del modelo de flujo en una dimensión espacial y con coeficientes constantes, esto es,

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{\partial h}{\partial t}, \quad \text{para } t > 0, \quad 0 < x < 1$$

con

$$\begin{aligned} h(0, t) &= h(1, t) = 0 \quad \text{para } t > 0 \\ h(x, 0) &= h^0(x), \quad \text{para } 0 \leq x \leq 1 \end{aligned}$$

La solución correspondiente podemos escribirla como

$$h(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \left(2 \int_0^1 h^0(x) \sin(m\pi x) dx \right) \cdot \left(e^{-(m\pi)^2 t} \sin(m\pi x) \right)$$

observando que si perturbamos ligeramente $h^0(x)$, que es el dato de este problema, se producirán también pequeños cambios en $h(x, t)$.

2.2.1 Solución Numérica del Problema Directo

Como ya hemos visto, si consideramos S , T y q dadas a priori, se trata de resolver (2.15) con el fin de obtener la correspondiente altura piezométrica h y en esta sección hacemos referencia al método numérico adoptado por nosotros para resolver este problema.

Diferencias finitas

Analicemos brevemente el caso más sencillo, que corresponde a tomar en el modelo (2.13): $h = h(x, t)$, $S = 1$, $T = T(x) = 1$, y $q = 0$.

Si hacemos

$$h_t \equiv \frac{\partial h}{\partial t}, \quad h_{xx} \equiv \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$

y

$$h^t(x) \equiv h(x, t)$$

se tendrá entonces

$$h_t = h_{xx} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned} h(x, 0) &= h^0(x) & 0 \leq x \leq 1 \\ h(0, t) &= 0 & 0 \leq t \leq t_f \\ h(1, t) &= 0 & 0 \leq t \leq t_f \end{aligned}$$

El dominio o región donde calcularemos la solución es $\Omega = [0, 1] \times [0, t_f]$.

El primer paso consiste en discretizar Ω . Para ello, sea Nx el número de subintervalos en los que se desea dividir el intervalo $[0, 1]$ y Nt el número de subintervalos en los que se desea dividir el intervalo $[0, t_f]$, entonces, si

$$\begin{aligned} \Delta x &= \frac{1}{Nx} & \text{incremento en } x \\ \Delta t &= \frac{t_f}{Nt} & \text{incremento en } t \end{aligned}$$

los puntos de la red resultante serán de la forma (x_i, t_j) , donde

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x & i = 0, 1, \dots, Nx \\ t_j &= j\Delta t & j = 0, 1, \dots, Nt \end{aligned}$$

y al valor de la solución h del problema (2.17) en un punto (x_i, t_j) de la red se denotará como

$$h_i^j = h(x_i, t_j)$$

Esquema explícito

Si aproximamos h_t usando diferencias del tipo

$$h_t(x_i, t_j) \approx \frac{h(x_i, t_{j+1}) - h(x_i, t_j)}{\Delta t} \quad i = 0, 1, \dots, Nx, \quad j = 0, 1, \dots, Nt$$

llamadas *diferencias hacia adelante* y h_{xx} usando diferencias del tipo

$$h_{xx}(x_i, t_j) \approx \frac{h(x_{i+1}, t_j) - 2h(x_i, t_j) + h(x_{i-1}, t_j)}{(\Delta x)^2}$$

llamadas *segundas diferencias centradas*, se obtiene, sustituyendo en (2.17), el esquema en diferencias, llamado *Explícito*, que constituye la expresión discretizada de dicho problema:

$$h_i^{j+1} - h_i^j = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (h_{i+1}^j - 2h_i^j + h_{i-1}^j) \quad (2.18)$$

con

$$\begin{aligned} h_i^0 &= h^0(x_i) \quad i = 0, 1, \dots, Nx \\ h_0^j &= h_{Nx}^j = 0 \quad j = 0, 1, \dots, Nt \end{aligned}$$

Un aspecto muy importante a considerar en cuanto a la robustez de un método numérico es la propiedad de *estabilidad*. Veamos esto.

Sea h_i^n el vector solución en el paso de tiempo n , obtenido usando (2.18) con h_i^0 como valor inicial y sea p_i^n el vector solución en el paso de tiempo n , obtenido usando (2.18) con p_i^0 como valor inicial, con $h_i^0 \neq p_i^0$. Se dice que el esquema dado por (2.18) es **estable** en la norma $\|\cdot\|$ si existe una constante M tal que

$$\|h_i^n - p_i^n\| \leq M \|h_i^0 - p_i^0\|$$

En [46] se muestran algunos resultados numéricos obtenidos al aplicar este esquema y se observa que dependen críticamente del valor

$$\nu = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$$

es decir, de la relación entre el tamaño del paso por el tiempo y el tamaño del paso en el espacio. Haciendo uso de las series de Fourier para expresar la solución exacta de la ecuación diferencial y de la solución de la ecuación en diferencias, se analiza el error de truncamiento de dicho esquema y se llega a que (2.18) es estable si

$$\nu \leq \frac{1}{2} \quad (2.19)$$

e inestable si ocurre lo contrario. Al mismo tiempo se han desarrollado otros esquemas que no presenten esta limitante y que describimos a continuación.

Esquema implícito

Cuando se aproxima h_{xx} usando segundas diferencias centradas correspondiente a la capa de tiempo $j + 1$ y h_t con diferencias del tipo

$$h_t(x_i, t_j) \approx \frac{h(x_i, t_j) - h(x_i, t_{j-1})}{\Delta t} \quad i = 0, 1, \dots, Nx, \quad j = 0, 1, \dots, Nt$$

llamadas *diferencias hacia atrás*, se obtiene el siguiente esquema, llamado *implícito*, el cual es incondicionalmente estable, esto es, no se tiene una restricción del tipo (2.19).

$$h_i^{j+1} = h_i^j + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (h_{i+1}^{j+1} - 2h_i^{j+1} + h_{i-1}^{j+1})$$

$$h_i^0 = h^0(x_i) \quad i = 0, 1, \dots, Nx$$

$$h_0^j = h_{Nx}^j = 0 \quad j = 0, 1, \dots, Nt$$

Como se ve en (2.18), para calcular h_i^{j+1} usando el esquema explícito, sólo se requieren los valores de h en el paso de tiempo anterior (j), mientras que si usamos el esquema implícito hay que resolver un sistema de ecuaciones lineal tridiagonal para obtener la solución de la ecuación. La matriz de este sistema es de diagonal dominante, lo que asegura la estabilidad numérica del algoritmo de *Thomas* [46], utilizado generalmente para resolver dicho sistema.

La importancia del esquema implícito está dada por el hecho de que el paso por el tiempo puede ser mucho más grande que el paso por el espacio, sin que esto signifique inestabilidad en el proceso de cálculo de la solución de (2.17). Esto hace que dicho método sea muy usado a pesar de que en la medida en que la red se haga más fina, aumenta considerablemente el orden del sistema de ecuaciones ya mencionado.

Esquema de Crank-Nicholson, implemetación de Peaceman - Rachford

De lo anterior, resulta natural aplicar una combinación de ambos esquemas de manera que no se presenten condiciones de estabilidad demasiado restrictivas y al mismo tiempo el proceso no se haga muy complicado, introduciendo entonces la siguiente familia de esquemas dependientes del parámetro θ , ($0 \leq \theta \leq 1$)

$$\frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{\theta (h_{i+1}^{j+1} - 2h_i^{j+1} + h_{i-1}^{j+1}) + (1 - \theta) (h_{i+1}^j - 2h_i^j + h_{i-1}^j)}{(\Delta x)^2} \quad (2.20)$$

la que incluye como casos particulares el explícito ($\theta = 0$) y el implícito ($\theta = 1$). Como se mencionó anteriormente, usando análisis de Fourier, se demuestran en [46] las siguientes condiciones necesarias y suficientes para garantizar la estabilidad de (2.20) con distintos valores de θ :

- Si $0 \leq \theta < \frac{1}{2}$, se cumple que (2.20) es estable si y sólo si $\nu \leq \frac{1}{2}(1 - 2\theta)^{-1}$.
- Si $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$, se cumple que (2.20) es estable para todo valor de ν .

Al analizar el error de truncamiento, usando desarrollo en serie de Taylor, se ve en [46] que para $\theta = \frac{1}{2}$ se obtiene un mejor orden de aproximación de la solución que con cualquier otro valor. Esto dio lugar al conocido esquema de Crank-Nicolson (CN), aplicado por estos autores con resultados muy satisfactorios.

Sucede entonces que cuando se intenta aplicar estos esquemas - por ejemplo el de (C-N)- a problemas en dos dimensiones espaciales como el que nos ocupa, éstos se hacen computacionalmente muy laboriosos y se han desarrollado esquemas que aprovechan la eficiencia de los métodos implícitos en una dimensión. Uno de ellos es el:

Método Implícito de Direcciones Alternadas.

La idea central de éste es considerar la red

$$W = \{(x_i, t_j), \quad x_i = i\Delta x, i = 0, 1, \dots, Nx, y_j = j\Delta t, j = 0, 1, \dots, Ny\}$$

como un conjunto de nodos a lo largo de las filas $j = 0, 1, \dots, Nt$ o como un conjunto de nodos a lo largo de las columnas $i = 0, 1, \dots, Nx$, entonces en cada fila (columna) se resuelve un sistema tridiagonal manteniendo fijo a j (i). Esto es equivalente a aplicar el esquema implícito en una dimensión espacial y no en ambas al mismo tiempo.

Una variante de este método es la desarrollada por Peaceman y Rachford [46] motivada por el esquema de C-N y que denotando $h_{i,j}^n = h(x_i, y_j, t_n)$, se plantea del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
& h_{i,j}^{n+1} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^{n+1} - 2h_{i,j}^{n+1} + h_{i,j-1}^{n+1}) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (h_{i+1,j}^{n+1} - 2h_{i,j}^{n+1} + h_{i-1,j}^{n+1}) + \\
& \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^{n+1} - 2h_{i,j}^{n+1} + h_{i,j-1}^{n+1}) (h_{i+1,j}^{n+1} - 2h_{i,j}^{n+1} + h_{i-1,j}^{n+1}) = \\
& h_{i,j}^n + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^n - 2h_{i,j}^n + h_{i,j-1}^n) + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (h_{i+1,j}^n - 2h_{i,j}^n + h_{i-1,j}^n) + \\
& \frac{(\Delta t)^2}{4(\Delta x)^2(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^n - 2h_{i,j}^n + h_{i,j-1}^n) (h_{i+1,j}^n - 2h_{i,j}^n + h_{i-1,j}^n)
\end{aligned}$$

Usando una capa intermedia de tiempo se puede escribir el esquema anterior de forma más clara, teniendo que

$$\begin{aligned}
& h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (h_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + h_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) = \\
& h_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^n - 2h_{i,j}^n + h_{i,j-1}^n)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

y

$$\begin{aligned}
& h_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2} (h_{i,j+1}^{n+1} - 2h_{i,j}^{n+1} + h_{i,j-1}^{n+1}) = \\
& h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (h_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + h_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}})
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Como en (2.21) los elementos del término de la derecha son conocidos del paso anterior se pueden calcular los $h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$ de la capa intermedia sin mayor problema, y luego se construye el término de la derecha de (2.22) y se obtiene $h_{i,j}^{n+1}$ en la siguiente capa de tiempo. Es necesario señalar que cuando se trabaja con dos o más dimensiones surge otro problema importante, relacionado con la complejidad de la región en la que se resuelve la ecuación diferencial. El tratamiento de las condiciones de frontera en estos casos complica un poco más el proceso de cálculo, ver [46], pero no vamos a profundizar en este aspecto.

Siguiendo entonces el método implícito de direcciones alternadas, el proceso de solución de la ecuación es mucho más rápido que si se aplica el método de C-N tal cual. Esta variante propuesta por Peaceman y Rachford es la que sustenta la versión computacional que usaremos para resolver el problema directo.

Capítulo 3

El Problema Inverso de Identificación de Parámetros

Hemos establecido hasta ahora el modelo de flujo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S(x, y) \frac{\partial h}{\partial t} + q,$$

o bien

$$Lh = q \tag{3.1}$$

y el problema directo asociado

$$\Phi(T, S) = h, \tag{3.2}$$

así como una propuesta metodológica para resolverlo.

Ahora bien, resulta que en la práctica nos encontramos muchas veces con el hecho de que no se conocen los parámetros o coeficientes del modelo de flujo. En particular, resulta que los parámetros $T(x, y)$ y $S(x, y)$ (transmisividad y coeficiente de almacenamiento respectivamente) dependen del acuífero en estudio, variando notablemente de un acuífero a otro e incluso de una zona a otra dentro de un mismo acuífero, resultando muy costoso o a veces imposible calcular estimaciones de ellos en toda la región o a una cierta profundidad. Pero al mismo tiempo es posible contar, en gran parte de los acuíferos en explotación, con mediciones de la carga o altura piezo-métrica

h en distintos puntos (pozos de observación), por lo que se plantea usar esta información para estimar los coeficientes desconocidos del modelo y poder así **caracterizar** el acuífero.

Se plantea entonces lo que se conoce como **Problema Inverso**, asociado a (3.2), que puede plantearse como sigue:

i) Situación teórica

Conocido el efecto (h , solución del modelo (3.1)), se busca la causa (parámetros T, S) que lo provoca, lo que simbolizaremos como:

$$\Phi^{-1}(h) = (T, S) \tag{3.3}$$

ii) Caso real-práctico

Se trata del caso cuyo tratamiento constituye el objetivo central de nuestro estudio, y lo formularemos en los siguientes términos:

Dadas ciertas observaciones experimentales de la carga hidráulica h , obtenidas de mediciones realizadas en distintos pozos de observación, se trata de determinar los parámetros que reproduzcan dichas observaciones. En símbolos, si llamamos \tilde{h} a la h observada, se tiene que

$$\tilde{h} = h^* + \delta, \tag{3.4}$$

donde h^* es la carga hidráulica real exacta, y δ representa un cierto error asociado con los instrumentos de medición usados.

Si suponemos que \tilde{h} pertenece a un cierto espacio \tilde{H} que llamaremos de observaciones, y definimos el operador

$$\Psi : H \longrightarrow \tilde{H}, \tag{3.5}$$

se tiene el esquema

$$\Phi : P \longrightarrow H, \Psi : H \longrightarrow \tilde{H}$$

$$(T, S) \longrightarrow h \longrightarrow \tilde{h},$$

y se trata entonces de determinar los parámetros, que llamaremos \tilde{T} y \tilde{S} , tales que

$$(\Psi \circ \Phi) (\tilde{T}, \tilde{S}) = \Psi (h (\tilde{T}, \tilde{S})) = \tilde{h}, \quad (3.6)$$

esto es, que permitan reproducir las observaciones \tilde{h} .

Como antes dijimos, (3.6) es nuestro problema central a resolver, y constituye un caso típico de problema mal planteado a la Hadamard, puesto que no satisface las condiciones de la Definición 1, esto es:

- Aun si nos referimos a la situación teórica y consideramos que los parámetros T y S han sido calculados sin error, éstos no reproducirán la h^* real exacta del proceso de flujo modelado por (3.1), pues este es sólo una representación -tal vez buena pero nunca exacta- del proceso real; de donde, en general se tiene que, si llamamos T_c , S_c a los parámetros calculados y h_c a la carga hidráulica correspondiente, se tendrá entonces

$$\Phi (T_c, S_c) = h_c \neq h^*$$

- También se tiene que

$$\Psi (h^*) \neq \tilde{h}$$

debido a los errores de medición contenidos en \tilde{h} .

Con base en lo anterior, una propuesta usual consiste en estimar \tilde{T} y \tilde{S} como aquellos T^* , S^* que mejor reproduzcan la \tilde{h} observada en el sentido de obtener el mejor error de cuadrados mínimos dado por

$$\min_{(T,S)} F(T,S), \quad F(T,S) = \left\| (\Psi \circ \Phi) (T,S) - \tilde{h} \right\|^2, \quad (3.7)$$

que es un problema de optimización no lineal que, debido al mal planteamiento del problema inverso (3.6) presenta las siguientes características:

i) Posibles soluciones sin sentido geofísico

Con respecto a esto, una posibilidad sería usar un método de optimización global [13] o bien estructurar una estrategia con base en consideraciones tales como:

- Iniciar el proceso de optimización partiendo de una buena aproximación inicial de T^* , S^* , que en general no está disponible.

- Adoptar alguna estrategia que permita convexificar, al menos en cierta medida el problema de optimización (3.7), lo que provoca que sólo haya una solución estable. Más adelante presentaremos una propuesta en este sentido.
- Contar con información sobre cotas, cercanas a la solución buscada, que deban satisfacer los parámetros. Por ejemplo, para el caso del parámetro T de transmisividad hidráulica, es usual que, a partir de consideraciones geofísicas se tengan cotas del estilo: $l \leq T \leq u$, y si éstas son muy precisas, ello reduce el espacio de búsqueda y con ello la complejidad del problema.

ii) Inestabilidad en el proceso de cálculo de T^*, S^*

Esto es debido a que los errores en \tilde{h} pueden dar lugar a valores calculados alejados de \tilde{T} y \tilde{S} a causa de la no continuidad del operador inverso

$$(\Psi \circ \Phi)^{-1} .$$

En relación con este problema, la estrategia que aquí usaremos para resolverlo es la de aplicar algún procedimiento “de regularización” para estimar dichos parámetros de manera estable, controlando la propagación del error. Es importante señalar que este problema, debido a la no continuidad del operador asociado al problema inverso (3.3), será tratado con especial atención en nuestro trabajo.

Haremos ahora un breve paréntesis para ilustrar el asunto de la no continuidad con dos ejemplos, uno académico y otro que modela el flujo en una dimensión y que por tanto es una versión simplificada del problema aquí estudiado:

- Sea $f \in C^1[0, 1]$. Sea $\delta \in]0, 1[$, y tomemos un valor $n \in N$, con $n \geq 2$.

Definamos la siguiente función

$$f_{\delta,n}(x) \equiv f(x) + \delta \sin\left(\frac{nx}{\delta}\right), \quad \delta \ll 1$$

como una perturbación de $f(x)$. Calculando su derivada se tiene que

$$f'_{\delta,n}(x) \equiv f'(x) + n \cos\left(\frac{nx}{\delta}\right)$$

Como se observa, mientras que el error entre f y $f_{\delta,n}$, en norma infinita, dado por

$$\|f - f_{\delta,n}\|_{\infty} = \delta$$

puede ser muy pequeño, el error entre f' y $f'_{\delta,n}$ puede ser arbitrariamente grande, dado que

$$\|f' - f'_{\delta,n}\|_{\infty} = n,$$

esto es, pequeños errores en f pueden provocar errores grandes en su derivada, lo que caracteriza a la derivación como un problema mal planteado.

- Consideremos la siguiente versión simplificada de nuestro modelo en estudio:

$$-\frac{d}{dx} \left(T(x) \frac{dh}{dx} \right) = f(x), \quad x \in [0, 1]$$

con condiciones de frontera adecuadas.

Para este caso, si se supone

$$\frac{dh}{dx} \neq 0, \quad x \in [0, 1]$$

es posible calcular explícitamente la expresión -única- para $T(x)$, dada por

$$T(x) = \frac{1}{\frac{dh}{dx}} \left[T(0) \frac{dh}{dx}(0) - \int_0^x f(s) ds \right] \quad (3.8)$$

Dos observaciones importantes respecto a (3.8) son:

1. En la expresión para $T(x)$ aparecen derivadas, cuyo cálculo resulta inestable según hemos visto.

2. El hecho de que $\frac{dh}{dx}$ aparezca como divisor, puede generar inestabilidad adicional en $T(x)$ debida, por ejemplo, a perturbaciones en $f(x)$, particularmente si se tiene $\frac{dh}{dx} \approx 0$.

Continuando con el problema del **mal planteamiento**, es importante señalar que, si bien el problema inverso que nos ocupa es no lineal, vamos a discutir a continuación algunos resultados importantes para abordar el caso lineal equivalente, para el que se tiene una teoría completa que permite entender el alcance del mismo y del que la estimación de fuentes en nuestro problema sería un ejemplo.

Consideremos el operador lineal $A : Z \rightarrow U$, acotado, con Z y U espacios de Hilbert, y el correspondiente problema operacional

$$Az = u, \quad (3.9)$$

y nos planteamos entonces el problema inverso de encontrar z dado u .

Sabemos que (3.9) tiene solución siempre que $u \in R(A)$ (imagen de A), y que la solución es única si y sólo si el núcleo de A , $N(A) = \{0\}$. De esta manera si (3.9) tiene solución y es única, entonces existe el operador inverso A^{-1} , y si A^{-1} es acotado (lo que implica que es continuo), el problema inverso está **bien planteado**.

Las condiciones correspondientes al mal planteamiento se establecen en el siguiente resultado:

Teorema 3 *Si $A : Z \rightarrow U$ es un operador lineal compacto, con dimensión de la imagen $R(A) = \infty$, entonces el operador inverso A^{-1} es un operador lineal no acotado.*

Como se ve, bajo las hipótesis del teorema, se tiene que el operador inverso es no acotado y por lo tanto no continuo, de donde, el correspondiente problema inverso $Az = u$ es mal planteado. Ahora bien, a pesar de esta problemática, si se cumplen las siguientes condiciones:

- La solución z que corresponde a la u exacta existe, es única y pertenece a un cierto compacto $M \subset Z$.

- La solución z depende de manera continua de las variaciones de u en una vecindad de $A(M)$,

se dice entonces que (3.9) es bien planteado. Esto se conoce como el **buen planteamiento** de un problema en el sentido de Tikhonov, y se tiene el siguiente resultado al respecto:

Teorema 4 Sea $A : Z \rightarrow U$, y $M \subset Z$ compacto. Si se tiene que $A : M \rightarrow A(M)$ es inyectivo entonces $A^{-1} : A(M) \rightarrow M$ es continuo.

Así pues, si se cumplen las condiciones de este teorema, la solución de (3.9) es estable, dado que A^{-1} es continuo; sin embargo, un problema es saber si tiene sentido buscar la solución en un compacto y decidir qué compacto elegir. Bajo el supuesto de que se cumplen las condiciones anteriores se puede aplicar el llamado **método de las soluciones aproximadas**, el cual se aplica bajo el supuesto de existencia de solución única $z \in M \subset Z$, M compacto. Para comentar acerca de dicho método comenzamos definiendo el conjunto

$$Z_\delta = \{z \in Z : d(Az, u_\delta) \leq \delta\}$$

y se llama solución aproximada de $Az = u_\delta$ a cualquier elemento del conjunto $Z_\delta^M = Z_\delta \cap M$.

A partir de esto se establece que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \sup_{z_\delta \in Z_\delta^M} d(z_\delta, z) \right\} = 0$$

De igual forma, asumiendo las mismas hipótesis se tiene el método de cuasi soluciones, donde se llama cuasi solución de $Az = u$ a cualquier

$$z \in \left\{ z_c : \min_{z \in M} \|Az - u\| \rightarrow z_c \right\} = Z_c$$

Se define entonces $Z_{c,\delta}^M$ como el conjunto de cuasi soluciones de $Az = u_\delta$ y se demuestra que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \sup_{z_\delta \in Z_{c,\delta}^M} \|z_\delta - z\| \right\} = 0$$

de donde, cualquier cuasi solución es una solución aproximada, y como toda solución aproximada es estable, entonces las cuasi soluciones son estables.

Ejemplo: Sea $A : R \rightarrow R$,

$$Az = \frac{z}{z^2 + 1}$$

Para $u = 0$, la única solución de $Az = u$ es $z = 0$. Si tomamos ahora $u_\delta = \frac{\delta}{2}$, entonces

$$Z_\delta = \left\{ z : \left| \frac{z}{z^2 + 1} - \frac{\delta}{2} \right| \leq \delta \right\}$$

y si se considera el compacto $M = [-1, 1]$, entonces el conjunto de soluciones es

$$Z_\delta \cap [-1, 1] = \left\{ z : \frac{-1 + \sqrt{1 - \delta^2}}{\delta} \leq z \leq \frac{1 - \sqrt{1 - 9\delta^2}}{3\delta} \right\} = Z_\delta^M$$

Si no es éste el caso y no se dispone del compacto M , una alternativa es usar algún método de **regularización**, tema al que dedicaremos la siguiente sección, pero antes discutiremos algunos aspectos interesantes relacionados con el caso discreto asociado a (3.9), esto es, consideraremos el problema inverso

$$Az = u \tag{3.10}$$

con $A \in R^{m \times n}$, $z \in R^n$, $u \in R^m$, que resulta vital para nuestro estudio.

Ahora bien, cuando (3.10) es la versión discreta del problema inverso (3.9) en el caso mal planteado que es el que nos interesa, resulta entonces que la matriz A en (3.10) es mal condicionada como consecuencia de la no continuidad del operador inverso en (3.9) y en esta situación, una herramienta de gran utilidad para el análisis y el tratamiento del mal condicionamiento de (3.10) es la descomposición en valores singulares de A , según la cual,

$$A = V \Sigma W^t = \sum_{i=1}^n v_i \sigma_i w_i^t \tag{3.11}$$

con $V = [v_1, \dots, v_n] \in R^{m \times n}$, $W = [w_1, \dots, w_n] \in R^{n \times n}$, matrices con columnas ortonormales y $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, donde los σ_i son llamados valores singulares de A y pueden ordenarse de tal forma que $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$.

Se sabe que si el problema lineal general de estimar z dado u en $Az = u$, $A : Z \rightarrow U$, es mal planteado, los valores singulares tienden a cero sin que existan saltos importantes de magnitud entre ellos, y la tasa de decrecimiento caracteriza el grado de mal planteamiento [37]. Además, si $m = n$ y todos los σ_i son estrictamente positivos, A es invertible y la solución de $Az = u$ puede escribirse como

$$z = \sum_{i=1}^n \frac{v_i^t u}{\sigma_i} w_i . \quad (3.12)$$

Para $m > n$ se tiene la solución generalizada

$$z^\dagger = A^\dagger u = \sum_{i=1}^l \frac{v_i^t u}{\sigma_i} w_i , \quad (3.13)$$

correspondiente al problema

$$\min_z \|Az - u\|_2^2 ,$$

donde A^\dagger es la inversa generalizada de A , y $l = \text{rango de } A$.

Cuando los coeficientes $v_i^t u$ decaen a cero en promedio más rápidamente que los correspondientes valores singulares σ_i es posible el cálculo estable de las soluciones (3.12) o (3.13). Sin embargo se observa que el factor $\frac{1}{\sigma_i}$ para σ_i pequeño puede jugar un papel de amplificador de las componentes de alta frecuencia de u , lo que daría lugar a soluciones inestables.

En la práctica, debido a los errores mencionados, tanto los coeficientes $v_i^t u$ como los valores singulares σ_i varían de manera distinta a lo que sería su comportamiento teórico-exacto descrito anteriormente. En particular, los σ_i tienen inicialmente un decaimiento monótono a cero, pero éste se estabiliza en un cierto valor δ_A que depende de los errores (debido a la discretización) en A , mientras que los coeficientes $v_i^t u$ decaen hasta un nivel δ_u dependiente de los errores en u . Ambas cantidades, δ_A y δ_u , determinan en qué medida es posible recuperar la información del problema exacto partiendo de A y u con errores, que es lo usual en cualquier caso de interés real.

Una situación típica en la práctica es que los errores de medición contenidos en u superen en magnitud a todos los demás, de lo que resulta

$$e_u = \frac{\|u - u_\delta\|}{\|u\|} \geq \frac{\|A - A_\delta\|}{\|A\|} = e_A$$

donde u_δ y A_δ son las correspondientes u y A con errores. En este caso, los coeficientes $v_i^t u$ tienden a δ_u más rápido que los σ_i a δ_A y por lo tanto, puede afirmarse la confiabilidad de las primeras componentes z_1, z_2, \dots, z_{i_u} de la solución z , donde i_u es el índice para el que los coeficientes $v_i^t u$ alcanzan el valor δ_u . Las restantes $n - i_u$ componentes estarán contaminadas por errores que deberán ser amortiguados vía, digamos, un proceso de filtrado o **regularización** que permita detectar y filtrar las componentes indeseables, en cuyo caso la solución del sistema $Az = u$ adopta la forma

$$z = \sum_{i=1}^n f_i \frac{v_i^t u}{\sigma_i} w_i$$

donde las f_i son factores de filtrado de las componentes no deseadas, que definiremos más adelante cuando hablemos de los métodos de regularización. Cabe aclarar que a distintos tipos de regularización corresponden filtros diferentes.

3.1 Métodos de regularización

Describimos aquí algunos métodos de regularización, cuya implementación y resultados computacionales presentaremos y discutiremos en el capítulo de experimentación numérica.

Como se mencionó al principio del capítulo, el problema de la no continuidad de la solución del problema inverso de estimación de parámetros crea serios problemas numéricos; por ello, si se desea aproximar un problema cuya solución no depende continuamente de los datos, y éstos tienen errores de medición, usando ya sea un método de optimización de mínimos cuadrados o cualquier otro, debemos esperar que el método numérico se vuelva inestable.

En el caso de errores en los datos, cuando el problema está mal planteado no se puede encontrar la solución exacta. Lo que podemos hacer utilizando las técnicas de regularización es recuperar información parcial o una parte de la información concerniente a la solución del problema, de la manera más estable posible. La esencia de la aplicación de los métodos de regularización será siempre la de encontrar el balance adecuado entre el nivel de aproximación de la solución y la estabilidad de la misma.

El objetivo de estos métodos es entonces: **encontrar la mejor aproximación posible de la solución buscada y detenernos antes de que el error en los datos se propague.**

Volviendo ahora al problema lineal de determinar z conocida u

$$Az = u$$

podemos usar la función residual

$$f(z) = \|Az - u\|_p^2$$

y plantear uno de los siguientes esquemas de regularización:

1. Minimizar $f(z)$ sujeta a que z pertenezca a cierto conjunto factible ($z \in P$). Por ejemplo en nuestro caso, el imponer restricciones de acotación muy precisas en los parámetros a estimar, nos permite tener solución única.
2. Minimizar $f(z)$ sujeto a que cierta medida del tamaño de z ($w(z)$), sea menor que una cota superior η dada

$$w(z) \leq \eta$$

3. Minimizar $w(z)$ sujeto a que $f(z) \leq \lambda$.
4. Minimizar una combinación lineal de $f(z)$ y $w(z)$, esto es,

$$\min \{f(z)^2 + \alpha^2 w(z)^2\}, \quad \text{donde } \alpha \text{ es un factor de peso.}$$

De esta manera α , η y λ son llamados parámetros de regularización, y la función w es conocida como función de suavizamiento. El esquema 4. es el conocido como regularización de Tikhonov del cual hablaremos más adelante.

Como α , η y λ son parámetros que toman distintos valores, entonces se dice que un **método de regularización** está formado por una familia de problemas regularizantes y por una regla o metodología para seleccionar los valores de los parámetros en cada caso, que sea convergente en el sentido de que las soluciones regularizadas convergan a la solución exacta siempre que el error en los datos tienda a cero. Es importante señalar que la regla de

selección del parámetro de regularización depende explícitamente del nivel de ruido o error en los datos.

De esta forma, el problema de seleccionar un método de regularización consiste en escoger apropiadamente un par de funciones $w(z)$ y $f(z)$ para medir el tamaño de la solución y su correspondiente residual, así como una estrategia de selección del o de los parámetros de regularización asociados. Estas funciones determinan de qué manera se amortiguarán los errores de los datos en la solución regularizada, y diferentes funciones llevan a soluciones regularizadas con propiedades diferentes.

Por ejemplo si usamos

$$f(z) = \|Az - u\|_p^2 \quad \text{y} \quad w(z) = \|Lz\|_p^2,$$

con L la matriz identidad, lo que significa es que estamos buscando la solución de norma mínima, pero también puede usarse una matriz diagonal con pesos, o la aproximación discreta de un operador diferencial. Es importante señalar que p y L se escogen dependiendo de las características de la solución (no continuidad, suavidad, etc.), resultando por ejemplo que si usamos $p = 1$, con una L que sea la aproximación discreta de la n -ésima derivada de z , se obtendrán soluciones con discontinuidades en la derivada de orden $p - 1$. El número p de la norma controla el amortiguamiento de las componentes de la descomposición en valores singulares de A correspondientes a los valores singulares pequeños.

En cuanto a la matriz L , usualmente se obtienen buenos resultados en los problemas prácticos cuando se usa una aproximación discreta de un operador diferencial [28], como mostraremos en la parte de resultados numéricos.

3.1.1 Regularización de Tikhonov

Caso lineal

El fundamento del método de Regularización de Tikhonov consiste en incorporar al proceso de solución de un problema inverso lineal, propiedades apriori acerca del tamaño y de la suavidad de la solución buscada, usando $f(z) = \|Az - u\|_2$ y $w(z) = \|Lz\|_2$. En el caso discreto obtenemos la solución del problema correspondiente como

$$z_{\alpha(\delta),\delta} = \arg \min \{ \|Az - u\|_2^2 + \alpha^2 \|Lz\|_2^2 \} \quad (3.14)$$

donde α es el parámetro de regularización que controla el peso que se le da al término de regularización en la minimización, con respecto a la norma del residual.

El problema de Tikhonov (3.14) tiene dos formulaciones importantes, la dada por las ecuaciones normales y la de mínimos cuadrados:

$$(A^t A + \alpha^2 L^t L) z = A^t u \quad \text{y} \quad \min \left\| \begin{pmatrix} A \\ \alpha L \end{pmatrix} z - \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2. \quad (3.15)$$

Si se escoge L apropiadamente de manera que $N(A) \cap N(L) = \{0\}$, o sea que la matriz de coeficientes tenga rango completo, entonces la inversa de $(A^t A + \alpha^2 L^t L)$ existe y la solución de Tikhonov $z_{L,\alpha}$ es única y está dada por

$$z_{L,\alpha} = (A^t A + \alpha^2 L^t L)^{-1} A^t u. \quad (3.16)$$

Además, si aplicamos la descomposición en valores singulares de (A, L) y sustituimos en la expresión de $z_{L,\alpha}$ es fácil ver que los filtros mencionados anteriormente para la regularización de Tikhonov, tienen la forma

$$f_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha^2}, \quad \text{si } L = I_n \quad \text{y} \quad f_i = \frac{\gamma_i^2}{\gamma_i^2 + \alpha^2}, \quad \text{si } L \neq I_n$$

donde σ_i son los valores singulares de (A, L) y los γ_i son los valores singulares generalizados.

Es importante señalar que el planteamiento (3.14) para la regularización de Tikhonov permite considerar, en su real magnitud, el campo de aplicación de esta técnica ya que puede ser formulado también para operadores A no lineales, como el que se presenta en nuestra investigación, mientras que las formulaciones dadas en (3.15) sólo tienen sentido para el caso lineal.

Para el caso lineal, la teoría de regularización de Tikhonov está muy bien desarrollada y a continuación citamos el resultado de convergencia más importante al respecto, para el caso en que se tiene error en los datos.

Teorema 5 (Tikhonov) *Si se tienen datos u_δ con un error $\delta > 0$, esto es, $\|u - u_\delta\| = \delta$ y se cumple que el parámetro α de regularización satisface*

$$\alpha(\delta) > 0, \quad \alpha(\delta) \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad \frac{\delta^2}{\alpha(\delta)} \rightarrow 0, \quad \text{cuando } \delta \rightarrow 0$$

entonces $z_{\alpha(\delta),\delta} \rightarrow z$.

Tenemos pues que si $\alpha(\delta)$ tiende a cero cuando δ tiende a cero y lo mismo para el cociente $\frac{\delta^2}{\alpha(\delta)}$, se afirma que la solución $z_{\alpha(\delta),\delta}$ tiende a la solución z exacta de nuestro problema. Sin embargo, este resultado, al igual que algunos otros, suponen que δ (error en u) tiende a cero cuando en realidad, δ es un valor fijo asociado con algún instrumento de medición; por tal motivo se han desarrollado opciones que permiten aplicar variantes de estos resultados para tratar casos concretos donde δ es un valor fijo.

Caso no lineal

La teoría de **regularización** para el caso de **problemas no lineales** recién comienza a nutrirse de resultados importantes, por lo que está lejos todavía de constituirse en un desarrollo completo, como lo está para el caso lineal.

Por este motivo, y luego de revisar varios de los trabajos publicados al respecto [8, 26, 41], entre otros, trataremos de resumir aquí los conceptos y resultados más sobresalientes.

En general el problema inverso no lineal se plantea como resolver

$$F(z) = u, \text{ para } u \text{ dada} \quad (3.17)$$

donde $F : D(F) \subset Z \rightarrow U$ es un operador no lineal, Z, U son espacios de Hilbert y $D(F)$ es el dominio de F .

Por lo general este problema es mal planteado en el sentido de que las soluciones no dependen continuamente de los datos.

Como parte del sustento teórico vamos a suponer que F es un operador continuo y compacto, donde compacto significa que el operador transforma conjuntos acotados de Z en conjuntos acotados de U , los que al añadirle sus puntos de acumulación son compactos, esto es, tienen cerradura compacta. Además vamos a considerar que el $D(F)$ es un conjunto cerrado y convexo, todo lo cual implica que se cumpla:

- Que F es débilmente cerrado, esto es que para cualquier sucesión $\{z_n\} \subset D(F)$, el hecho de que $\{z_n\} \rightarrow z$ débilmente en Z y

$F\{z_n\} \rightarrow u$ débilmente en U , implica que $z \in D(F)$, y que se satisface la ecuación $F(z) = u$, donde convergencia débil de una sucesión significa que el $\lim_{n \rightarrow \infty} G(z_n) = G(z)$ para toda funcional G lineal y continua en Z .

A diferencia del caso lineal, en el que se busca la solución de norma mínima, para el problema (3.17) se plantea buscar la solución de norma z_0 -mínima, esto es:

Definición 2 Se llama a z^* una solución de norma z_0 -mínima del problema (3.17) si cumple que

$$F(z^*) = u$$

y además

$$\|z^* - z_0\| = \min \{\|z - z_0\| : F(z) = u\} \quad (3.18)$$

Es importante señalar que en el caso no lineal la selección de un z_0 conveniente será muy importante especialmente a la hora de ver resultados locales de convergencia y en el caso de soluciones múltiples, donde z_0 jugará un papel de criterio de selección.

Ahora bien, no necesariamente existe una solución de norma z_0 -mínima, y en el caso de que existiera puede no ser única; no obstante para poder hablar de resultados de convergencia y demás, asumiremos la existencia de dicha solución, lo que se corresponde con la realidad (esto es, el medio poroso tiene realmente características de transmisividad y porosidad que deseamos encontrar), para unos datos $u \in U$, así como la existencia de una solución exacta para (3.17).

Al igual que para el caso lineal, se tiene un resultado teórico, dado en [28], para saber cuándo un problema inverso no lineal es mal planteado. Veamos:

Proposición 1 : Sea F un operador compacto y continuo y $D(F)$ débilmente cerrado. Asumamos que $F(z^*) = u$ y que $\exists \varepsilon > 0$ tal que

$$F(z) = u_\delta \text{ tiene solución única para toda } u_\delta \in R(F) \cap \beta_\varepsilon(u)$$

donde $\beta_\varepsilon(u)$ es una bola o vecindad con centro en u y radio ε .

Si $\exists \{z_n\} \subset D(F)$ que satisfaga que $\{z_n\} \rightarrow z^*$ débilmente, pero que no converge fuertemente, entonces F^{-1} (definido en $R(F) \cap \beta_\varepsilon(u)$) no es continuo en u .

Observaciones:

1. $R(F)$ es el conjunto imagen o de llegada de F , $R(F) \subset U$.
2. $\{z_n\} \rightarrow z^*$ fuertemente significa que: $\|z_n - z\|_Z \rightarrow 0$.
3. $\{z_n\} \rightarrow z^*$ débilmente significa que: $\lim_{n \rightarrow \infty} G(z_n) = G(z^*)$ para toda funcional G lineal y continua en Z .

Partiremos entonces de que el problema (3.17), considerando u_δ en lugar de u , está mal planteado, o sea que una pequeña perturbación δ en los datos produce grandes errores en la solución, y que por lo tanto se requiere utilizar técnicas de regularización para obtener una solución estable.

Como ya hemos visto, utilizar regularización de Tikhonov significa sustituir el problema (3.17) por el de minimizar una funcional regularizante dada, que en este caso es la siguiente:

$$\min_z \{ \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha \|z - z_0\|^2 \} \quad , \quad z \in D(F), \quad (3.19)$$

donde $\alpha > 0$ es el parámetro de regularización, $u_\delta \in U$ es una perturbación de u y $z_0 \in Z$ es una aproximación conocida de z que toma en cuenta las propiedades de la solución.

La importancia del siguiente resultado está en que nos prueba que el problema (3.19) es estable en el sentido que venimos entendiendo, o sea que la solución depende continuamente de los datos u_δ , lo que se puede ver de la siguiente manera: si usamos datos que estén en una vecindad reducida u_δ de u para resolver (3.19) encontraremos una sucesión de aproximaciones que no se dispersan sino que convergen a un elemento del $D(F)$, por ser éste cerrado.

Proposición 2 : Sea $\alpha > 0$ y sean $\{u_k\}$ y $\{z_k\}$ sucesiones tales que $u_k \rightarrow u_\delta$ y cada z_k es un mínimo de (3.19) con u_k en lugar de u_δ , entonces existe una subsucesión convergente de $\{z_k\}$, y el límite de toda subsucesión convergente es un mínimo de (3.19).

A continuación, otro resultado importante, que nos dice que bajo las mismas condiciones que se imponen para $\alpha(\delta)$ en el caso lineal, las soluciones de (3.19) convergen a una solución de norma z_0 -mínima de (3.17).

Proposición 3 : Sea $u_\delta \in U$ con $\|u - u_\delta\| \leq \delta$ y sea $\alpha(\delta)$ tal que

$$\alpha(\delta) \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad \frac{\delta^2}{\alpha(\delta)} \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad \delta \rightarrow 0$$

entonces toda sucesión $\{z_{\alpha_k}^{\delta_k}\}$ solución de (3.19), donde $\delta_k \rightarrow 0$, $\alpha_k := \alpha(\delta_k)$, tiene una subsucesión convergente; además, el límite de toda subsucesión convergente es una solución de norma z_0 -mínima.

Si también se cumple que la solución de norma z_0 -mínima es única, entonces

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} z_{\alpha(\delta)}^\delta = z^*$$

Una vez obtenido este resultado, se puede probar que, bajo ciertas condiciones [28], si se toma

$$\alpha \sim \delta \tag{3.20}$$

entonces

$$\|z_\alpha^\delta - z^*\| = o(\sqrt{\delta}) \quad \text{y} \quad \|F(z_\alpha^\delta) - u_\delta\| = o(\delta) \tag{3.21}$$

o si se toma

$$\alpha \sim \delta^{\frac{2}{2\mu+1}}, \quad \mu \in \left[\frac{1}{2}, 1\right] \tag{3.22}$$

entonces

$$\|z_\alpha^\delta - z^*\| = o\left(\delta^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}\right) \tag{3.23}$$

Es bueno señalar que en sentido práctico o computacional, por lo general el problema (3.19) no es posible resolverlo de manera exacta, sino que realmente lo que se hace es buscar una solución $z_\alpha^{\delta,\eta}$ que cumpla

$$\|F(z_\alpha^{\delta,\eta}) - u_\delta\|^2 + \alpha \|z_\alpha^{\delta,\eta} - z_0\|^2 \leq \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha \|z - z_0\|^2 + \eta$$

para toda $z \in D(F)$ y $\eta > 0$ “pequeño”. La idea es que en vez de pedir que se satisfaga la condición usual para un mínimo, se da un margen ($\eta > 0$ “pequeño”) que relaje la condición de convergencia.

Como se puede observar y hemos señalado, la funcional dada en (3.19) es un caso particular de funcional regularizante. Nosotros trabajamos sobre el problema general en el que se asume que no se tiene información a priori de la solución, esto es $z_0 = 0$.

Visto lo anterior aparece entonces la pregunta lógica, ¿cómo determinar el valor correcto de α ? A esto nos referimos a continuación .

Estrategias y propuestas para la estimación del parámetro α de regularización

En caso de tomar α según (3.20) o (3.22) se tiene una cota para el error en z_α^δ , pero desafortunadamente las condiciones bajo las que tiene sentido usar esta selección a priori del parámetro, dependen de información acerca de la suavidad de la solución exacta z^* (que en el caso de la identificación de la transmisividad se sabe que es discontinua), lo que hace que estas estrategias sean poco útiles en la práctica. En vista de esto, se han estudiado otros criterios de selección de α denominados a posteriori, como el Principio de Discrepancia de Morozov y el criterio de la L-curva, que veremos en seguida.

Principio de Discrepancia

El principio de Discrepancia de Morozov constituye una estrategia de regularización admisible del tipo Tikhonov, esto es, una vía para el cálculo estable de una solución de un problema inverso mal planteado.

En el caso lineal dado en (3.9), el planteamiento es el siguiente: dada δ , tomar α de manera que z_α^δ satisfaga

$$\|Az_\alpha^\delta - u_\delta\| = \delta \quad (3.24)$$

lo que tiene sentido bajo el supuesto que (3.24) tiene solución única si $\|u_\delta\| > \delta$. El resultado respectivo es el siguiente:

Teorema 6 (Morozov) Sea $A : Z \longrightarrow U$, operador lineal, compacto, inyectivo y tal que la imagen de A sea densa en U . Si $\|u_\delta - u\| \leq \delta < \|u_\delta\|$, para $\delta \in (0, \delta_0)$, entonces la solución de Tikhonov $z_{\alpha(\delta)}^\delta$ que satisface

$$\|Az_{\alpha(\delta)}^\delta - u_\delta\| = \delta, \text{ para } \delta \in (0, \delta_0), \text{ satisface que } z_{\alpha(\delta)}^\delta \longrightarrow z.$$

Si además se sabe que $\|u\| \leq c$, se puede establecer el siguiente estimado sobre el error en $z_{\alpha(\delta)}^\delta$ con respecto a la solución exacta z :

$$- \text{ Si } z = A^{-1}u, \text{ con } \|u\| \leq c, \text{ entonces } \|z_{\alpha(\delta)}^\delta - z\| \leq 2\sqrt{\delta c}.$$

Es importante comentar que existen muchas variantes a la hora de aplicar este principio. Una de ellas es la usada en [28] y que en esencia nos dice que el parámetro de regularización resultante de aplicar las ideas de Morozov es

$$\alpha(\delta) := \sup \{ \alpha > 0 : \|Az_{\alpha(\delta)}^\delta - u_\delta\| \leq r \delta \} \quad (3.25)$$

para cierto $r > 0$, que relaja la necesidad de aproximar al nivel del error δ de los datos.

También en [28] se muestran resultados de convergencia de la estrategia de regularización de Tikhonov, cuando se usa (3.25) como criterio de selección de α .

Para el caso no lineal con α fijo, no siempre existe $z_{\alpha(\delta)}^\delta$ tal que

$$\|F(z_\alpha^\delta) - u_\delta\| = \delta,$$

sin embargo existen algunos resultados, como el siguiente, que establecen condiciones para garantizar la existencia de solución regularizada ([28],[41]).

Proposición 4 : Sea $D(F)$ convexo, sea $u_\delta \in U$ con $\|u - u_\delta\| \leq \delta$ y asumamos que $z_0 \in D(F)$ con $F(z_0) \neq u$. Entonces, el problema

$$\min_z \|z - z_0\| \quad \text{sujeeto a} \quad \|F(z) - u_\delta\| \leq \delta, \quad z \in D(F)$$

tiene una solución z^δ con

$$\|F(z^\delta) - u_\delta\| = \delta$$

, para $\delta > 0$, suficientemente pequeño.

Nosotros proponemos usar (3.25), tomando valores de r resultantes de la experimentación. Así, basándonos en la idea general en la que se sustenta la Regularización de Tikhonov, esto es, suponiendo que el parámetro α de regularización, correspondiente a cada uno de los problemas de optimización de la familia regularizante debe ser cada vez más pequeño para garantizar convergencia, lo que implica obtener la mejor aproximación posible, desarrollamos el algoritmo que llamamos Principio de Discrepancia con Reinicialización (PDR), que usaremos para resolver el problema inverso de estimación de la transmisividad en un problema sintético y otro real.

Algoritmo PDR

0: Datos $(\alpha_0, z_0^{\alpha_0}, r, \delta, \text{MAXITS})$

1: Proceso Iterativo

$$k = 0$$

While $k \leq \text{MAXITS}$

Resolver el Problema de Optimización

$$\min R_\delta^\alpha(z) = \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha_k \|Lz\|$$

tomando $z_k^{\alpha_k}$ como aproximación inicial para obtener

$$z_k^* = \arg \min R_\delta^\alpha(z)$$

if

$$\|F(z_k^*) - u_\delta\|^2 \leq r \delta, \quad \text{STOP}, \quad \alpha^* = \alpha_k, \quad z^* = z_k^*$$

else

$$\begin{aligned}\alpha_k &= \frac{\alpha_k}{10} \\ z_k^{\alpha_k} &= z_k^*\end{aligned}$$

endif
end while

2: Salida (α^* , z^*)

Es importante señalar que para poder aplicar esta técnica es necesario conocer el nivel δ de error en los datos, el cual está dado por la precisión de los instrumentos de medición, y una estimación del parámetro r .

L-curva

Como vimos en la parte relativa al caso lineal $Az = u_\delta$, una formulación clásica para estimar z usando regularización de Tikhonov, plantea estimar la solución de

$$\min_z \|Az - u_\delta\|^2$$

como

$$z_\alpha = \arg \min_z \{ \|Az - u_\delta\|^2 + \alpha \|Lz\|^2 \}$$

donde:

$s(z_\alpha) = \|Lz_\alpha\|^2$ mide el tamaño de la solución regularizada, mientras que

$r(z_\alpha) = \|Az_\alpha - u_\delta\|^2$ mide la aproximación a los datos.

Prácticamente todos los métodos de regularización para calcular soluciones estables a problemas inversos mal planteados, encierran un compromiso entre el tamaño de la solución regularizada y la calidad de la aproximación a los datos para monitorear la propagación del error en la solución, por lo que es conveniente graficar este comportamiento, en función de la variación del

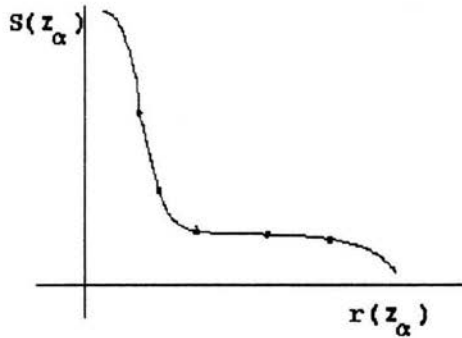


Figura 3.1: Gráfica de la L-curva, donde $s(z_\alpha) = \|Lz_\alpha\|^2$: mide el tamaño de la solución regularizada y $r(z_\alpha) = \|Az_\alpha - u_\delta\|^2$: mide la aproximación a los datos.

parámetro α , como se observa en la **Figura 3.1**. Si el problema está mal planteado, la curva resultante, en escala logarítmica como se sugiere en [37], describe una forma de “L”, de ahí su nombre, para valores de α cercanos a su valor óptimo, y presenta las siguientes características:

- Una “esquina” relativamente fácil de distinguir.
- La “esquina” corresponde al α que produce un equilibrio entre $\|Lz\|^2$ y $\|Az - u_\delta\|^2$.
- Dicha “esquina” coincide con el punto de máxima curvatura.

Además se debe cumplir que

$$r_1 > r_2 > \dots > r_k > r_{k+1} \text{ y } s_1 < s_2 < \dots < s_k < s_{k+1} \quad (3.26)$$

para $r_i = r(z_{\alpha_i})$ y $s_i = s(z_{\alpha_i})$, lo que asegura la convexidad de la curva.

Teniendo en cuenta éstas y otras propiedades es que algunos autores proponen construir la L-curva y elegir α como el valor asociado con la “esquina” de la misma, utilizando distintas heurísticas, como en [12] y [39], entre otros.

Es importante señalar que no siempre se cumple (3.26) por lo que, como se puede ver también en [12] y [39], es necesario eliminar los puntos (r_k, s_k) de la curva para los que $r_{k-1} < r_k$ o $s_{k-1} > s_k$, con el fin de asegurar el buen funcionamiento de los algoritmos propuestos para determinar la esquina de la L-curva.

La idea de usar la L-curva para estimar el valor óptimo del parámetro α también se puede aplicar al caso no lineal, resolviendo el problema de optimización

$$\min_z F_\alpha(z), \quad F_\alpha(z) = \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha S(z) \quad , \quad z \in D(F) \quad (3.27)$$

para una cantidad suficiente de valores de α que permita visualizar con claridad la forma de la L-curva en una vecindad del α^* óptimo. Ahora bien, resulta muy costoso resolver dicho problema la cantidad de veces necesarias para construir la L-curva, por lo que trabajamos sobre una alternativa que nos permitiera resolver (3.27) el menor número de veces posible, vía algún criterio, para detectar la esquina y detener a tiempo la búsqueda de α^* .

Partiendo de tomar una sucesión de valores de α tales que $\alpha_0 > \alpha_1 > \alpha_2 > \dots > \alpha_k$, para los que sabemos que se cumple la condición (3.26), decidimos modelar la L-curva en una vecindad de α^* mediante una curva simétrica con respecto a una recta de pendiente 1, esto es, de la forma $y = x - c$, $c > 0$. Bajo este supuesto, propusimos detener el proceso de búsqueda del α -óptimo cuando la pendiente formada por dos puntos consecutivos (r_k, s_k) y (r_{k+1}, s_{k+1}) fuera mayor o igual que 1, en valor absoluto, y hacer $\alpha^* = \alpha_k$ (véase **Figura 3.2**).

Ahora bien, al aplicar esta idea en la práctica no se tuvo éxito para la totalidad de los experimentos realizados, pues para algunos casos que se pueden ver en el capítulo de experimentos numéricos, las pendientes entre los primeros puntos (de derecha a izquierda) son mayores que 1 en valor absoluto, por lo que el análisis de dichos resultados nos sugirió introducir un factor de escalamiento en la pendiente, que nos permitió establecer un algoritmo, al que

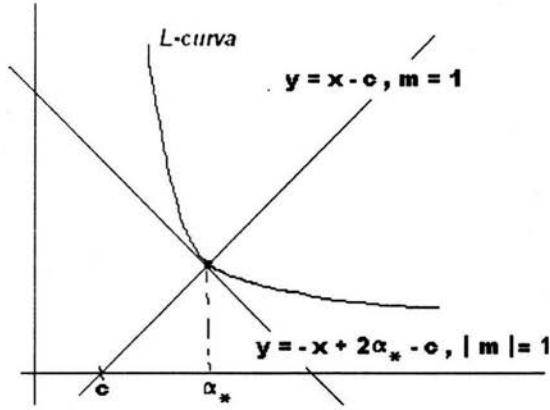


Figura 3.2: Idea geométrica del algoritmo CPL-c, que supone que en la esquina de la L-curva, ésta tiene un comportamiento simétrico con respecto a una recta de pendiente igual a 1.

llamamos CPL-c (Comparación de pendientes), cuya implementación resultó exitosa en todos los casos tratados; sin que ello signifique que pretendamos postularlo como un procedimiento de carácter general.

Algoritmo CPL-c

0: Datos (α_0, α_1 (valores iniciales de α), MAXITS)

1: Usar α_0, α_1 para resolver el Problema de Optimización

$$\min R_\delta^\alpha(z) = \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha S(z)$$

para obtener

$$(s_0, r_0), (s_1, r_1)$$

donde

$$s_k = \|F(z_k^*) - u_\delta\|^2, \quad r_k = S(z_k^*)$$

if

$$m_1 = \frac{(\log(r_1) - \log(r_0))}{(\log(s_1) - \log(s_0))} > 1$$
then $m_1 = fact * m_1$ tal que $m_1 < 1$
else $fact = 1.$
endif

2: Proceso iterativo

$k = 2$

While $k \leq MAXITS$

$$\alpha_k = \frac{\alpha_{k-1}}{10}$$

Resolver el Problema de Optimización

$$\min R_\delta^\alpha(z) = \|F(z) - u_\delta\|^2 + \alpha S(z)$$

para obtener

$$(s_k, r_k)$$

$$m_k = fact * \frac{(\log(r_k) - \log(r_{k-1}))}{(\log(s_k) - \log(s_{k-1}))}$$

if

$$m_k \geq 1, \text{ STOP, } \alpha^* = \alpha_{k-1}, z^* = z_{k-1}$$

endif

end while

3: Salida (α^*, z^*)

Es importante notar que para aplicar este algoritmo no se requiere conocer δ ni ningún otro parámetro adicional, sólo los valores de s_k y r_k (usando la

notación del esquema), que son resultados naturales al resolver el problema de optimización correspondiente.

Queremos enfatizar el hecho de que siempre es posible, sin restricción alguna, obtener puntos sobre la L-curva y a partir de ellos determinar el α^* correspondiente a la esquina buscada. Ahora, si resulta que nuestro algoritmo funciona (como sucedió en nuestro caso), es posible obtener una reducción significativa del esfuerzo computacional realizado en la estimación del α óptimo, lo que mostraremos en el capítulo de resultados numéricos para los casos tratados.

Curvatura máxima: Con el propósito de contar con otra alternativa que nos permitiera apoyar la validez de los resultados obtenidos con el algoritmo **CPL-c** y sabiendo que el α^* óptimo está asociado con la esquina de la L-curva, esto es, con el punto de mayor curvatura de la curva $L(s(\alpha), r(\alpha))$, donde $s(\alpha) = \|Az_\alpha - u_\delta\|^2$ y $r(\alpha) = \|Lz_\alpha\|^2$, propusimos un algoritmo (que llamaremos **CM**), basado en el siguiente esquema para estimar α^* :

1.- Dados tres puntos $p_i(s_i, r_i)$, $p_{i+1}(s_{i+1}, r_{i+1})$ y $p_{i+2}(s_{i+2}, r_{i+2})$, sobre la L-curva, se tiene que el polinomio de interpolación que pasa por p_i, p_{i+1}, p_{i+2} puede escribirse en la forma de Newton como

$$P(s) = f[s_i] + f[s_i, s_{i+1}](s - s_i) + f[s_i, s_{i+1}, s_{i+2}](s - s_i)(s - s_{i+1})$$

donde

$$\begin{aligned} f[s_i] &= r_i \\ f[s_i, s_{i+1}] &= \frac{r_{i+1} - r_i}{s_{i+1} - s_i} \\ f[s_i, s_{i+1}, s_{i+2}] &= \frac{f[s_{i+1}, s_{i+2}] - f[s_i, s_{i+1}]}{s_{i+2} - s_i} \\ &= \frac{\frac{r_{i+2} - r_{i+1}}{s_{i+2} - s_{i+1}} - \frac{r_{i+1} - r_i}{s_{i+1} - s_i}}{s_{i+2} - s_i} \end{aligned}$$

2. - La fórmula para la curvatura de $P(s)$ en s_{i+1} está dada por

$$K_{i+1} = \frac{|P''(s_{i+1})|}{[1 + (P'(s_{i+1}))^2]^{\frac{3}{2}}}$$

de donde, tomando la primera y segunda derivadas de P , resulta

$$\begin{aligned} P'(s_{i+1}) &= f[s_i, s_{i+1}] - f[s_i, s_{i+1}, s_{i+2}](s_{i+1} + s_i) + 2f[s_i, s_{i+1}, s_{i+2}]s_{i+1} \\ P''(s_{i+1}) &= 2f[s_i, s_{i+1}, s_{i+2}] \end{aligned}$$

3. - Si tenemos los puntos p_1, \dots, p_n , $n \geq 3$, es posible, tomando tres de ellos a la vez, ir estimando la curvatura de la L-curva correspondiente a los puntos p_2, \dots, p_{n-1} de manera eficiente.

Los resultados que permiten comparar el algoritmo **CPL-c** con esta propuesta para calcular la curvatura, los comentamos en el próximo capítulo.

3.1.2 Regularización vía Optimización Multiescala

Es importante comenzar esta sección señalando que, como T y S varían en el espacio, lo ideal sería tener sus valores en una malla fina, por lo que se hace necesario parametrizar, a pesar de estar trabajando en nuestro caso con un problema heterogéneo con valores de los parámetros casi constantes por zonas.

Se trata de una técnica de regularización, cuya idea central consiste en construir una sucesión de aproximaciones discretas de T y/o S en subespacios de dimensión finita definidos a partir de discretizaciones cada vez más finas, de la región del acuífero, iniciando con una discretización gruesa hasta llegar a una óptima, la cual no debe ser más fina que la utilizada para resolver el problema directo. El número de discretizaciones juega en este caso el papel de parámetro de regularización.

Para fijar ideas, consideraremos $(x_i, y_j) \in [0, 1] \times [0, 1]$, t un cierto tiempo y δ_{ij} representa el error de medición en (x_i, y_j) .

Si ahora hacemos

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, \quad i = 0, \dots, Nx; \quad \Delta x = \frac{1}{Nx} \\ y_j &= j\Delta y, \quad j = 0, \dots, Ny; \quad \Delta y = \frac{1}{Ny} \end{aligned}$$

y consideramos sólo la estimación de \tilde{T} , resulta que (3.7) toma la forma siguiente:

$$\min_{T_\Delta} F_\Delta(T_\Delta), \quad F_\Delta(T_\Delta) = \left\| (\Psi \circ \Phi)(T_\Delta) - \tilde{h}_\Delta \right\|^2, \quad (3.28)$$

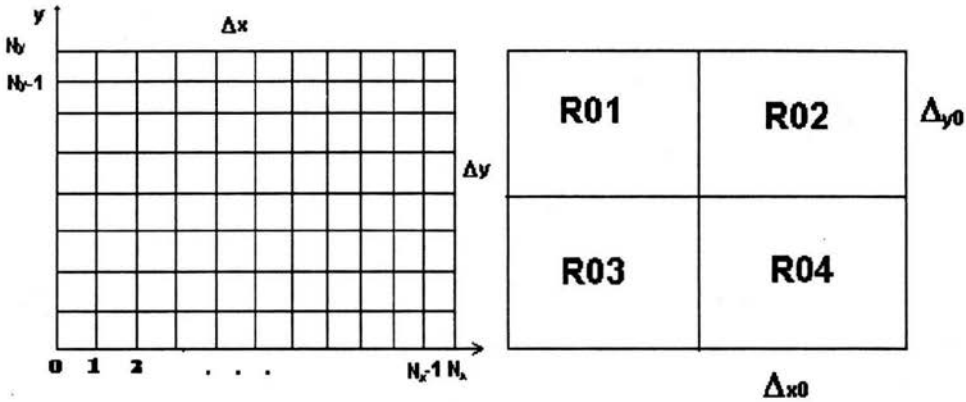


Figura 3.3: Malla fina, en la que se resuelve el problema directo o ecuación de flujo, y subespacio inicial W_0 donde comienza el proceso de Optimización Multi-escala.

donde Δ es el nivel de discretización correspondiente a Δx y Δy .

Estamos ahora entonces en un problema de optimización en dimensión finita, y la cuestión es determinar T_{Δ}^+ , con

$$T_{\Delta}^+ \equiv T_{ij}^+ = T^+(x_i, y_j) ,$$

solución generalizada discreta de (3.28).

Consideraremos

$$T(x, y) \in L^2(\mathfrak{R}) , \quad \mathfrak{R} = [a, b] \times [c, d]$$

y lo que nos interesa es conocer $T(x, y)$ en los puntos (x_i, y_j) de la malla dada en la **Figura 3.3** (izquierda).

Esto puede interpretarse como, determinar T_{Δ} en un subespacio de dimensión finita $W \subset L^2(\mathfrak{R})$ definido por la discretización de \mathfrak{R} .

Se tiene que

$$\dim W = (N_x + 1) * (N_y + 1) .$$

Hagamos $\dim W = N_w$ y sea

$$\{w_{ij}\} \quad i = 0, 1, \dots, Nx; j = 0, 1, \dots, Ny \quad (3.29)$$

una base de W ; de esto resulta

$$T_{\Delta}(x, y) = \sum \alpha_{ij} w_{ij}, \quad (x, y) \in \mathfrak{R},$$

y entonces resolver (3.28) equivale a determinar la matriz de coeficientes

$$A = (\alpha_{ij})$$

tal que (3.28) alcanza el mínimo con respecto a la base (3.29). Es importante notar que la elección de la base es un punto delicado pues para bases diferentes pueden obtenerse resultados distintos [21].

Por supuesto, con los elementos dados podría procederse a la estimación de T_{Δ}^+ directamente; sin embargo, lo que se propone es una estrategia distinta, llamada **optimización multiescala**, cuya adopción produce resultados superiores a los obtenidos al resolver el problema de estimación de parámetros directamente en el subespacio W . Además, mostraremos aquí, como un punto importante, el efecto de **convexificación** de los problemas resultantes de optimización.

Parametrización multiescala

En términos generales, la idea consiste en construir una serie de subespacios

$$W_0, W_1, \dots, W_{NE}$$

de W tales que

$$W_{k-1} \subset W_k \quad y \quad W_{NE} = W,$$

donde NE es el valor asociado a la discretización más fina, que en nuestro caso se determinó considerando aquella discretización con la que se obtiene la mejor solución del problema de optimización, de tal forma que a partir de ella cualquier refinamiento produce un empeoramiento de la misma.

Una propuesta es partir de un W_0 dado por la discretización de la **Figura 3.3** (derecha), y proceder por bipartición de cada uno de los rectángulos \mathfrak{R}_{ij} , para obtener el correspondiente W_1 , y así sucesivamente. En general,

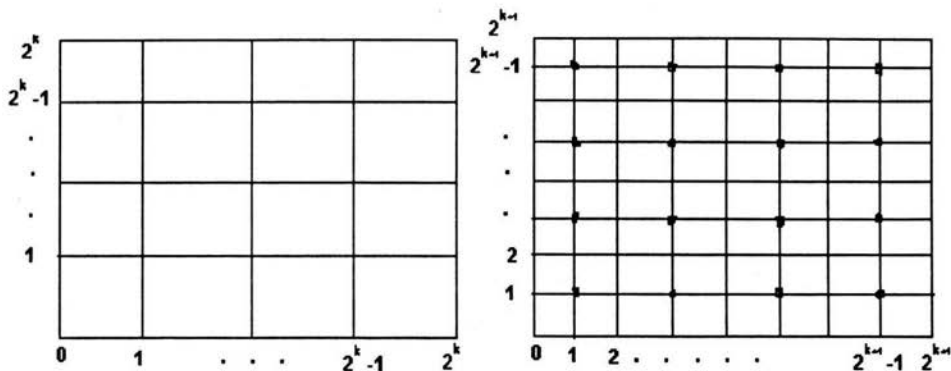


Figura 3.4: Subespacios W_{k-1} y W_k . Este último se genera dentro del proceso de Optimización Multiescala, como resultado de la bipartición de la malla que define al subespacio W_{k-1} .

si se tiene W_{k-1} que corresponde a la discretización dada en la **Figura 3.4** (izquierda), el paso a W_k se hace agregando a la malla para W_{k-1} los puntos marcados en negritas, y que se muestran en la **Figura 3.4** (derecha), en la discretización correspondiente a W_k .

Si llamamos V_k al subespacio generado a partir de estos nuevos puntos agregados a W_{k-1} para llegar a W_k , tendremos que

$$W_k = W_{k-1} \oplus V_k \quad , \quad W_{k-1} \subset W_k$$

Se tiene que

$$\dim W_k = (2^{k+1} + 1) * (2^{k+1} + 1)$$

y como base para este subespacio se propone elegir funciones

$$w_{ij}, i = 1, \dots, 2^{k+1} + 1 ; j = 1, \dots, 2^{k+1} + 1 \quad (3.30)$$

continuas y bilineales por pedazos sobre cada uno de los rectángulos \mathfrak{R}_{ij}^k .

Por supuesto, como $W_{k-1} \subset W_k$, lo natural para obtener la base (3.30) es agregar a la de W_{k-1} , las w_{ij} correspondientes al subespacio V_k . Resulta fácil ver que V_k es un espacio suplementario a W_{k-1} en W_k , ya que:

- Por construcción, se tiene

$$V_k \subset W_k$$

- Dada $T_{\Delta k}^W \in W_k$, si consideramos que ésta coincide con $T_{\Delta k-1}^W \in W_{k-1}$ en todos los puntos de la malla correspondiente a W_{k-1} y hacemos

$$T_{\Delta k}^V = T_{\Delta k}^W - T_{\Delta k-1}^W$$

Por construcción se tiene que $T_{\Delta k}^V \in W_k$, y si $T_{\Delta k}^V$ se hace cero en todos los nodos correspondientes a W_k que no están en V_k , entonces $T_{\Delta k}^V \in V_k$, de donde

$$T_{\Delta k}^W = T_{\Delta k-1}^W + T_{\Delta k}^V \quad (3.31)$$

con

$$T_{\Delta k-1}^W \in W_{k-1} \quad \text{y} \quad T_{\Delta k}^V \in V_k$$

- Veamos ahora que la descomposición (3.31) es única. Para ello, supongamos que

$$T_{\Delta k}^W = T_{\Delta k-1}^W + T_{\Delta k}^V = (T_{\Delta k-1}^W)^1 + (T_{\Delta k}^V)^1, \quad \text{con}$$

$$T_{\Delta k-1}^W, (T_{\Delta k-1}^W)^1 \in W_{k-1} \quad \text{y} \quad T_{\Delta k}^V, (T_{\Delta k}^V)^1 \in V_k.$$

Ahora, dado cualquier punto o nodo $p \in W_{k-1}$ se tiene que

$$T_{\Delta k-1}^W(p) + T_{\Delta k}^V(p) = (T_{\Delta k-1}^W)^1(p) + (T_{\Delta k}^V)^1(p),$$

pero, por construcción, $T_{\Delta k}^V$ y $(T_{\Delta k}^V)^1$, evaluados en los puntos de la malla W_{k-1} son iguales a cero, esto es,

$$T_{\Delta k}^V(p) = (T_{\Delta k}^V)^1(p) = 0, \quad p \in W_{k-1},$$

de donde, $T_{\Delta k-1}^W(p) = (T_{\Delta k-1}^W)^1(p)$ para todos los nodos de W_{k-1} , de donde, $T_{\Delta k-1}^W = (T_{\Delta k-1}^W)^1$, y de esto se sigue finalmente $T_{\Delta k}^V = (T_{\Delta k}^V)^1$, lo que completa la demostración de que V_k es suplementario de W_{k-1} en W_k .

El proceso descrito anteriormente se repite hasta arribar a un subespacio W_{NE} , tal que $W_{NE} = W$, esto es, se tiene $W_0 \subset W_1 \subset \dots \subset W_{NE} = W$ y como $W_k = W_{k-1} \oplus V_k$ resulta

$$\begin{aligned} W_1 &= W_0 \oplus V_1 \\ W_2 &= W_1 \oplus V_2 = W_0 \oplus V_1 \oplus V_2 \\ &\vdots \\ W_{NE} &= W_0 \oplus V_1 \oplus \dots \oplus V_{NE} = W \end{aligned}$$

Así, $B = \{w_{ij}\}$ base de W será la unión de las bases de W_0, V_1, \dots, V_{NE} ; esto es

$$B = \{w_{ij}^k \mid k = 0, 1, \dots, NE \ ; \ i = 0, 1, \dots, 2^{k+1}, j = 0, 1, \dots, 2^{k+1} \}$$

Existen distintas opciones para la elección de B ; por nuestra parte hemos elegido:

$$w_{ij}(x, y) = \begin{cases} \left[\frac{x}{h} - (i-1) \right] \left[\frac{y}{h} - (j-1) \right] & \text{si } i-1 \leq \frac{x}{h} \leq i, j-1 \leq \frac{y}{h} \leq j \\ \left[\frac{x}{h} - (i-1) \right] \left[(j+1) - \frac{y}{h} \right] & \text{si } i-1 \leq \frac{x}{h} \leq i, j \leq \frac{y}{h} \leq j+1 \\ \left[(i+1) - \frac{x}{h} \right] \left[\frac{y}{h} - (j-1) \right] & \text{si } i \leq \frac{x}{h} \leq i+1, j-1 \leq \frac{y}{h} \leq j \\ \left[(i+1) - \frac{x}{h} \right] \left[(j+1) - \frac{y}{h} \right] & \text{si } i \leq \frac{x}{h} \leq i+1, j \leq \frac{y}{h} \leq j+1 \end{cases}$$

Proceso de optimización con base en multiescala.

Partiendo de lo anterior, la idea consiste en resolver la siguiente colección de problemas:

$$\min_{T_{\Delta k}} F_{\Delta}(T_{\Delta k}) \ , \ T_{\Delta k} \in W_k \quad , \ 0 \leq k \leq NE \ ,$$

donde, como hemos visto, la dimensión de cada nuevo problema va creciendo, dado que $W_{k-1} \subset W_k$. En términos algorítmicos el procedimiento es el siguiente:

- Para $k = 0$, se calcula la solución óptima, $T_{\Delta 0}^+$, de

$$\min_{T_{\Delta 0}} F_{\Delta}(T_{\Delta 0})$$

partiendo de una aproximación inicial

$$A_0 = (\alpha_{ij}^0), i = 0, \dots, 2^k, j = 0, \dots, 2^k$$

arbitraria, donde, recordemos, $T_{\Delta 0}^0 = \sum \alpha_{ij}^0 w_{ij}$.

- Una vez calculada $T_{\Delta k-1}^+$, se resuelve el correspondiente

$$\min_{T_{\Delta k}} F_{\Delta}(T_{\Delta k}), \quad 1 \leq k \leq NE,$$

usando como condición inicial los α_{ij}^{k-1} obtenidos como resultado de la optimización $k-1$, más los correspondientes a V_k de la descomposición

$$W_k = W_{k-1} \oplus V_k$$

calculados por interpolación a partir de $T_{\Delta k-1}^+$, pues según vimos antes

$$T_{\Delta k}^W = T_{\Delta k-1}^W - T_{\Delta k}^V$$

con

$$T_{\Delta k-1}^W \in W_{k-1} \quad \text{y} \quad T_{\Delta k}^V \in V_k$$

En los experimentos numéricos que se muestran en el capítulo 5, se tomó $Nx = Ny = 2$, de donde $Nx + 1 = Ny + 1 = 3$ y la dimensión de $W_0 = (Nx + 1)(Ny + 1) = 9$, dim. $W_1 = 25$, dim. $W_2 = 81$ y dim. $W_3 = 289 = 17 \times 17$.

Es importante destacar que, dentro del proceso de minimización de $F_{\Delta}(T_{\Delta k})$ para cualquier k , cada vez que se requiere la evaluación de F_{Δ} en una $T_{\Delta k}$ dada hay que resolver la ecuación diferencial (2.13).

Dos propiedades importantes que destacan en la Optimización Multiescala y que se pueden observar en el capítulo de experimentación numérica son:

- El proceso de cálculo es muy veloz para las primeras mallas debido a que la dimensión de los espacios es pequeña y la función objetivo resultante es suave y convexa (solución única), lo que permite obtener una buena aproximación con un bajo costo computacional.
- Paradójicamente, comenzar con una discretización gruesa permite, en casos como el nuestro, lograr un efecto de **convexificación** del problema de optimización, de manera que es posible obtener el mismo mínimo a partir de distintas aproximaciones iniciales, cosa que mostraremos para nuestro ejemplo, en el capítulo de resultados computacionales.

Capítulo 4

Métodos de Optimización para Estimar la Transmisividad Hidráulica

Como ya hemos visto, en nuestro trabajo planteamos estimar la solución del problema inverso de estimación de parámetros resolviendo el problema de optimización

$$\min_{T,S} F(T,S), \quad F(T,S) = \left\| (\Psi \circ \Phi)(T,S) - \tilde{h} \right\|_2^2.$$

Ahora, teniendo en cuenta que nuestro objetivo principal es la estimación de la transmisividad hidráulica, supondremos conocida S , lo que da lugar a la nueva formulación

$$\min_T F(T), \quad F(T) = \left\| (\Psi \circ \Phi)(T) - \tilde{h} \right\|_2^2 \quad (4.1)$$

que es un problema de optimización con las siguientes características:

- Función objetivo de mínimos cuadrados no lineal.
- Restricciones de acotación sobre T , dadas por las condiciones físicas del problema; esto es $T \in \Omega_d = \{T \in \mathbb{R}^n : l \leq T \leq u\}$.
- Comportamiento inestable de la solución, heredado del mal planteamiento del problema inverso original.

- Posiblemente grandes dimensiones, debido al nivel de discretización de la región Ω_d .

También, con respecto al asunto del mal comportamiento de la solución de (4.1), se han discutido dos alternativas (Regularización de Tikhonov y Multiescala) para su resolución de manera estable, pero, independientemente de cuál de ellas se elija, resulta indispensable tener un conocimiento amplio y sólido del problema de optimización local

$$\min_{x \in R^n} F(x), \quad F : R^n \rightarrow R, \quad (4.2)$$

pues de ello depende en buena medida la resolución exitosa de nuestro problema central: la estimación de \tilde{T} . Al tratamiento de esta cuestión dedicaremos lo que sigue.

4.1 El cálculo de mínimos locales

Una metodología de carácter general para resolver (4.2) es la siguiente: si llamamos a la solución buscada x^* ($x^* = \arg \min F(x), x \in R^n$), un procedimiento usual para calcularla es: dada x_0 , aproximación inicial a x^* , construir una sucesión $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ de aproximaciones, con la propiedad esperada de que $F(x_{k+1}) < F(x_k)$ y que $x_n \rightarrow x^*$ cuando $n \rightarrow \infty$. En el marco de este esquema general, las estrategias adoptadas por nosotros para el cálculo de la sucesión x_1, x_2, \dots , tienen como sustento al conocido

4.1.1 Método de Newton

La idea central de éste puede resumirse como sigue: dada x_k , construir la aproximación de Taylor:

$$m_k(d) \equiv F(x_k + d) \approx F(x_k) + d^t \nabla F(x_k) + \frac{1}{2} d^t \nabla^2 F(x_k) d$$

Hecho esto, se resuelve

$$\min_d m_k(d)$$

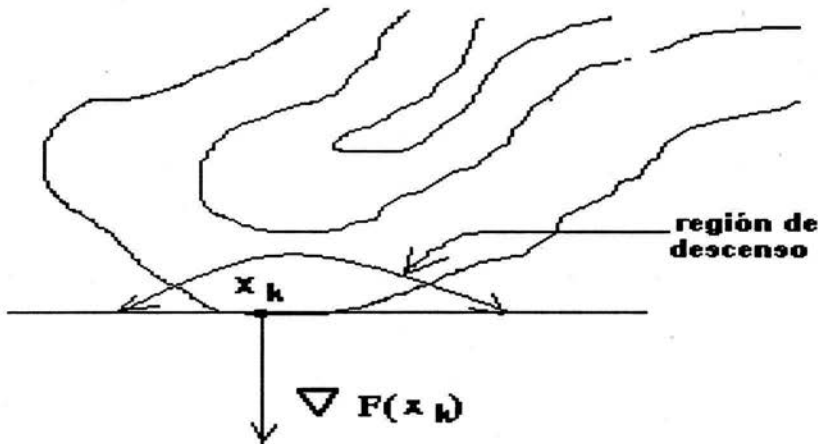


Figura 4.1: Gráficas de las curvas de nivel de F donde además se muestra la región de descenso.

cuya solución, siguiendo el procedimiento usual de igualar a cero la derivada de $m_k(d)$, puede calcularse resolviendo el sistema

$$\nabla^2 F(x_k) d = -g_k, \text{ o } H_k d = -g_k \quad (4.3)$$

donde $H_k \equiv \nabla^2 F(x_k)$ y $g_k \equiv \nabla F(x_k)$.

Si llamamos d_k a la solución del sistema de ecuaciones lineales (4.3), entonces se hace

$$x_{k+1} = x_k + d_k$$

con la garantía de que x_{k+1} satisfará la propiedad deseada, $F(x_{k+1}) < F(x_k)$ si d_k es una dirección de descenso (**Figura 4.1**), lo que se garantiza con la hipótesis de que H_k es definida positiva ($H_k > 0$), ya que en este caso, $g_k^t d_k = -g_k^t H_k^{-1} g_k < 0$, condición para que d_k sea de descenso.

El método de Newton es una especie de paradigma en el contexto que hemos descrito para el problema (4.2), debido fundamentalmente a que cuando converge, lo hace cuadráticamente. El resultado central al respecto es:

Teorema 7 Si F es dos veces diferenciable y si:

i) H_k es Lipschitz continua en una vecindad abierta de x^* ,

ii) $\nabla F(x^*) = 0$,

iii) $\nabla^2 F(x^*) > 0$ y

iv) x_0 está en una vecindad (que depende del problema) de x^* ,

entonces la iteración $x_{k+1} = x_k + d_k$ generada por el método de Newton converge a x^* con velocidad de convergencia cuadrática.

En términos prácticos el resultado anterior nos dice que si en la iteración k -ésima se sabe que x_k tiene m cifras correctas de la solución x^* , entonces x_{k+1} tendrá $2m$, y así sucesivamente.

Como se observa, un punto importante es que cada nueva aproximación de x^* se construye con base en el vector d_k , resultado de minimizar el modelo $m_k(d)$, y se sabe [23, 49] que en general m_k es una buena representación de F sólo en una pequeña vecindad de x_k , razón por la cual sólo es posible garantizar convergencia de Newton en una vecindad restringida de x^* , pues fuera de ella la dirección calculada d_k puede no ser de descenso al no cumplirse la condición $H_k > 0$, y también es posible enfrentarse a dificultades prácticas tales como que la matriz H_k o el gradiente ∇_k no estén disponibles o resulte muy complicada y/o costosa su evaluación. Lo bueno del asunto consiste en que se trata de objeciones superables mediante el uso de variantes sustentadas en Newton que permiten obtener convergencia "global", o sea desde cualquier punto inicial, bajo ciertas condiciones. Describimos a continuación dos alternativas en este sentido.

Newton global con búsqueda en la línea

Recordemos que la dirección de Newton se obtiene de resolver el sistema

$$H_k d = -g_k$$

de donde la solución tiene la forma

$$d_k = -H_k^{-1} g_k$$

Si suponemos H_k disponible, un procedimiento para calcular x_{k+1} a partir de x_k , en el contexto de búsqueda lineal, es:

- Determinar d_k como

$$d_k = \begin{cases} \text{dirección de Newton} & \text{si } H_k \text{ es definida positiva} \\ -\tilde{H}_k^{-1}g_k & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde $\tilde{H}_k = H_k + \mu_k I$, con μ_k elegida de tal forma que $\tilde{H}_k > 0$.

- Calcular α_k que satisfaga las condiciones

$$F(x_k + \alpha_k d_k) \leq F(x_k) + \lambda \alpha_k g_k^T d_k, \lambda \in (0, 1) \quad (4.4)$$

y

$$\nabla^T F(x_k + \alpha_k d_k) d_k \geq \beta g_k^T d_k, \beta \in (\lambda, 1) \quad (4.5)$$

- Hacer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

Observación: La aparición de α_k en esta nueva iteración nos dice cuánto debe avanzarse en la dirección d_k para obtener x_{k+1} , que es la idea básica de los métodos llamados de búsqueda en la línea.

La condición (4.4) establece que el α_k de dicha búsqueda debe garantizar que se dé un decrecimiento suficiente de la función objetivo F , para algún $\lambda \in (0, 1)$. Esta desigualdad se conoce también como condición de Armijo y puede interpretarse geométricamente como se ve en la **Figura 4.2**.

Ahora bien, dado que (4.4) sólo se refiere al decrecimiento de F , es necesario agregar la condición (4.5) con el fin de garantizar también que el paso de x_k a x_{k+1} no sea demasiado pequeño. Como se observa, la parte izquierda de (4.5) nos da la derivada $F'(x_k)$ dado que x_k y d_k están fijos, por lo que esta condición exige que esta derivada sea al menos β veces mayor que $F'(0)$ (ver **Figura 4.3**)

Las desigualdades (4.4) y (4.5) se conocen como **condiciones de Wolfe**.

En [23] se prueban resultados que establecen convergencia superlineal para el esquema anterior, asumiendo ciertas condiciones sobre F y H .

Por otra parte, si la situación es tal que H_k no está disponible, nos ubicamos en el terreno de los métodos tipo **Quasi-Newton**, donde la idea es construir una aproximación que llamaremos $B_k \approx H_k$ usando información de los

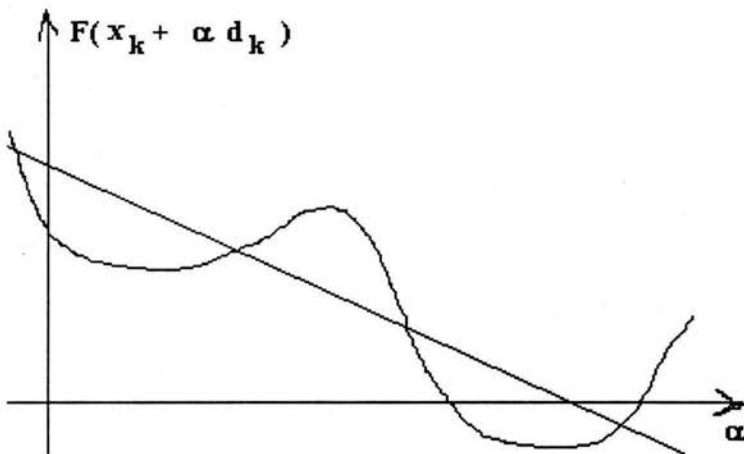


Figura 4.2: Representación geométrica de la Condición de Armijo, la cual establece que el α_k de la búsqueda lineal debe garantizar que se dé un decrecimiento suficiente de la función objetivo F , para algún $\lambda \in (0, 1)$.

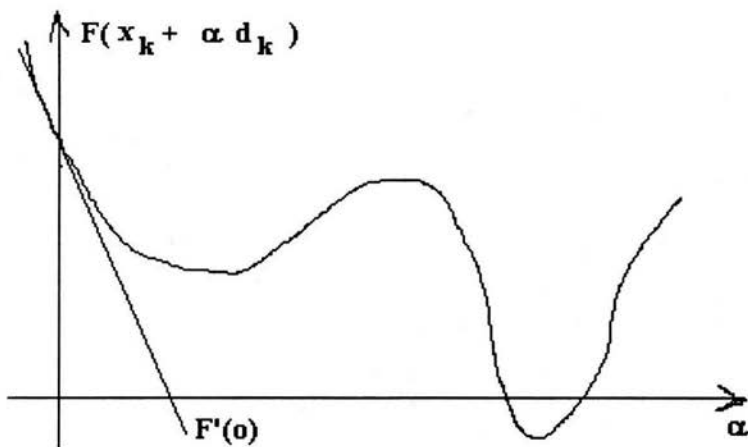


Figura 4.3: La Condición (4.5) garantiza que el paso de x_k a x_{k+1} no sea demasiado pequeño.

gradientes de F . Para ello se parte de la expresión

$$\nabla F(x+d) = \nabla F(x) + \int_0^1 \nabla^2 F(x+td) d \, dt, \text{ con } t \in (0,1)$$

donde, sumando y restando $\nabla^2 F(x) d$ se obtiene

$$\nabla F(x+d) = \nabla F(x) + \nabla^2 F(x) d + \int_0^1 [\nabla^2 F(x+td) - \nabla^2 F(x)] d \, dt$$

Ahora, asumiendo que ∇F es continua, la magnitud del término integral es de orden $o(\|d\|)$, de donde, si se hace $x = x_k$ y $d = x_{k+1} - x_k$, resulta

$$g_{k+1} = g_k + H_{k+1}d + o(\|d\|)$$

y de aquí, suponiendo que $x_k \approx x^* \approx x_{k+1}$ de tal forma que $H > 0$, el término $o(\|d\|)$ es eventualmente dominado por $H_{k+1}d$, dando por resultado

$$H_{k+1}d \approx g_{k+1} - g_k \tag{4.6}$$

y la propuesta entonces es elegir la aproximación B_{k+1} de la Hessiana de tal forma que satisfaga (4.6), esto es, se pide que

$$B_{k+1}d_k = y_k, \text{ con } y_k = g_{k+1} - g_k$$

Se pide además que B_{k+1} sea simétrica y B_0 se da por el usuario.

Una propuesta para B_{k+1} debida a Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno (BFGS) es hacer

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k d_k d_k^t B_k}{d_k^t B_k d_k} + \frac{y_k y_k^t}{y_k^t d_k}$$

Siguiendo estas ideas, se puede elegir también una aproximación de la inversa de la Hessiana, como se observa en [23]. Si denotamos como \tilde{B}_{k+1} dicha aproximación en la iteración $k+1$, resulta que no es necesario formar esta matriz explícitamente, sino sólo hacer el producto $\tilde{B}_{k+1} \nabla_k$, lo que puede hacerse mediante una sucesión de productos entre g_k y los vectores $s_i = x_{i+1} - x_i$, $y_i = g_{i+1} - g_i$ para $i = 0, 1, \dots, k$. Veamos esto con más detalle:

Memoria Limitada

Como aparece en [48], \tilde{B}_{k+1} se puede escribir como:

$$\tilde{B}_{k+1} = V_k^t \tilde{B}_k V_k + \rho_k s_k s_k^t \quad (4.7)$$

donde

$$\rho_k = \frac{1}{y_k^t s_k}, \quad V_k = I - \rho_k y_k s_k^t. \quad (4.8)$$

Sin embargo, esto genera un problema serio cuando la dimensión del problema es muy grande ya que en la k -ésima iteración se necesita tener almacenados $2k$ vectores de R^n para aplicar (4.7). Con el fin entonces de trabajar estos métodos buscando ahorro de memoria se han desarrollado los llamados de **memoria limitada** en los que se fija de entrada una cota para la cantidad de pares de vectores s_i , y_i que se van a considerar en las actualizaciones. Si $m \ll n$ es el número máximo de estos pares que se van a almacenar, entonces mientras $k+1 \leq m$ no hay ningún cambio en (4.7), lo cual se ve mejor si se toma el desarrollo:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{k+1} &= V_k^t V_{k-1}^t \cdots V_0^t \tilde{B}_0 V_0 \cdots V_{k-1} V_k \\ &\quad + V_k^t \cdots V_1^t \rho_0 s_0 s_0^t V_1 \cdots V_k \\ &\quad \vdots \\ &\quad + V_k^t V_{k-1}^t \rho_{k-2} s_{k-2} s_{k-2}^t V_{k-1} V_k \\ &\quad + \rho_k s_k s_k^t. \end{aligned}$$

Cuando $k+1 > m$ se desecha la información de s_0 y y_0 y se guarda en su lugar la de s_{k+1} y y_{k+1} , y así sucesivamente se va eliminando la información más vieja y se dejan los m pares de vectores previos a la iteración actual, quedando entonces:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{k+1} &= V_k^t V_{k-1}^t \cdots V_{k-m+1}^t \tilde{B}_0 V_{k-m+1} \cdots V_{k-1} V_k \\ &\quad + V_k^t \cdots V_{k-m+2}^t \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^t V_{k-m+2} \cdots V_k \\ &\quad \vdots \\ &\quad + V_k^t \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^t V_k \\ &\quad + \rho_k s_k s_k^t. \end{aligned}$$

Según se observa, es muy importante la selección de la aproximación inicial \tilde{B}_0 . En muchos casos se usa la matriz identidad y en otros ciertos escalamientos de dicha matriz. En [49, 67] se discute la implementación computacional

de estas ideas considerando el caso $x \in \Omega = \{x \in R^n : l \leq x \leq u\}$. Nosotros usaremos este método local y su implementación computacional dada en [43].

Newton global con región de confianza

Como ya vimos, la convergencia del método de Newton sólo se garantiza para una vecindad de $x^* = \arg \min F(x)$ y la razón de esto es que la aproximación cuadrática (4.3) de F en x_k puede no ser adecuada si x_k está más allá de la región de convergencia, por lo que es necesario modificar la idea básica para crear una variante que permita generar una sucesión convergente a pesar de no cumplir la hipótesis de que x_0 esté "suficientemente" cercana a x^* . En este contexto, la propuesta que aquí trataremos puede resumirse como sigue: dados x_k y $\delta_k > 0$:

i) Se construye el modelo

$$m_k(d) \equiv F(x_k + d) \approx F(x_k) + d^t \nabla F(x_k) + \frac{1}{2} d^t B_k d \quad (4.9)$$

donde B_k es la matriz Hessiana de F o una aproximación de ella.

ii) Resolver

$$\min_d m_k(d), \text{ sujeto a } \|d\| \leq \delta_k \quad (4.10)$$

iii) Si d_k es la solución de (4.10), se toma entonces $x_{k+1} = x_k + d_k$.

Analícemos ahora este esquema con cuidado. De entrada vemos que ahora la búsqueda del mínimo de m_k está sujeta a la restricción $\|d\| \leq \delta_k$, esto es, se restringe a una región o vecindad $\nu_k = \nu(x_k, \delta_k)$ (llamada de confianza) acotada por el valor δ_k , conocido como radio de la región, cuya determinación óptima es muy importante, pues si δ_k es muy pequeño, el método podría perder la oportunidad de lograr avances sustanciales en cada paso con respecto a la convergencia hacia x^* ; pero también, si es demasiado grande, m_k puede resultar una mala representación local de F , posibilitando así que, digamos, el mínimo de m_k esté lejos del mínimo de F en la región ν_k . Para evitar esto y permitir un avance razonable en el paso de x_k a x_{k+1} se propone calcular el cociente

$$\rho_k = \frac{F(x_k + d_k) - F(x_k)}{m_k(0) - m_k(d_k)}, \quad (4.11)$$

donde el numerador nos da la reducción real en F y al denominador se le llama reducción predicha, la que siempre será no negativa puesto que d_k es el resultado de minimizar m_k en una región que incluye el paso $d = 0$; por lo que si ρ_k resulta negativa, se tendrá que $F(x_k + d_k) \geq F(x_k)$ y en consecuencia el paso debe ser rechazado.

Si lo que se tiene es $\rho_k \approx 1$, esto indica que m_k es una buena representación de F en la vecindad ν_k , lo que en principio sugiere la posibilidad de tomar $\delta_{k+1} > \delta_k$ para la próxima iteración.

Finalmente, si ρ_k resulta positiva pero no cercana a 1, la idea es tomar $\delta_{k+1} = \delta_k$, evitando la situación $0 < \rho_k \approx 0$, en cuyo caso deberá tomarse $\delta_{k+1} < \delta_k$.

Otro elemento que juega un papel importante en el contexto que estamos considerando es que los métodos del tipo región de confianza son globalmente convergentes si sus iteraciones producen en cada paso una reducción en el valor de m_k de al menos un múltiplo del decrecimiento que se obtendría de tomar como x_{k+1} el llamado "punto de Cauchy", dado por:

$$\begin{aligned} x_k^c &= x_k + d_k^c, \quad \text{con} \\ d_k^c &= -\tau_k \frac{\delta_k}{\|\nabla_k\|} \nabla_k, \quad \text{y} \\ \tau_k &= \begin{cases} 1, & \text{si } \nabla_k^t B_k \nabla_k \leq 0 \\ \min\left(\frac{\nabla_k^3}{\delta_k \nabla_k^t B_k \nabla_k}, 1\right), & \text{en otro caso} \end{cases} \end{aligned}$$

Como se observa, d_k^c no es otra cosa que la dirección del conocido método del descenso más rápido, sujeta al radio δ_k de la región de confianza (**Figura 4.4**).

Un algoritmo que en términos generales resume las ideas anteriores y considera además el caso en que $x \in \Omega = \{x \in R^n : l \leq x \leq u\}$, es el siguiente:

- 0) Entrada $(x_0, \mu, \mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, l, u)$
 $0 < \mu; 0 < \mu_1 < \mu_2 < 1; 0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1 < \sigma_3$
- 1) Proceso iterativo
 for $k = 0, 1, 2, \dots$
 Calcular
 1.1 El modelo $m_k(d)$

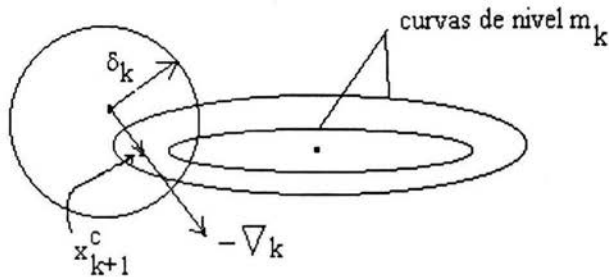


Figura 4.4: Ubicación gráfica del Punto de Cauchy, que se utiliza en la implementación del Método de Newton Global con Región de Confianza.

1.2 El punto de Cauchy x_k^c

1.3 Una solución aproximada d_k de (4.10), tal que satisfaga

$$m_k(d_k) \leq \mu m_k(x_k^c), \text{ con } \|d_k\| \leq \mu_1 \delta_k, x_k + d_k \in \Omega.$$

1.4 El valor de ρ_k dado en (4.11)

Hacer

$$x_{k+1} = x_k + d_k, \text{ si } \rho_k > \mu$$

$$x_{k+1} = x_k, \text{ si } \rho_k \leq \mu$$

Tomar

$$\delta_{k+1} \in [\sigma_1 \min \{\|d_k\|, \delta_k\}, \sigma_2 \delta_k], \text{ si } \rho_k \leq \mu_1$$

$$\delta_{k+1} \in [\sigma_1 \delta_k, \sigma_3 \delta_k], \text{ si } \rho_k \in (\mu_1, \mu_2)$$

$$\delta_{k+1} \in [\delta_k, \sigma_3 \delta_k], \text{ si } \rho_k \geq \mu_2$$

end (for)

2) Salida (x^*)

Este algoritmo converge globalmente y tiene velocidad de convergencia local superlineal o cuadrática. Más adelante comentaremos al respecto; asimismo, presentaremos un procedimiento para resolver (4.10) de manera eficiente y que permita conservar la propiedad de convergencia global.

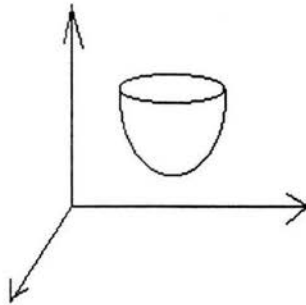


Figura 4.5: Si m_k es un paraboloides, las curvas de nivel son elipses.

4.1.2 Newton Truncado con gradientes conjugados

Un elemento central, tanto si se elige la estrategia de búsqueda en la línea como si se opta por la región de confianza, es que la correspondiente dirección d_k en cada iteración se obtiene resolviendo un sistema de ecuaciones lineales del tipo

$$B_k d = -\nabla_k \quad (4.12)$$

con B_k matriz simétrica y tal vez positiva definida (para el caso de región de confianza, (4.12) resulta de igualar a cero la derivada de $m_k(d)$).

Una alternativa usual para resolver el sistema anterior o equivalentemente para calcular el mínimo de una cuadrática como lo es $m_k(d)$, particularmente en el caso de grandes dimensiones es usar el **método de gradientes conjugados**, que consiste en un procedimiento iterativo que converge en a lo más n pasos y cuya idea básica ilustraremos para el caso $n = 2$, esto es, si m_k es un paraboloides (**Figura 4.5**), en cuyo caso, las curvas de nivel de m_k serán elipses.

Para ilustrar mejor lo que queremos, supongamos el caso ideal en que las curvas de nivel son circunferencias y tomemos una recta con dirección d_0 cualquiera (**Figura 4.6**).

Se tiene entonces que el mínimo de m_0 a lo largo de la recta $l_0(\alpha) = x_0 + \alpha d_0$ resulta ser el punto medio del segmento dado por la intersección de l_0 y c_0

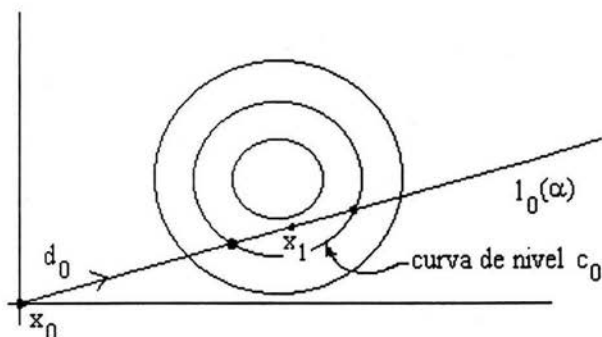


Figura 4.6: Curvas de nivel dadas por circunferencias, que corresponden a un paraboloides como el mostrado en la gráfica anterior.

(misma Figura).

Si llamamos α_0 al valor de α que nos da el punto medio mencionado, hagamos entonces

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$$

y con esto habremos dado un paso para calcular el x^* que minimiza nuestra cuadrática en dos variables.

Ahora, dado que debe existir una curva de nivel de m , que llamaremos c_1 , que pasa por x_1 , resulta entonces que éste es el punto de tangencia de l_0 y c_1 , y como c_1 es una circunferencia, resulta que l_0 es ortogonal al diámetro de c_1 por lo que basta tomar una nueva dirección d_1 ortogonal a d_0 , para garantizar que el mínimo de m_1 a lo largo de la recta $l_1(\alpha) = x_1 + \alpha d_1$ sea justamente $x_2 = x^*$, con lo cual hemos calculado x^* en dos pasos.

Pasemos ahora al caso en que las curvas de nivel son realmente elipses. Un resultado importante en esta situación es que si cortamos una elipse por una familia de rectas paralelas, los puntos medios de las cuerdas dadas por las intersecciones de la elipse con las rectas, están sobre una recta que pasa por el centro de la elipse [24] (**Figura 4.7**).

Tomemos ahora nuevamente $x_0 = 0$ y una dirección d_0 cualquiera. Resulta entonces que el mínimo de m_0 a lo largo de la recta $l_0(\alpha) = x_0 + \alpha d_0$ está

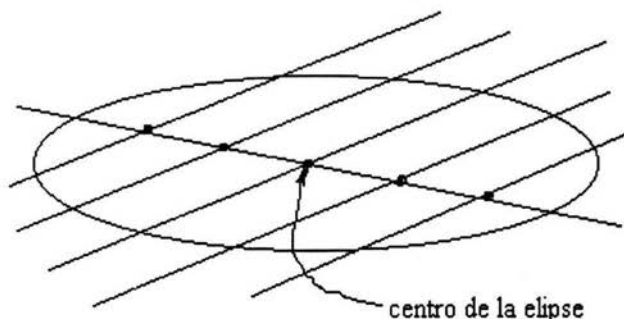


Figura 4.7: Construcción de una recta que pasa por el centro de una elipse

dado por el punto medio de la cuerda de intersección de l_0 con m_0 .

Si llamamos α_0 al valor de α donde se alcanza el mínimo, el primer paso concluye haciendo $x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0$ (**Figura 4.8**).

Pensemos ahora en una recta l'_0 paralela a d_0 , esto es, $l'_0 = x'_0 + \alpha d_0$ y llamemos x'_1 al punto medio de la cuerda de intersección de l'_0 con m_0 . Por el resultado que enunciamos antes, x_1 y x'_1 están sobre una recta que pasa por el centro de la elipse (que corresponde justamente al x^* donde el modelo cuadrático alcanza su mínimo), por lo que esta recta puede escribirse como

$$l_1(\alpha) = x_1 + \alpha d_1, \quad d_1 = x_1 - x'_1$$

(ver **Figura 4.9**).

De lo anterior, resulta claro que si calculamos el mínimo, que llamaremos x_2 , de m a lo largo de m_1 , se tiene que $x_2 = x^*$, esto es, en dos pasos o iteraciones hemos alcanzado el mínimo del modelo cuadrático m para el caso en que las curvas de nivel son elipses, sólo que ahora las direcciones d_0 y d_1 que aparecen en las iteraciones correspondientes no son ortogonales como en el caso de las circunferencias, sino que satisfacen la siguiente propiedad:

$$d_1^t B d_0 = 0, \tag{4.13}$$

donde B es la matriz del modelo cuadrático m , y de ahí que d_0 y d_1 resulten ser **B -ortogonales o conjugados**, lo que constituye el fundamento del **método**

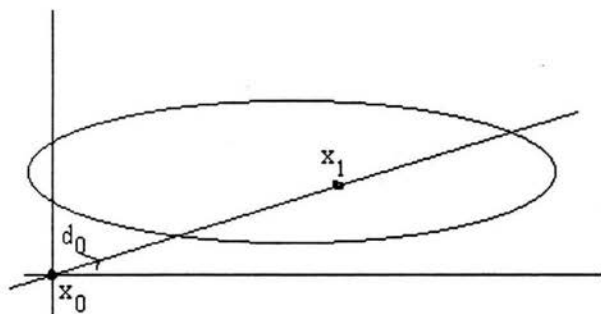


Figura 4.8: Construcción de x_1 por el método de gradientes conjugados.

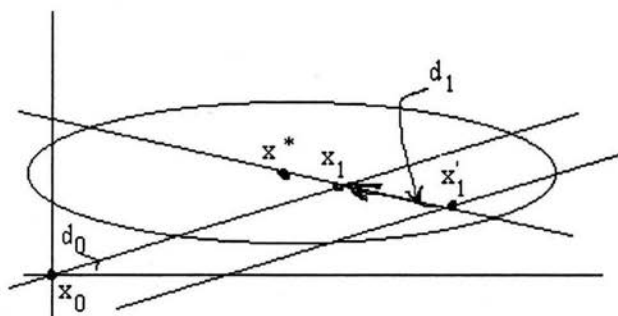


Figura 4.9: Cálculo de x^* a partir de x_1

de gradientes conjugados para el caso general de calcular el mínimo de una cuadrática en n variables, en el que los n vectores de búsqueda son conjugados entre sí y se construyen a partir de los gradientes del modelo m en cada punto x_k , y cuya convergencia se garantiza en a lo más n pasos.

El algoritmo correspondiente puede escribirse como sigue [49]:

- 0) Entrada (d_0)
- 1) Asignaciones iniciales
 - 1.1 $r_0 = B_k d_0 + \nabla_k$
 - 1.2 $p_0 = -r_0$
 - 1.3 $j = 0$
- 2) Proceso iterativo
 - While $r_j \neq 0$
 - $\alpha_j = \frac{r_j^T r_j}{p_j^T B_k p_j}$
 - $d_{j+1} = d_j + \alpha_j p_j$
 - $r_{j+1} = r_j + \alpha_j B_k p_j$
 - $\beta_{j+1} = \frac{r_{j+1}^T r_{j+1}}{r_j^T r_j}$
 - $p_{j+1} = -r_{j+1} + \beta_{j+1} p_j$
 - $j = j + 1$
 - end while
- 3) Salida (d_k)

En la práctica, particularmente cuando se trabaja con problemas de gran escala, no es recomendable calcular la dirección d_k resolviendo "completo" el sistema (4.12), pues en general resulta más eficiente detener la iteración de gradientes conjugados antes de concluir el proceso, atendiendo a criterios que permitan garantizar convergencia global y mantener las buenas propiedades de Newton.

Aplicación al caso con búsqueda lineal

Dado el sistema

$$H_k d = -\nabla_k, \quad (4.14)$$

si d_k es una solución aproximada (no "completa"), se define el residual

$$r_k = H_k d_k + \nabla_k \quad (4.15)$$

y se propone detener la iteración de gradientes conjugados cuando

$$\|r_k\| \leq \eta_k \|\nabla_k\|, \quad (4.16)$$

donde la sucesión $\{\eta_k\}$, llamada de forzamiento, satisface $0 < \eta_k < 1 \forall k$.

Los siguientes resultados garantizan que esta variante converge velozmente en una vecindad de $x^* = \arg \min F(x)$.

Teorema 8 *Supóngase que $\nabla F(x)$ es continuamente diferenciable en una vecindad de x^* y que la Hessiana de $F(x^*)$ es definida positiva. Considérese la iteración $x_{k+1} = x_k + d_k$, donde la dirección d_k se calcula de tal forma que se satisfaga (4.16), con $\eta_k < \eta$, para algún $\eta \in [0, 1)$. Entonces, si x_0 está suficientemente cercano a x^* , la sucesión $\{x_k\}$ converge a x^* linealmente; esto es, para k suficientemente grande se tiene $\|x_{k+1} - x^*\| \leq c \|x_k - x^*\|$, con $0 < c < 1$.*

Nótese que este resultado es menos restrictivo que el correspondiente para Newton pues ahora d_k es una dirección inexacta. Veamos ahora el siguiente

Teorema 9 *Supóngase que se cumplen las condiciones del teorema anterior y que la sucesión $\{x_k\}$ generada con las direcciones inexactas converge a x^* . Entonces la velocidad de convergencia será superlineal si $\eta_k \rightarrow 0$ y cuadrática si $\eta_k = O(\|\nabla F(x_k)\|)$.*

En el marco de este resultado, se sugiere tomar $\eta_k = \min(0.5, \|\nabla F(x_k)\|)$ si se espera obtener convergencia cuadrática en una vecindad de x^* , o bien $\eta_k = \min\left(0.5, \sqrt{\|\nabla^2 F(x_k)\|}\right)$ para convergencia superlineal, aunque pueden proponerse y usarse otras propuestas.

Si además, al inicio del proceso iterativo se toma $x_0 = 0$ y se consideran las condiciones de Wolfe vistas antes, se tendrá un procedimiento con convergencia global cuya velocidad cerca del mínimo será superlineal o cuadrática. Al respecto [49] se tiene el siguiente algoritmo:

- 0) Entrada (x_0)
- 1) Proceso iterativo
 - for $j = 0, 1, 2, \dots$

1.1 Calcular d_k inexacta aplicando gradientes conjugados al sistema

$$H_k d = -g_k ,$$

tomando $x_0 = 0$. Concluir el proceso cuando

$$\|r_k\| \leq \min \left(0.5, \sqrt{\|\nabla F(x_k)\|} \right) \|\nabla F(x_k)\| ,$$

o cuando se encuentre una dirección de curvatura negativa, esto es, que cumpla $d_k^t H_k d_k \leq 0$.

1.2 Hacer

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k ,$$

donde α_k satisface las condiciones de Wolfe.

end (for)

2) Salida (x^*)

Cabe aclarar que si la Hessiana no está disponible o bien no es positiva definida, es posible trabajar con una aproximación B_k , sólo que esto tiene en general un costo importante respecto del esfuerzo computacional y la velocidad de convergencia de la sucesión $\{x_k\}$ a x^* , cosa que tuvimos ocasión de comprobar en los experimentos numéricos realizados, que presentaremos en el próximo capítulo.

Aplicación al caso con región de confianza

Recordemos que la iteración correspondiente es de la forma $x_{k+1} = x_k + d_k$, donde d_k es la solución del problema

$$\min_d m_k(d) , \text{ sujeto a } \|d\| \leq \delta_k ; m_k(d) \equiv F(x_k) + d^t \nabla F(x_k) + \frac{1}{2} d^t B_k d . \quad (4.17)$$

La idea entonces es calcular e igualar a cero la derivada de $m_k(d)$, lo que da lugar al sistema $B_k d = -g_k$ que deberá resolverse usando gradientes conjugados, deteniendo la iteración correspondiente si se viola la cota de la región de confianza o bien si se encuentra una dirección de curvatura negativa.

El algoritmo propuesto en este caso es:

- 0) Entrada ($\varepsilon > 0, x_k, \delta_k$)
- 1) Asignaciones iniciales

1.1 $p_0 = 0$
1.2 $r_0 = g_k$
1.3 $d_0 = -r_0$
 if $\|r_0\| < \varepsilon$
 return $p = p_0$
2) Proceso iterativo
 for $j = 0, 1, 2, \dots$
 if $d_j^t B_k d_j \leq 0$
 determinar τ tal que $p = p_j + \tau d_j$ minimiza $m_k(d)$, con $\|p\| = \delta_k$
 return p
 Hacer
 $\alpha_j = \frac{r_j^t r_j}{d_j^t B_k d_j}$
 $p_{j+1} = p_j + \alpha_j d_j$
 if $\|p_{j+1}\| \geq \delta_k$
 determinar $\tau \geq 0$ tal que $p = p_j + \tau d_j$ satisface $\|p\| = \delta_k$
 return p
 Hacer
 $r_{j+1} = r_j + \alpha_j B_k d_j$
 if $\|r_{j+1}\| < \varepsilon \|r_0\|$
 return $p = p_{j+1}$
 Hacer
 $\beta_{j+1} = \frac{r_{j+1}^t r_{j+1}}{r_j^t r_j}$
 $d_{j+1} = r_{j+1} + B_{j+1} d_j$
 end (for)
3) Salida (d_k)

Para el caso de la estrategia de Newton truncado con gradientes conjugados y región de confianza, se tienen resultados de convergencia global y velocidad de convergencia local superlineal o cuadrática, análogos a los presentados para el caso de búsqueda en la línea. Los interesados pueden consultar [42], donde se incluyen detalles de la rutina TRON, implementación del algoritmo anterior que, usada por nosotros, nos permitió obtener resultados comparables con los obtenidos con la rutina L-BFGSB, a un menor costo, según mostraremos en su momento.

Capítulo 5

Implementación, ejemplos y resultados computacionales

En esta parte proponemos algunos ejemplos y presentamos una colección de resultados computacionales, realizados con el propósito de comparar los métodos de regularización vistos y analizados en el **Capítulo 3**. En el caso de Tikhonov, hacemos uso de nuestras propuestas de algoritmos (PDR, CPL-c y CM) para la estimación del parámetro de regularización y comparamos los resultados obtenidos por esta vía con los producidos usando Optimización Multiescala. Mostramos también los resultados que obtuvimos bajo un supuesto realista en términos prácticos: a partir de pocos datos, obtener información en todos los puntos de la malla donde se resuelve el problema directo (para tener solución única), haciendo interpolación.

También, por razones metodológicas, es usual que en un trabajo como el nuestro, en el que se incluyen propuestas de nuevos métodos y/o algoritmos para resolver problemas reales, se comience experimentando con ejemplos (conocidos como sintéticos) en los que se tiene control o conocimiento de la solución, con el fin de valorar la eficacia y robustez de las propuestas en cuestión, para posteriormente pasar al tratamiento de los casos reales. En este sentido y en relación con nuestro problema concreto de estimación del parámetro T de transmisividad hidráulica en el modelo de flujo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T(x, y) \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S(x, y) \frac{\partial h}{\partial t} + q(x, y, t), \quad (5.1)$$

asumiendo que se conocen S y q , trabajaremos con:

- Un ejemplo sintético
- El acuífero cubano de Ariguanabo, considerando dos casos:

1. Trabajar sólo con la subcuenca aeropuerto, esto es, generando condiciones de frontera y fijando un valor para los parámetros (que será la solución del problema de identificación), se resuelve la ecuación diferencial de flujo y se obtiene una h . El ejercicio ahora consiste en tomar esa h obtenida añadirle ruido y tomar esta información como "los datos", y utilizando una aproximación inicial lejana a la solución conocida, resolver el problema inverso para estudiar si los métodos de optimización y de regularización son capaces o no de recuperar los parámetros. Este experimento es especialmente importante si se toman solamente datos en pocos puntos de la malla, y aunque se reproduce el caso real se trata de un ejemplo sintético, pues disponemos de la solución h .

2. Considerar el acuífero completo con datos reales, en donde no se conoce la solución, por lo que se trata de un ejemplo real.

A continuación hacemos algunas precisiones de carácter general:

- Con respecto al uso de Regularización de Tikhonov para el cálculo estable del parámetro T , la propuesta específica usada en los experimentos numéricos realizados fue la de estimar T como la T^* solución del problema de optimización

$$\min_{T \in \Omega} F(T, \alpha), \quad F(T, \alpha) = \left\| (\Psi \circ \Phi)(T) - \tilde{h} \right\|^2 + \alpha \|\nabla T\|^2 \quad (5.2)$$

y en el caso de Multiescala, la formulación correspondiente es

$$\min_{T \in \Omega} F(T), \quad F(T) = \left\| (\Psi \circ \Phi)(T) - \tilde{h} \right\|^2$$

- Para el proceso de optimización local -usando Tikhonov o Multiescala- se usó la rutina L-BFGS-B [67], que es la implementación de un método tipo quasi-Newton de memoria limitada con búsqueda lineal, y TRON [42], rutina basada en Newton truncado con región de confianza. Ambas rutinas requieren fijar el valor de un parámetro (tol.opt) por parte del usuario, y al respecto, se usaron dos valores de prueba 1.e-8 y 1.e-12.

- En la resolución del problema directo (ecuación de flujo) como parte de la optimización, se utilizó el programa HIDRA [50], basado en el esquema en diferencias finitas descrito en el capítulo 2.
- El cálculo del parámetro de regularización se llevó a cabo usando las propuestas descritas en el capítulo 3, excepto para una parte del ejemplo sintético, sobre el que se comentará más adelante.
- Dada la necesidad de contar con la evaluación del gradiente de F dentro del proceso de optimización, y debido a la complejidad de la función objetivo F que resuelve la ecuación de flujo, utilizamos el programa ADIFOR [9] de diferenciación automática para resolver esta cuestión (véase [33]). El uso de este programa requiere que las rutinas de la función objetivo cumplan ciertos requisitos de programación muy estrictos, por lo que el proceso tiene un cierto grado de dificultad.
- Los cálculos numéricos se realizaron en una PC pentium III sobre WINDOWS, trabajando en doble precisión.

5.1 Ejemplo sintético

Dado que se trata de calcular $T(x, y)$ conociendo h , solución de la ecuación diferencial, S y q , decidimos hacerlo mediante el siguiente esquema de simulación:

- Tomamos la T^* óptima (**Figura 5.1**) dada por el siguiente polinomio:

$$T^*(x, y) = x^2 + y^2 + xy + x + y + 1 \quad (5.3)$$

y resolvimos numéricamente el problema directo en una malla regular definida sobre el cuadrado unitario, para obtener h^*_Δ , fijando $S = 1$ y q dada en al menos un punto. Cabe señalar que este ejemplo sintético resultó muy difícil, pues en la realidad la T es más bien constante por zonas y no varía suavemente como en nuestro ejemplo.

- Para incluir errores en los datos y hacer que el problema sintético sea representativo de la realidad, y teniendo en cuenta que en este caso las cotas para la h son

$$0 < h(x, y, t) < 1$$

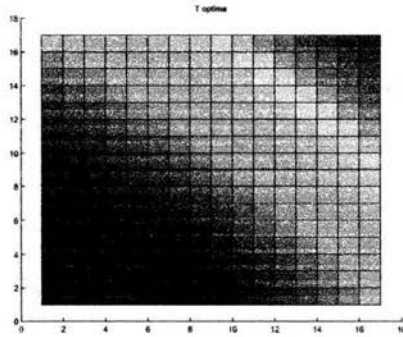


Figura 5.1: Gráfica de la transmisividad óptima utilizada en el ejemplo sintético, y que está dada por $T^*(x, y) = x^2 + y^2 + xy + x + y + 1$

generamos \tilde{h}_Δ truncando h_Δ^* a partir de la cuarta cifra significativa (en este caso el cuarto decimal), produciendo el siguiente error relativo o perturbación en \tilde{h}_Δ :

$$\delta = \frac{\|h_\Delta^* - \tilde{h}_\Delta\|_2}{\|h_\Delta^*\|_2} = .643e - 3 .$$

- Se tomó esta \tilde{h}_Δ perturbada con errores en todos los puntos de la malla, como nuestra \tilde{h} observada, y se resolvió el problema inverso (5.2) usando la rutina L-BFGS-B con el objetivo de recuperar T_Δ^* que nos da los valores de T^* en los nodos de la malla. Como condición inicial se tomó $T_\Delta^0 = 1$.

Resultados obtenidos

1. Construyendo puntos sobre la L-curva y tomando $\text{tol.opt.} = 1.e - 8$ se obtuvo una buena aproximación de la transmisividad para $\alpha = 1.e - 8$ (ver tabla 4.1). También se observa que se cumple que la esquina de la L-curva, construida usando los valores de las columnas 2 y 3 de la **Tabla 1**, sí corresponde con dicho valor del parámetro de regularización (**Figura 5.2**). En esta tabla se observa claramente cómo

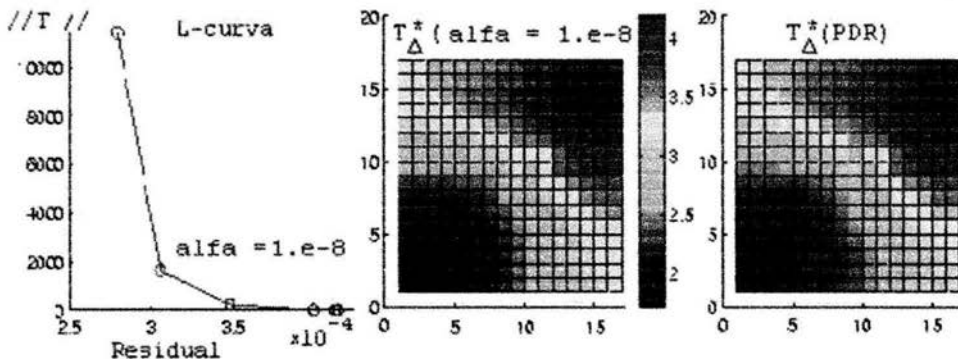


Figura 5.2: Resultados gráficos de la transmisividad estimada, para el caso sintético. A la izquierda la que corresponde a la esquina marcada de la L-curva, y la de la derecha la resultante de aplicar el algoritmo que usa el principio de discrepancia de Morozov (PDR).

cuando el valor de α se hace más pequeño que el valor óptimo, el valor del error de aproximación en T crece, a pesar de que el valor de la función objetivo sigue decreciendo. Este es un resultado importante, ya que muestra que el criterio de descenso de la función objetivo no es un indicador válido para asegurar que el parámetro se aproxime correctamente.

1. Con respecto a los resultados que se obtienen usando el Principio de Discrepancia PDR, y para probar que efectivamente la solución usando este principio coincide con el obtenido usando la L-curva, se realizó el siguiente experimento: usando el valor $\alpha = 1.e - 8$, y teniendo en cuenta que el valor del residual $\|M(T_{\Delta}^*) - \tilde{h}\|^2$ para dicho α es $3.052e-4$, se deduce que para $r = 28$ se cumple el Principio de Discrepancia de Morozov

$$\sqrt{3.052e - 4} < r\delta = 28 * .643e - 3$$

por lo que aplicamos el algoritmo PDR con este valor de r , partiendo de diferentes valores de α y con una tolerancia $\text{tol. opt.} = 1.e - 8$. Para

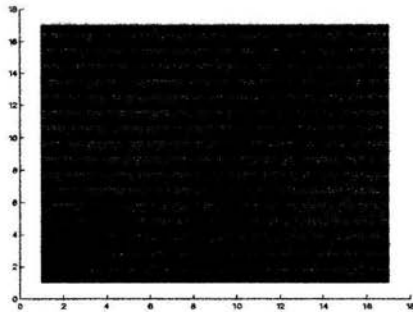


Figura 5.3: Gráfica de la T óptima obtenida al usar el algoritmo PDR, pero con un valor del parámetro $r = 100$, que al estar muy lejos del valor correcto la solución dista mucho de la real.

ninguna alfa inicial el algoritmo logró disminuir el valor de la función objetivo y nunca se llegó a cumplir el Principio de Discrepancia de Morozov. Ante esta situación repetimos el experimento usando una tolerancia para el método de optimización más estricta: $\text{tol.opt.} = 1.e - 12$ (más pequeña que $1.e - 8$), y la T óptima resultado de dicho experimento sí se aproximó a la exacta suficientemente (**Figura 5.2**), con un error relativo de 0.1643, comparable con el resultado de la L-curva que se puede ver en la **Tabla 1**, para $\alpha = 1.e - 8$. Estos resultados muestran que aunque el algoritmo PDR funciona en el sentido de que escoge aquí el mismo valor de alfa óptimo, la solución del problema de identificación se hace más cara, ya que la optimización debió realizarse con mayor precisión.

2. Otra observación interesante con respecto a esto mismo es que aplicamos también el algoritmo PDR pero usando un valor de r mayor que 28. Tomamos $r = 100$ y resulta que el algoritmo PDR se detuvo para $\alpha = 1.e - 2$, dando por resultado la T óptima dada en la **Figura 5.3**. Este resultado muestra que el éxito del principio de discrepancia para la identificación de parámetros está directamente asociado a la selección correcta de r , ya que la gráfica muestra una T^* casi idéntica a la aproximación inicial (constante).

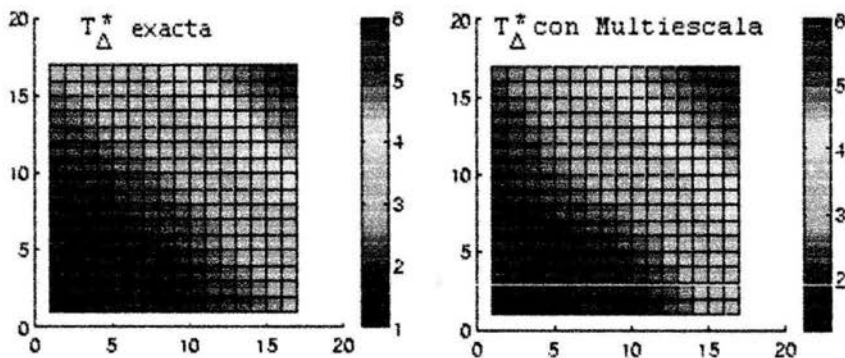


Figura 5.4: Gráfica de la T óptima usada en el ejemplo sintético (izquierda) y Gráfica de la T resultante de aplicar Optimización Multiescala a dicho problema.

α	Res.	Suav.	$F(T_\alpha^*, \alpha)$	Iter.	Error relativo (T)
1.e-2	4.141e-4	1.33e-5	4.142e-4	67	0.3498
1.e-6	3.997e-4	6.669	4.064e-4	48	0.3381
1.e-7	3.487e-4	224.498	3.711e-4	41	0.2771
5.e-8	3.310e-4	472.93	3.547e-4	39	0.2411
1.e-8	3.052e-4	1657.611	3.218e-4	47	0.1636
1.e-9	2.808e-4	11486.739	2.922e-4	51	0.2688
1.e-10	2.642e-4	88184.131	2.731e-4	110	0.3617

Tabla 1: Res. ($\|M(T_\alpha^*) - \tilde{h}\|^2$), Suav. ($\|\nabla T\|^2$)

5.1.1 Estudio comparativo entre la regularización de Tikhonov (L-curva y PDR) y el método de optimización multiescala

En la **Figura 5.4** mostramos los resultados de aplicar Optimización Multiescala, presentados también en [3], con el propósito de comparar costos y nivel de aproximación de la transmisividad.

Tabla comparativa	Iteraciones	Error en T
Con multiescala (tol. opt. = 1.e-8)	41	.0958
L-curva (tol. opt. = 1.e-8)	454	.1636
PDR (tol. opt. = 1.e-12)	463	.1643

Con base en lo mostrado en la tabla comparativa, podemos decir que:

- Los resultados obtenidos con Tikhonov usando la L-curva y el algoritmo PDR son comparables entre sí , con el inconveniente de que para el segundo se precisa conocer el valor de r apropiado que nos permita converger a la T^* buscada.
- Con Optimización Multiescala el esfuerzo computacional resultó mucho menor que con Tikhonov y la T^* obtenida es mejor.

5.2 Acuífero de Ariguanabo

Descripción del acuífero

El área de estudio es de 259.7 Km^2 y abarca toda la cuenca Ariguanabo, situada en la Ciudad de la Habana, Cuba, y se divide en cuatro subcuencas hidrológicas. En general, las condiciones de escurrimiento son pobres y en época de lluvias intensas es de poca duración. La lámina de lluvia media hiperanual es 1536 mm , donde 22 % corresponde al periodo seco y 78 % al húmedo.

En toda la parte central del acuífero, así como en su borde suroeste, se encuentran depósitos sedimentarios de calizas cristalizadas duras, cavernosas y margas compactas con espesores mayores de 100 m . La transmisividad varía entre 30 y $25000 \text{ m}^2/\text{día}$ pero los datos del coeficiente de almacenamiento son muy limitados.

Las aguas subterráneas tienen una mineralización de 0.4 a 0.5 g/l y son del tipo carbonatadas.

El periodo elegido para realizar la calibración del modelo fue de tres años, de 1982 a 1985, subdividido en doce intervalos trimestrales, donde se presentan cambios notables en los niveles de las aguas subterráneas debido a un ciclón en los primeros intervalos, y un periodo final muy seco. El hecho de tomar

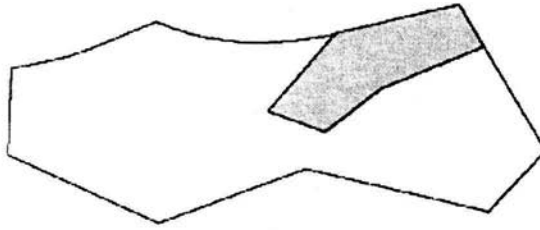


Figura 5.5: Forma de la región que ocupa el Acuífero de Ariguanabo, y marcada en gris se distingue la zona que corresponde a la subcuenca Aeropuerto.

datos en periodos de variación extremas, nos ayuda a mostrar la potencialidad de los métodos aquí expuestos.

5.2.1 Subcuenca Aeropuerto

Se eligió la subcuenca Aeropuerto, que se puede ver sombreada en la **Figura 5.5**, para realizar pruebas preliminares, dada su similitud con las características del acuífero completo. En este caso se trabajaron dos opciones: primeramente, partiendo de una T_{Δ}^* óptima realista para la zona, definida por los administradores del acuífero (**Figura 5.6**), se implementó un esquema experimental en el que se tomaron datos creados a partir de esta T_{Δ}^* , lo que muestra similitudes con el ejemplo sintético. La otra opción consistió en partir de observación reales h_{Δ}^{obs} , lo que se hizo con el propósito de tender un puente con el caso real, esto es, el acuífero completo.

El esquema experimental usado consistió en :

- Construir una región rectangular que contuviera a la subcuenca, y discretizarla mediante una malla regular (**Figura 5.7**).
- Para obtener los datos con error, se consideraron tres opciones:

a) Construir h_{Δ}^* igual que en el ejemplo sintético, usando valores de S y q dados por los administradores del acuífero, de la siguiente manera: Se tomó la T_{Δ}^* ya mencionada y se resolvió la ecuación diferencial con esa T_{Δ}^*

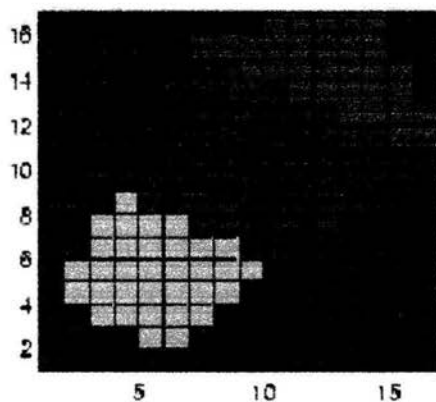


Figura 5.6: Gráfica de la transmisividad óptima T_{Δ}^* , para la zona de Aeropuerto, definida por los administradores del acuífero.

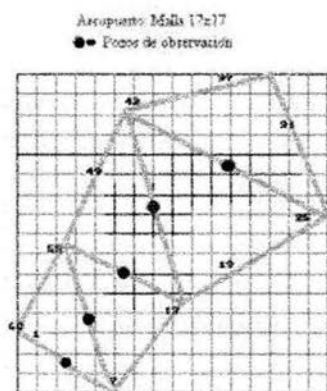


Figura 5.7: Malla 17x17 para la subcuenca Aeropuerto y ubicación de algunos pozos de observación.

para obtener la h_{Δ}^* en toda la malla, que llamamos observaciones exactas. Después se consideraron dos niveles de ruido o perturbación: $\delta_1 \sim 1.e - 3$ y $\delta_2 \sim 1.e - 4$. La función objetivo resultante la escribiremos como

$$F0 \equiv \|(\Psi \circ \Phi)(T_{\Delta}) - h_{\Delta}^*\|^2$$

b) Tomar como datos los h_{Δ}^I que se construyen por interpolación del inverso de la distancia, para obtener los valores de h en todos los puntos de la región discretizada, a partir de h_{Δ}^{obs} , con $h_{\Delta}^{obs} = [h_1^{obs}, \dots, h_n^{obs}]$, donde h_i^{obs} son los valores observados reales de la carga hidráulica h en pozos de observación en distintos tiempos. Esto da lugar a la función

$$F1 \equiv \|(\Psi \circ \Phi)(T_{\Delta}) - h_{\Delta}^I\|^2$$

c) Tomar como datos directamente las h_{Δ}^{obs} , que son las observaciones reales, únicamente en las coordenadas de los pozos de observación, teniéndose ahora

$$F2 \equiv \|(\Psi \circ \Phi)(T_{\Delta}) - h_{\Delta}^{obs}\|^2$$

En este caso, $(\Psi \circ \Phi)(T_{\Delta})$ tiene una significación especial que explicaremos en los siguientes términos: supogamos que en el k -ésimo paso de la optimización, usando la T_{Δ}^k actual se resuelve el problema directo y se obtiene h_{Δ}^k para todos los puntos de la región discretizada. Pero como sólo se tienen n observaciones, no tiene sentido en principio la diferencia $h_{\Delta}^k - h_{\Delta}^{obs}$ en todos los puntos de la malla. Sin embargo, considerando que varios puntos de la malla aportan información sobre lo que sucede en la posición de la observación, se generó la $h_{\Delta_n}^k$ en la posición del pozo de observación, a partir de interpolar las h_{ij}^k de sus nodos vecinos, definiendo la vecindad por un círculo de radio ρ (definido experimentalmente $\rho = 2$) (véase [31]), con lo que la función objetivo queda ahora como

$$F2 = \|h_{\Delta_n}^k - h_{\Delta}^{obs}\|^2 .$$

para la k -ésima iteración.

Nota

Dado que para la subcuenca en estudio se tiene en T_{Δ}^* tres zonas con transmisividad constante (**Figura 5.6**), donde $1000 \leq T_{\Delta}^* \leq 50000$, se tomó

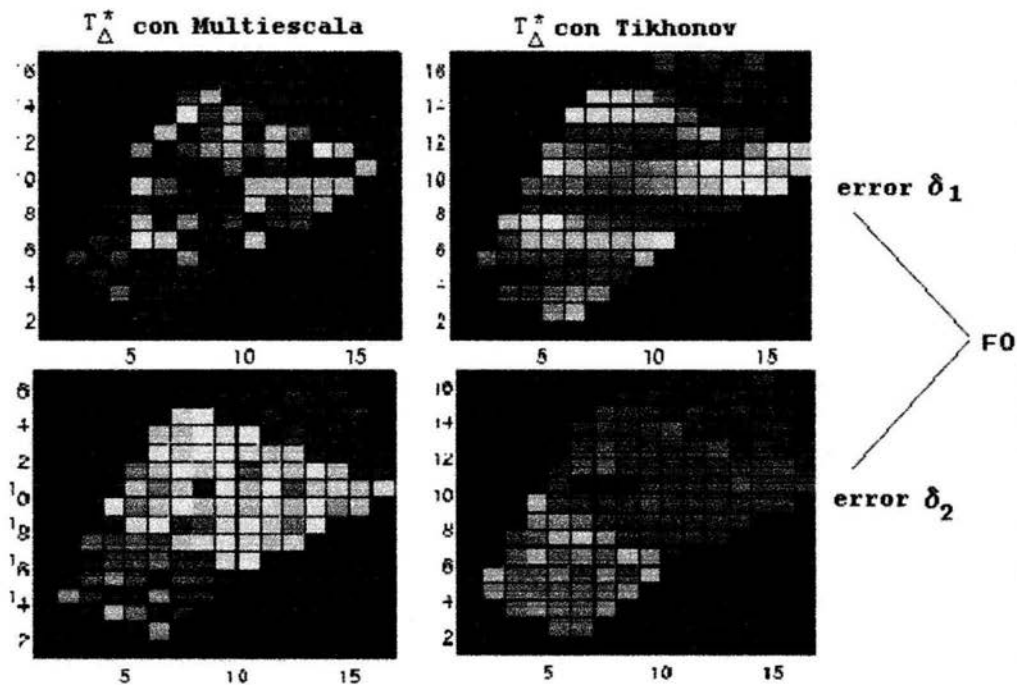


Figura 5.8: Residual F_0

la constante $T_{\Delta}^0 = 25000$ como condición inicial para el proceso de optimización. Tomar un valor inicial constante, como si no se tuviera ninguna información a-priori, es un caso extremo para probar la metodología usada.

Resultados de la experimentación con las propuestas (PDR) y (CPL-c)

En las Figuras 5.8 y 5.9 se muestran resultados de estimar la transmisividad usando Optimización Multiescala (MS) y Regularización (RT) de Tikhonov (con CPL-c), considerando los residuales F_0 , F_1 y F_2 . Como se observa, las gráficas muestran que cuando se tienen datos en toda la malla, la regularización de Tikhonov identifica la T con mayor precisión; sin embargo, cuando se interpola para llevar los datos reales observados a toda la

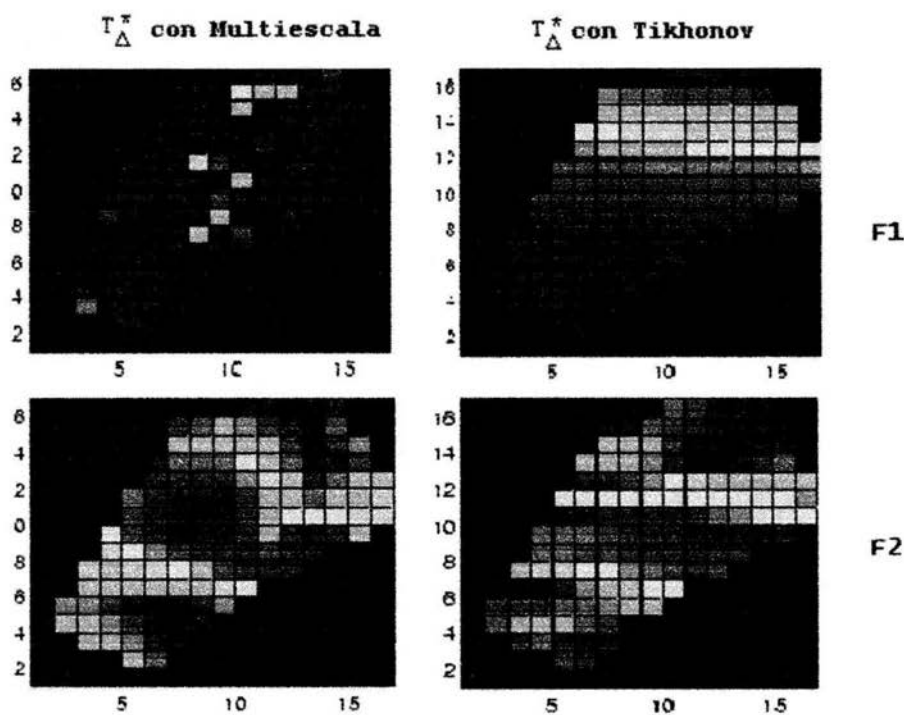


Figura 5.9: Residuales $F1$ y $F2$

malla, ningún método es capaz de identificar correctamente la T (ver conclusiones acerca de este caso). Cuando se consideran las zonas de influencia para interpolar los datos obtenidos por la simulación a las posiciones de la observación, ambos métodos son capaces de identificar la T a partir de la T_{Δ}^0 inicial propuesta.

Veremos ahora, usando el funcional $F2$, qué sucede con ambos métodos al iniciar el proceso desde aproximaciones lejanas, es decir desde una T constante igual al valor de la cota superior. Es importante notar aquí que, como habíamos mencionado, el método de Optimización Multiescala tiene un **efecto convexificador**, esto es, que aunque comencemos el proceso de optimización desde valores iniciales diferentes, se llega siempre (para nuestro

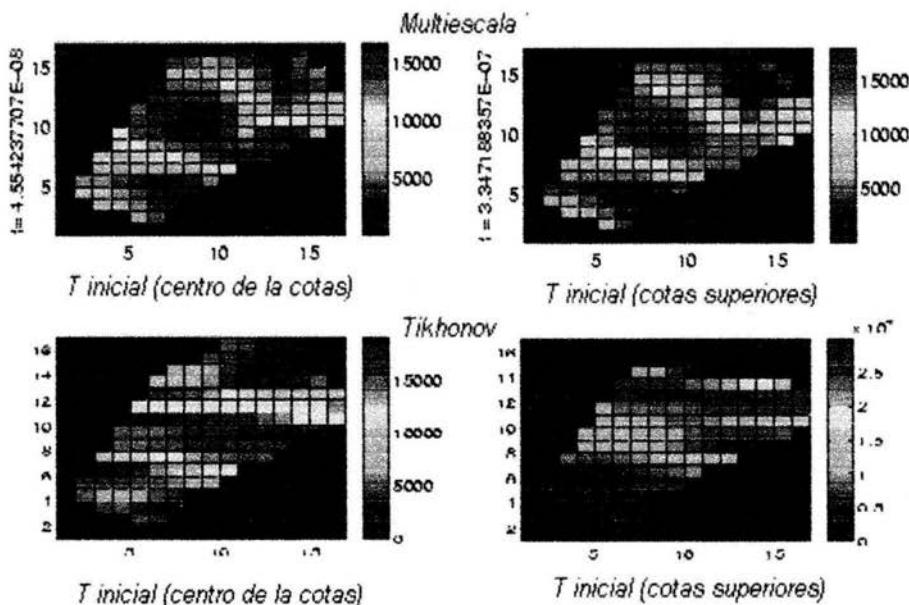


Figura 5.10: En la gráfica se muestra que el método de Optimización Multiescala tiene un efecto convexificador, esto es, que aunque comencemos el proceso de optimización desde valores diferentes de la T inicial, se llega siempre a la solución correcta del problema inverso, cosa que no sucede con la Regularización de Tikhonov.

ejemplo) a la solución correcta del problema inverso, cosa que no sucede con la Regularización de Tikhonov, que produce diferentes soluciones óptimas. Los resultados de esto se muestran en la **Figura 5.10**.

En relación con la variante usada para estimar el valor del parámetro de regularización, en el caso del método de Tikhonov, es importante anotar que como se muestra en [4], el algoritmo PDR es más económico que el de las pendientes CPL-c, pero con la desventaja de que se necesita conocer el nivel de error δ en los datos y el valor de r para poder ser utilizado, valores que no siempre se tienen. Por esta razón es que todos los resultados mostrados aquí han sido obtenidos, para el caso de regularización de Tikhonov, con el

algoritmo CPL-c, que sólo requiere conocer el valor de la norma del residual y de la función suavizante correspondiente a la T óptima para cada α , los cuales son parámetros de salida naturales del proceso de optimización. Cabe aclarar que para los experimentos que hemos mostrado, obtuvimos también en todos los casos, los mismos valores óptimos del parámetro de regularización usando el algoritmo CM para el cálculo de la curvatura máxima presentado en el **Capítulo 3**, por lo que los resultados obtenidos con este algoritmo y el CPL-c son idénticos.

A continuación, en la **Tabla 2** se pueden observar algunos índices que nos permiten comparar la eficiencia de las rutinas de optimización local (**M1**: L-BFGSB y **M2**: TRON), para el resultado de usar $F0$ (datos conocidos en toda la malla) con un error δ_1 (**Figura 5.8**). En la columna titulada error, aparece el valor del error relativo, en norma euclideana, de la solución obtenida con respecto a la solución conocida T^* .

		iter.	ev. F	error			iter.	ev. F	error
	MS	2246	2340	1.1571		MS	61	73	1.129
M1					M2				
	RT	1478	1539	0.264		RT	75	114	0.2642

Tabla 2: Aeropuerto con $F0$

En la **tabla 3** se compara la eficiencia de las rutinas **M1** y **M2** para $F2$.

		iter.	ev. F	error			iter.	ev. F	error
	MS	11613	11839	1.723		MS	281	471	1.124
M1					M2				
	RT	2073	2134	0.311		RT	46	65	0.311

Tabla 3: Aeropuerto con $F2$

5.2.2 Ariguanabo completo. Caso Real

En este caso no conocemos la T_Δ^* óptima y contamos sólo con observaciones reales de h en algunos puntos de la región que tienen errores de medición. Por esta razón estimamos T_Δ^* usando residuales del tipo $F2$, para lo que

usamos los datos obtenidos en 21 pozos de observación, lo que nos da $n = 21$ para h_{Δ}^{obs} y h_{Δ}^k . Debido a la geometría y extensión del área considerada, decidimos dividir la región en dos partes. Para cada una de ellas se construyó un rectángulo que la contuviera y una discretización del mismo usando una malla regular de 17x17 nodos, prestando especial atención a la generación de condiciones de frontera que modelaran adecuadamente esta división.

En cada subregión aplicamos Optimización Multiescala y Regularización de Tikhonov con los algoritmos **CPL-c** y **CM**, para determinar la T^* óptima, partiendo de dos puntos iniciales (T_{Δ}^{01} y T_{Δ}^{02}), dados por los ingenieros hidrólogos que nos proporcionaron los datos. Al igual que para la subcuenca Aeropuerto, los valores óptimos del parámetro de regularización usando los algoritmos **CPL-c** y **CM** fueron idénticos.

Los resultados obtenidos se muestran en las **Figuras 5.11** y **5.12**. Cabe señalar que con el propósito de apreciar mejor las diferentes zonas se tomaron 10 intervalos en que varían los valores de la transmisividad ($m^2/día$), y por consecuente 10 colores, uno para cada intervalo, de la siguiente forma:

V				V			
0	0	10	5	400		750	
1	10	30	6	750		2000	
2	si 30	$\leq T <$	50	7	2000	si $\leq T <$	5000
3	50		100	8	5000		15000
4	100		400	9	15000		25000
5	400		750	10	25000		50000

Según se observa en las figuras mencionadas, las soluciones calculadas a partir de T_{Δ}^{01} y T_{Δ}^{02} son prácticamente iguales.

Validación de resultados para el acuífero de Ariguanabo completo

La validación a la que nos referiremos en esta sección consiste en lo siguiente: una vez obtenida una identificación del parámetro de transmisividad, se resuelve la ecuación diferencial o modelo de flujo en un periodo futuro al que se usó para la caracterización, y en el que se conocen también datos de la carga, y se observa cuánto se aproxima la solución obtenida (h) a las observaciones reales futuras que se tienen de ésta en los pozos de observación.

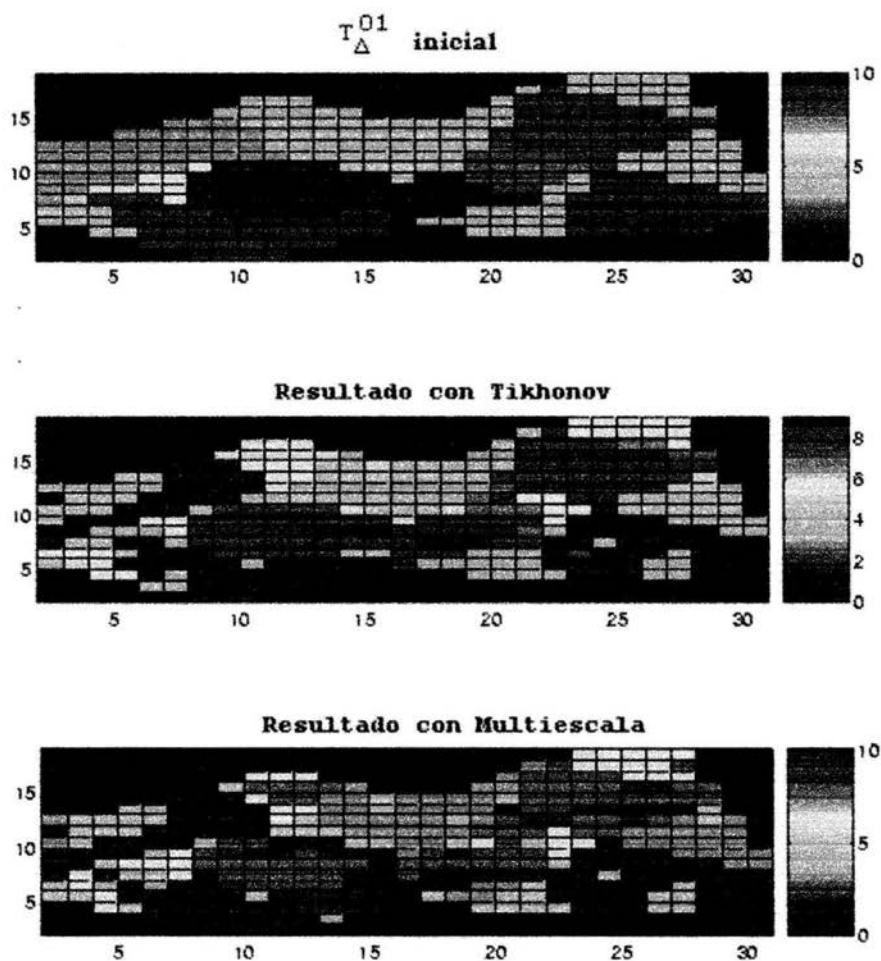


Figura 5.11: Resultados de la transmisividad estimada usando Regularización de Tikhonov y Optimización Multiescala, en el acuífero de Ariguanabo, usando como punto inicial T_{Δ}^{01}

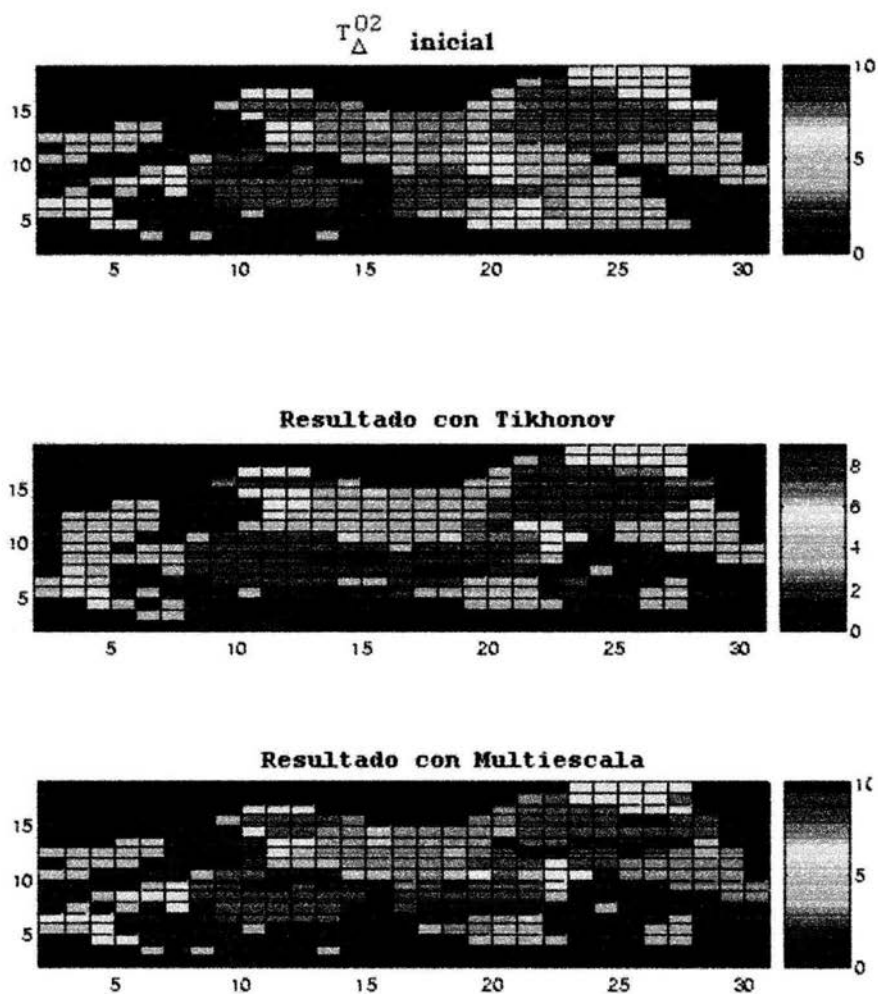


Figura 5.12: Resultados de la transmisividad estimada usando Regularización de Tikhonov y Optimización Multiescala, en el acuífero de Ariguanabo, usando como punto inicial T_{Δ}^{02}

Para realizar dicha validación se escogió el periodo de mayo de 1985 a abril de 1988 (inmediato posterior al de la caracterización que fue de 1983 a 1985), con intervalos de tiempo semestral, o sea, los correspondientes periodos húmedos y secos hidrológicos: mayo-octubre el periodo húmedo y nov-abril el periodo seco, que resultó en extremo seco, comparable con los más agudos de la historia de este acuífero.

Es bueno comentar que la infiltración eficaz media en la cuenca, en el período seco de tres años analizado para la validación, no supera el 24% de la lluvia total caída, que fue de 4360 mm., por lo que puede inferirse que un error de su estimado debe repercutir mucho menos en los resultados de la validación de las propiedades hidrogeológicas del modelo, que la de periodos acuosos; esto explica el porqué de la selección del periodo extremo seco elegido, de mayo de 1985 a abril de 1988.

El procedimiento realizado para construir las gráficas que aparecen en la **Figura 5.13** y validar las T_{Δ}^* usando T_{Δ}^{01} como punto inicial, tanto con Tikhonov como con Multiescala, consistió en lo siguiente:

1. A partir de las 6 observaciones semestrales $h_{\delta 1}, \dots, h_{\delta 6}$ de la carga hidráulica h , resultados medidos en 12 pozos de observación, y distintas de las h_i^{obs} usadas para la estimación de las T_{Δ}^* , se construyó para cada pozo un promedio por capa de tiempo

$$h_{\delta} = \frac{1}{6} (h_{\delta 1} + \dots + h_{\delta 6}).$$

2. Usando las estimaciones de T_{Δ}^* obtenidas con Tikhonov y Multiescala, resolvimos el modelo (5.1), con las S y q dadas anteriormente, para calcular las correspondientes soluciones de la ecuación de flujo, y a partir de éstas se calculó el promedio h_{Δ}^* en forma análoga a h_{δ} .

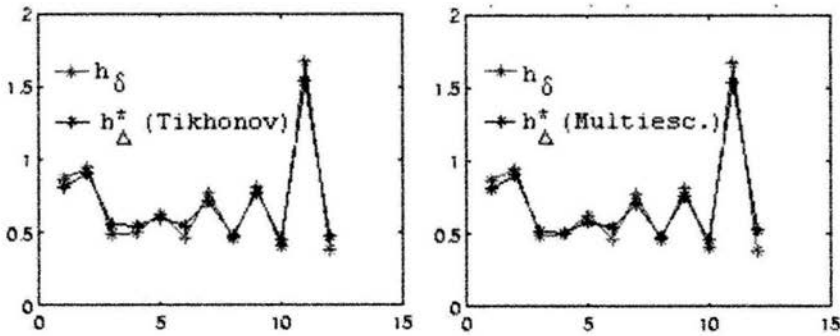


Figura 5.13: Representación gráfica de los resultados de la validación, donde se observa que, tanto con Tikhonov como con Multiescala, los valores de la carga hidráulica h_Δ^* , correspondientes a la transmisividad estimada, están muy cercanos a las observaciones de campo h_δ , disponibles.

En la **Figura 5.13** se muestra una comparación entre h_Δ^* y h_δ .

Con el propósito de apreciar mejor la diferencia entre h_Δ^* y h_δ , calculamos también la norma del error para Tikhonov y Multiescala, lo que se puede ver en la **tabla 4**.

	Tikhonov	Multiescala
$\ h_\Delta^* - h_\delta\ _\infty$	3.5 mts.	3.3 mts.

Tabla 4: Errores en la validación

Los resultados de la validación muestran que, para el caso del acuífero de Ariguanabo completo, los resultados obtenidos con Multiescala y con Regularización de Tikhonov son coherentes y aproximan suficientemente bien los datos disponibles para validar nuestra calibración.

Otro experimento realizado con los datos de Ariguanabo completo fue el de estimar los parámetros S y T secuencialmente, usando Multiescala, mediante el siguiente esquema iterativo-secuencial:

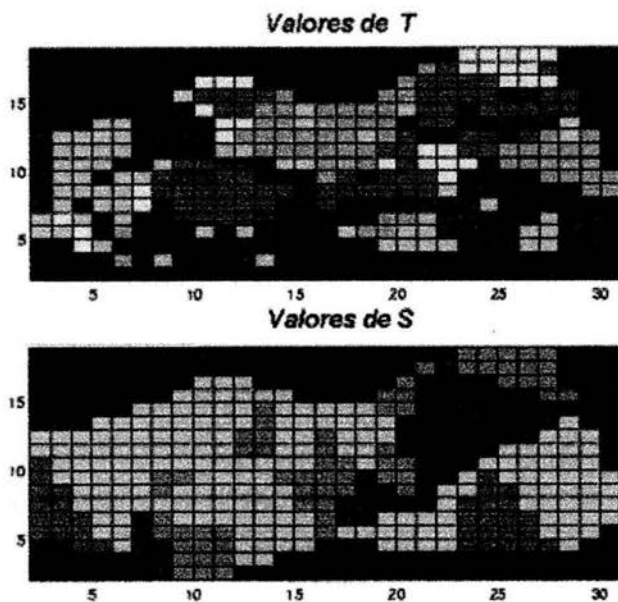


Figura 5.14: Resultados obtenidos al estimar los valores de T y S en un proceso iterativo, para los datos de Ariguanabo completo y usando Optimización Multi-escala.

Algoritmo Itsec

0) Entrada(S_0, T_0, N)

1) Proceso iterativo-secuencial

Para $k=0,1,\dots,N$

1.1 Se deja fija S_k y con T_k como condición inicial se calcula T_k^*

1.2 Se fija T_k^* y tomando S_k como condición inicial se calcula S_k^*

1.3 Se hace $T_k = T_k^*, S_k = S_k^*, k = k + 1$

2) Salida (S^*, T^*)

Se probó este algoritmo para $N=2$ y se obtuvieron los resultados que se muestran en la **Figura 5.14**. Como se observa, la T^* óptima difiere algo de la obtenida cuando sólo se calcula T^* , en la región centro-oeste, sin embargo creemos que se trata de un procedimiento digno de estudio.

Capítulo 6

Conclusiones, comentarios y referencias

Como se plantea en la introducción de este trabajo, nuestra investigación se enfocó a identificar los parámetros T y S de transmisividad hidráulica y de coeficiente de almacenamiento en un acuífero confinado, a partir de datos reales de la carga hidráulica o altura piezométrica h medida en pozos de observación (en pocos puntos de la región que abarca el acuífero) y con errores de medición.

Teniendo en cuenta, como se describe en el **Capítulo 3**, que el problema en estudio es inverso y mal planteado, se estudiaron algunos métodos de regularización con el propósito de implementar y/o desarrollar algoritmos que permitieran encontrar una solución estable al problema de identificación de parámetros para evitar la propagación del error de medición.

La experimentación numérica presentada en el **Capítulo 5** nos llevó a mostrar el impacto de la elección del parámetro de regularización (α en el caso de Regularización de Tikhonov y la escala máxima en el caso de Optimización Multiescala), permitiéndonos hacer los siguientes comentarios:

1. En el caso real de tener datos con error, no es suficiente utilizar métodos de optimización local para resolver el problema inverso de identificación de parámetros ya que éstos encuentran soluciones erróneas, pues localizan el óptimo de la función con ruido, así que la regularización juega

un papel fundamental de filtraje para obtener soluciones estables que son aproximaciones a la solución real.

2. Dado que no existe una teoría bien desarrollada que muestre la convergencia de los métodos de regularización en el caso de problemas no lineales, como el que nos ocupa, es muy importante estudiar la capacidad práctica de los métodos que han sido propuestos para el caso lineal, y reportar el éxito o fracaso de los mismos en aplicaciones específicas no lineales.
3. La generación de ejemplos sintéticos donde se conoce la solución, que reproduzcan las características del problema real, no es un asunto trivial, ya que se hace necesario estudiar a fondo el acuífero y decidir qué zona puede tomarse como ejemplo sintético (como resultó ser la subcuenca Aeropuerto), así como cuidar que las condiciones de frontera fijadas sean realistas y representen adecuadamente el problema y al acuífero.
4. En los resultados del **Capítulo 5** se observa la importancia que tiene encontrar el parámetro de regularización óptimo, pues los resultados de la transmisividad pueden ser muy sensibles a pequeños cambios en dicho parámetro, esto es, la solución obtenida puede estar muy lejos de la correcta si no se calcula con precisión el parámetro óptimo, asunto fundamental al que se enfocó esta tesis.
5. Se diseñaron los experimentos numéricos que permitieron mostrar la efectividad de los distintos métodos de regularización. Así, se probaron casos extremos para verificar la robustez de las propuestas hechas; por ejemplo se tomaron datos del problema real en periodos de comportamiento extremo del acuífero y se utilizaron aproximaciones iniciales en la optimización, lejos de la solución o de valor constante.
6. Usando la experiencia obtenida en la resolución de los casos sintéticos, se resolvió un problema real de identificación de parámetros con datos reales con errores de medición, y como las cotas que se usaron ya incorporaban conocimiento geológico a-priori sobre el tipo de medio poroso (lo que normalmente ocurre en la práctica), se obtuvo solución única. Aunque no se reportan en esta tesis, se realizaron experimentos

tomando cotas en rangos muy abiertos, y se detectó la presencia de varios mínimos locales. Para la solución de este problema sería necesario usar métodos de optimización global que proporcionan distintos escenarios.

7. Resultó muy importante, a la hora de resolver el problema inverso de identificación de la transmisividad, el planteamiento adecuado de la función objetivo en el problema de optimización a resolver. Cuando se cuenta con información de la altura piezométrica en todos los puntos de la malla o red de discretización, la solución debe ser única si no hay errores en las mediciones, pero como usualmente se tiene esta información sólo en las posiciones de los pozos de observación, experimentamos con tres tipos de función objetivo y los resultados se muestran en el **Capítulo 5**. La conclusión al respecto es que se tienen mejores resultados cuando se interpola la h calculada (en una iteración) a las posiciones de las observaciones, usando solamente los puntos de la malla que se encuentran dentro del círculo con un cierto radio de influencia ($F2$), que interpolando con la h calculada a toda la malla. Además queda como problema abierto el estudio de cómo interpolar los datos de los pozos de observación a toda la malla, pues la interpolación clásica genera un nivel inaceptable de error que no es adecuado en estos problemas.
8. La propiedad de convexificación que nos da solución única, de la Optimización Multiescala para esta aplicación, muestra la potencialidad de esta metodología como estrategia de regularización.
9. El criterio de obtener el menor valor de la función objetivo para determinar la búsqueda de la transmisividad en el proceso de optimización, no es suficiente en el caso de error en los datos. Aunque la función objetivo siga disminuyendo mientras disminuye el parámetro de regularización, la aproximación a la transmisividad hidráulica puede comenzar a deteriorarse, y es aquí donde interviene la necesidad de encontrar exactamente el valor óptimo del parámetro de regularización, que nos permite determinar el grado de aproximación al que puede llegarse de forma estable.
10. El método de Newton truncado con región de confianza (implementado

en la rutina TRON), que aproxima el Hessiano usando información de primer orden a través del Jacobiano, resultó mucho más eficiente que el de Quasi-Newton con Memoria Limitada, que aproxima el Hessiano completo incluyendo las segundas derivadas de los residuales, usando información sobre los últimos m gradientes y pasos. El uso de la rutina TRON tomó un 90 % menos de esfuerzo computacional en relación con L-BFGSB.

11. En el problema que nos ocupa, que es no lineal, para el que pueden obtenerse soluciones óptimas con residuales no tan pequeños debido a los errores de medición, se probó experimentalmente que se puede usar la aproximación de Gauss-Newton con región de confianza y que ésta resulta eficiente y robusta.
12. Se obtuvo una aproximación de los dos parámetros T y S en forma secuencial, considerando primero una aproximación constante al parámetro S para encontrar una aproximación a T y tomando esta aproximación se encuentra el valor óptimo de S .
13. Para garantizar que la caracterización del acuífero nos permite predecir adecuadamente la disponibilidad de agua, que es el objetivo final de la modelación, es necesario validar los resultados (verificar que las T y S obtenidas, reproducen los datos de la carga hidráulica h en periodos futuros de tiempo y distintos a los usados en el ejercicio de la caracterización).

Podemos comentar finalmente que en este trabajo se muestra la importancia de la regularización, de la generación adecuada de problemas sintéticos, y la generación de resultados en la caracterización de un acuífero real en forma eficiente.

Referencias

- [1] Aldama, A., (1988), *Stability analysis of discrete approximations of the advection diffusion equation through the use of an ordinary differential equation analogy*, Developments in Water Science, No. 5.
- [2] Allen, M. B., Pinder, G. F. and Herrera, R. I., (1988), *Numerical Modeling in Science and Engineering*, John Wiley & Sons, New York.
- [3] Alvarez, R. M., (1997), *Estimación de Parámetros en un modelo de Acuíferos*, Tesis de Maestría en Ciencias (Matemáticas), Fac. de Ciencias, UNAM, México.
- [4] Alvarez, R. M., (2001), *Estudio comparativo de diferentes propuestas para la estimación de la transmisividad hidráulica en un acuífero*, Posgrado en Ciencias de la Tierra, UNAM, México.
- [5] Banks, H.T. and Kunish, K., (1989), *Estimation Techniques for Distributed Parameter System*, Birkhäuser, Boston.
- [6] Bear, J. (1972), *Dynamics of Fluids in Porous Media*, American Elsevier, New York.
- [7] Bear, J. and Verruijt, A., (1990), *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, D. Reidel Publishing Company.
- [8] Binder, A., Engl, H. W., Groetsch, C. W., Neubauer, A. and Scherzer, O., (1994), *Weakly Closed Operators and Parameter Identification in Parabolic Equations by Tikhonov Regularization*, *Applicable Analysis*, Vol. 55, pp. 215-234.

- [9] Bischof, C., Carle, A., Khademi, P. and Mauer, A., (1996), *The AD-IFOR 2.0 system for the automatic differentiation of Fortran 77 programs*, Preprint MCS-P481-1194, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory and CRPC-TR 94491, Center for Research on Parallel Computing, Rice University.
- [10] Brambila, F., Fuentes, C., (2001), *Modelación fractal de la conductividad hidráulica de suelos no saturados*, Ingeniería Hidráulica en México, Vol. XVI, No. 2.
- [11] Byrd, R. H., Lu, P., Nocedal, J. and Zhu, C., (1995), *A limited memory algorithm for bound constrained optimization*, SIAM J. Sci. Comput. Vol. 17 , No. 5, 1190-1208.
- [12] Castellanos, J. L., Gómez, S. and Guerra, V., (2002), *A novel method to find the corner of the L-curve to solve ill-conditioned linear systems with noise*, J. Appl. Numer. Math., en prensa.
- [13] Castellanos, J. L. and Gómez, S., (2000), *A new implementation of the Tunneling Methods for Bound Constrained Global Optimization*, Submitted to ACM-TOMS.
- [14] Chang, S. and Yeh, W-G (1976), *A proposed algorithm for the solution of the large-scale inverse problem in groundwater*, Water Resources Research, Vol 4, No. 3, 365-374.
- [15] Chardaire-Riviere, C., Chavent, G., Jaffre, J. and Jun, L., (1990), *Multiscale representation for simultaneous estimation of relative permeabilities and capillary pressure*, Society of Petroleum Engineers, SPE 20501.
- [16] Chardigny, E., Siegel, P., Mosé, R. and Ackerer, P., (1996), *Parameter identification for complex groundwater systems*, XI International Conference on Computational Methods in Water Resources, Cancún, México.
- [17] Chavent, G., (1979), *Identification of distributed parameter system: about the output least square method, its implementation, and identifiability*, Proceedings of the 5th IFAC Symposium on Identification and System Parameter Estimations, Pregamon Press.

- [18] Chavent, G., (1985), *On parameter identifiability*, Proceedings of the 7thIFAC Symposium on Identification and System Parameter Estimations, Pergamon Press.
- [19] Chavent, G. and Dupuy, M., (1974), *History Matching by Use of Optimal Theory*, SPE 4627.
- [20] Chavent, G. and Kunisch, K., (1996), *On Weakly Nonlinear Inverse Problems*, SIAM J. Appl. Math., Vol. 56, No. 2, 542-572.
- [21] Chavent, G. and Liu, J., (1989), *Multiscale parametrization for the estimation of a diffusion coefficient in elliptic and parabolic problems*, Preprints of IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter System, Perpignan, France.
- [22] Chavent, G, Clemente, F. and Gómez, S., (1995), *Migration-Based travelttime Inversion of 2D simple structures: the Synclay model*, Geophysics.
- [23] Dennis, J. E. and Schnabel, R. B., (1983), *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- [24] Eisenhart, Luther, P.,(1966), *Coordinate Geometry*, Dover Publications, Inc., New York, USA.
- [25] Engl, H. W., (1987), *Discrepancy principles for Tikhonov regularization of ill-posed problems leading to optimal convergence rates*, Journal of Optimization Theory and Applications, 52, No. 2, 209-215.
- [26] Engl, H. W., Kunish, K. and Neubauer, A., (1989), *Convergence rates for Tikhonov regularisation of non-linear ill-posed problems*, Inverse Problems, Vol 5, 523-540.
- [27] Engl, H. W., (1993), *Inverse Problems*, Johannes-Kepler-Universität, Linz, Austria.
- [28] Engl, H.W., Hanke, M. and Neubauer, A., (1996), *Regularization of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publishers.

- [29] Engl, H. W. and Zou, J., (1998), *Stability and Convergence Analysis of Tikhonov Regularization for Parameter Identification in a Parabolic Equation*.
- [30] Gómez, S., Pérez, A. and Alvarez, Rosa M., (1998), *The multiscale optimization for parameter identification in the Ariguanabo aquifer*, Reportes de investigación del IIMAS, UNAM, Vol 8, No. 57.
- [31] Grebennikov, A. I., (1999), *Spline algorithms for data processing and solving some inverse problems*, Proc. of the IV Int. Conf. NMA-98, World Sci., Singapur.
- [32] Groetsch, C. W., *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, Vieweg, Braunschweig, 1993.
- [33] Guerrero, J. y Alvarez, R. M., (2003), *ADIFOR: Una herramienta computacional para el cálculo de derivadas, y su uso en optimización numérica*, Vínculos Matemáticos, No.18, Serie Técnica e Investigación, Facultad de Ciencias, UNAM.
- [34] Gullikson, M. E. and Wedin, P. A., (1998), *The nonlinear L-curve*, Technical Report Working paper, Dept. of Comp. Science, Umea University, Sweden.
- [35] Gullikson, M. E. and Wedin, P. A., (1998), *Algorithms for using the nonlinear L-curve*, Technical Report Working paper, Dept. of Comp. Science, Umea University, Sweden.
- [36] Hanke, M., (1997), *A regularizing Levenberg-Marquardt scheme, with applications to inverse groundwater filtration problems*, Inverse Problems 13.
- [37] Hansen, P. C., (1997), *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems. Numerical aspects of linear inversion*, SIAM, Philadelphia.
- [38] Huyankon, P.S. and Pinder, G.F., (1983), *Computational Methods in Subsurface Flow*, Academic Press, San Diego.
- [39] Kaufman, L. and Neumaier, A., (1996), *PET regularization by envelope guided conjugate gradients*, IEEE Trans. Medical Imaging, 15.

- [40] Kirsch, A., (1996), *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Springer-Verlag, New York, Inc.
- [41] Kravaris, C. and Seinfeld, J. H., (1985), *Identification of Parameters in Distributed Parameter Systems by Regularization*, SIAM J. Control and Optimization, Vol. 23, No. 2, pp. 217-241.
- [42] Lin, Chih-Jen and Moré, J., (1999), *Newton's Method For Large Bound-Constrained Optimization Problems*, SIAM Journal on Optimization, Vol. 9, No. 4.
- [43] Liu, D. C. and Nocedal, J., (1989), *On the limited memory BFGS method for large scale optimization*, Mathematical Programming, 45, 503-528.
- [44] Liu, J., (1993), *A multiresolution method for distributed parameter estimation*, SIAM J. Sci.Comput., Vol 14, No 2, 389-405.
- [45] Mesa, H., (2000), *Calibración automatizada de los parámetros hidrogeológicos de un modelo del acuífero Ariguanabo mediante un algoritmo evolutivo*, Tesis de Doctorado, Departamento de Matemática, Facultad de Ingeniería Civil, Instituto Superior Politécnico José A. Echeverría, La Habana, Cuba.
- [46] Morton, K. W. and Mayers, D. F., (1994), *Numerical Solution of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press.
- [47] Neubauer, A. and Scherzer, O., (1990), *Finite-Dimensional Approximation of Tikhonov Regularized Solutions of Non-linear Ill-Posed Problems*, Numer. Funct. Anal. and Optimiz., 11(1&2), pp. 85-99.
- [48] Nocedal, J., (1980), *Updating quasi-Newton matrices with limited storage*, Mathematics of Computation, 35.
- [49] Nocedal, J. and Wright, S. J., (1999), *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research.
- [50] Pérez, A. y Gómez, S., (2001), *HIDRA: Programa para la estimación de transmisividades en acuíferos: Breve Manual de usuario*, IIMAS, UNAM, México.

- [51] Scherzer, O., (1993), *The Use of Morozov's Discrepancy Principle for Tikhonov Regularization of Nonlinear Ill-Posed Problems*, Computing 51, 45-60.
- [52] Scherzer, O., Engl, H. W. and Kunisch, K., (1993), *Optimal a Posteriori Parameter Choice for Tikhonov Regularization for Solving Nonlinear Ill-Posed Problems*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 30, No. 6, 1796-1838.
- [53] Schewchuck, J., (1994), *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*, School of Computer Science, Carnegie Mellon University.
- [54] Schroter, T. and Tautenhahn, U., (1994), *Error Estimates for Tikhonov regularization in Hilbert Scales*, Numer. Funct. Anal. and Optimiz., 15(1&2), pp. 155-168.
- [55] Seidman, T. I. and Vogel, C. R., (1989), *Well posedness and convergence of some regularisation methods for non-linear ill-posed problems*, Inverse Problems, 5, 227-238.
- [56] Tautenhahn, U., (1994), *Error Estimates for Regularized Solutions of Nonlinear Ill-Posed Problems*, Inverse Problems, 10, No. 2, 485-500.
- [57] Tikhonov, A. N. and Arsenin, V. Y., (1977), *Solutions of Ill-Posed Problems*, John Wiley & Sons.
- [58] Tikhonov, A. N. and Goncharsky, A.V., (1987), *Ill-Posed Problems in the Natural Sciences*, MIR Publishers, Moscow.
- [59] Ulbrich, M., (1998), *A generalized Tikhonov Regularization for Nonlinear Inverse Problems*, Technical Report TUMM9810, Fakultat fur Mathematik, Technische U. Munchen.
- [60] Vainikko, G., (1992), *On the Discretization and Regularization of Ill-Posed Problems with noncompact operators*, Numer. Funct. Anal. And Optimiz., 13 (3-4), 381-396.
- [61] Vainikko, G., (1994), *Inverse problem of groundwater filtration: identifiability, discretization and regularization*, Proceedings of the GAMM-SIAM Symposium Inverse Problems in Diffusion Processes, SIAM Proceedings Series.

- [62] Viklands, T., (1999), *Routines for constructing approximating L- and a-curves*, UMNAD 246.99, Dept. of Comp. Science, Umea University, Sweden.
- [63] Willis, Robert and Yeh, W-G. W., (1987), *Groundwater Systems Planning and Management*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 07632.
- [64] Wood, W. L., (1993), *Introduction to Numerical Methods for Water Resources*, Clarendon Press-Oxford.
- [65] Yeh, W-G., (1981), *Aquifer parameter identification with optimum dimension in parameterization*, Water Resources Research, Vol. 17, No. 3, 664-672.
- [66] Yeh, W-G., (1986), *Review of parameter identification procedures in groundwater hidrology: the inverse problem*, Water Resources Research, Vol. 22, No. 2, 95-108.
- [67] Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P. and Nocedal, J., (1994), *L-BFGS-B Fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization*, Northwestern University, Department of Electrical Engineering and Computer Science.