



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA**

FACULTAD DE INGENIERÍA

**DISEÑO ÓPTIMO DE REDES DE MONITOREO DE
LA CALIDAD DEL AGUA SUBTERRÁNEA CON
MUESTREO A DIFERENTES PROFUNDIDADES**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERÍA

INGENIERÍA CIVIL – HIDRÁULICA

PRESENTA:

M.I. ROEL SIMUTA CHAMPO

DIRECTORA DE TESIS:

DRA. GRACIELA HERRERA ZAMARRÓN



CAMPUS MORELOS, MÉXICO, 2012.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: **Dr. Álvaro A. Aldama Rodríguez.**

Secretario: **Dr. Francisco Javier Aparicio Mijares**

1er. Vocal: **Dra. Graciela Herrera Zamarrón**

2do. Vocal: **Dr. Jaime Collado Moctezuma**

3er. Vocal: **Dra. María Joselina Espinoza Ayala**

1er. Suplente: **Dr. Ramón Domínguez Mora**

2do. Suplente: **Dr. David G. Romero Vargas**

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Jiutepec, Morelos, México

TUTOR DE TESIS

Dra. Graciela del Socorro Herrera Zamarrón


FIRMA

AGRADECIMIENTOS

A mi directora de tesis: Dra. Graciela Herrera Zamarrón.

Por sus consejos, comentarios, paciencia y tiempo dedicado para el desarrollo de este trabajo.

A mi comité tutorial:

Dr. Álvaro A. Aldama Rodríguez, Dr. Francisco Javier Aparicio Mijares, Dra. María Joselina Espinosa Ayala y Dra. Graciela Herrera Zamarrón.

Por su paciencia, sugerencias y manifiesto deseo de que este esfuerzo fuera concluido.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT).

Por la beca que me otorgó para realizar mis estudios de doctorado.

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).

A la Dra. Justina Longina Castellanos Noda

Por su apoyo en la programación para la aplicación del método de optimización algoritmo genético y por las sugerencias hechas para el desarrollo de este trabajo.

Al Fís. José Luis Olivares

Por su apoyo en asesorías para la configuración de diversos programas tales como Argus One, Visual Fortran, Fortran Intel y GWQMonitor y por las sugerencias realizadas para el desarrollo de este trabajo.

Al Dr. Ángel Pérez

Por las asesorías de programación en Visual Fortran mismas que me fueron de gran ayuda para poder programar diferentes subrutinas aplicadas en este trabajo.

A mis compañeros

Jesica Briseño Ruiz y Hugo E. Júnez Ferreira, por las sugerencias y consejos dados durante el desarrollo de este trabajo.

A la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

Por la beca que me otorgó para realizar los trámites de titulación e impresión de tesis.

A mis profesores

A mi jurado

DEDICATORIA

A DIOS.

Porque él da la sabiduría y de su boca viene la inteligencia y la ciencia (Proverbios 2,6).

A mi esposa: Elisama.

Que durante el tiempo que hemos compartido siempre me ha apoyado. Gracias por comprenderme en mis deseos de superación.

A mis hijos: Roel David y Róssel Elí.

A mis padres: Santana Simuta Montejo y Elvia Champo Bautista.

Por el esfuerzo, cariño y ejemplo que le han dado a mi vida.

Resumen

Los sistemas de monitoreo de la calidad del agua subterránea a largo plazo son de gran ayuda para los estudios de contaminación de este recurso, pero representan el componente de costo más alto debido a que incluyen los costos asociados con la operación y análisis de las muestras de los pozos. La reducción de dichos costos se puede obtener por medio del muestreo de menos pozos, o por medio del muestreo de los mismos pozos pero reduciendo la frecuencia de muestreo, o por medio de la combinación de ambas estrategias; sin reducir significativamente la calidad de la estimación que se puede obtener de los datos recolectados. Por otro lado, en este tipo de monitoreo es importante considerar que la concentración de los contaminantes en el agua puede variar en la vertical. Con el fin de encontrar una mejor estimación de la concentración real de los contaminantes en una pluma, puede ser necesario tomar muestras a diferentes profundidades en la misma posición. Un diseño óptimo de monitoreo en tres dimensiones permite identificar de mejor manera las variaciones de la concentración de los contaminantes en todas las direcciones espaciales a un costo mínimo.

En el presente trabajo se extiende la metodología para el diseño óptimo espacio-temporal de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea propuesta por Herrera (1998) y, Herrera y Pinder (2005), para considerar mediciones a diferentes profundidades en el diseño. La metodología combina simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea, un ensamble suavizado de Herrera (ESH) y un método de optimización secuencial. Otra de las modificaciones hechas al método es que se incorpora el uso de un algoritmo genético además del método de optimización secuencial.

Para la simulación estocástica es necesario obtener un gran número de realizaciones de la conductividad hidráulica (K). A menor número de realizaciones de K menor será el esfuerzo computacional en la simulación estocástica. Por lo anterior, en este trabajo se hace un análisis de convergencia de las realizaciones en tres dimensiones de K , para ello, se compara el método de muestreo por hipercubo latino (LHS) con el método de simulación secuencial gaussiana disponible en la librería GSLIB (Deutsch y Journel, 1998).

Abstract

Long-term groundwater quality monitoring systems are an aid for groundwater contamination studies, but they represent the component of highest cost, because they include the costs associated with wells operation and sample analysis. The costs reduction can be obtained through sampling less wells, or sampling the same wells but with a reduced frequency, or by the combination of both strategies; without significantly reducing the quality of the estimation that can be obtained from the collected data. On the other hand, in groundwater quality monitoring it is important to consider that groundwater contaminant concentration can vary vertically. In order to find a better estimate of the actual concentration of contaminants in a groundwater plume, it may be necessary to sample at different depths at the same location. A sampling optimal design in three dimensions allows identifying in a better way the contaminant-concentration variations in all spatial directions at a minimum cost.

This thesis extends the methodology introduced by Herrera (1998) and, Herrera and Pinder (2005) to consider measurements at different depths in the optimal sampling network design. The method combines flow and transport stochastic simulation, an ensemble smoother of Herrera (ESH) and a sequential optimization method. Another modification to the method is that in this thesis a genetic algorithm in addition to the sequential optimization method is used.

For the stochastic simulation it is necessary to obtain a large number of hydraulic conductivity (K) realizations. A smaller number of K realizations reduce the computational effort involved in the stochastic simulation. Therefore, this thesis includes a convergence analysis of three dimensional K realizations. To achieve this, the latin hypercube sampling (LHS) method is compared with the sequential Gaussian simulation method available in GSLIB (Deutsch y Journel, 1998).

ÍNDICE GENERAL

Capítulo 1. Introducción.....	1
Capítulo 2. Estado del arte	6
2.1 Diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea	6
2.1.1 Métodos estadísticos.....	8
2.1.2 Métodos probabilísticos.....	10
2.2 Análisis de convergencia de la conductividad hidráulica	15
Capítulo 3. Análisis de convergencia de la conductividad hidráulica.....	19
3.1 Metodología.....	19
3.2 Muestreo por hipercubo latino (latin hypercube sampling, LHS)	20
3.3 Simulación secuencial gaussiana.....	21
3.4 Ejemplo 1.....	21
3.4.1 Comparación de resultados para el ejemplo 1	22
3.5 Ejemplo 2.....	25
3.5.1 Comparación de resultados para el ejemplo 2	26
Capítulo 4. Extensión del método de Herrera al monitoreo en 3D.....	30
4.1 Metodología.....	30
4.1.1 Simulación estocástica.....	30
4.1.2 Filtro de Kalman	33
4.1.3 Método de estimación propuesto	38
4.2 Estimación de los momentos iniciales por simulación estocástica	39
4.3 Optimización de la red de monitoreo del agua subterránea	40
4.3.1 Método de optimización secuencial.....	41
4.4 Programa GWQMonitor	42
4.5 Problema ejemplo 1.....	42
4.5.1 Modelo estocástico.....	44
4.5.2 Selección de los pozos de monitoreo y el calendario de monitoreo	45
4.5.3 Comparación con el ejemplo en 2D de Herrera y Pinder	50
4.6 Problema ejemplo 2.....	52
4.6.1 Modelo estocástico.....	53
4.6.2 Selección de los pozos de monitoreo y el calendario de monitoreo	54
4.6.3 Validación de la red.....	57

Capítulo 5. Aplicación del método de optimización algoritmo genético simple.....	60
5.1 Algoritmo genético simple.....	60
5.1.1 Procedimiento de aplicación del algoritmo genético.....	64
5.1.2 Procedimiento de cruce.....	66
5.1.3 Procedimiento de mutación.....	68
5.2 Probar el método de optimización AG para diferentes valores de probabilidad de cruce, probabilidad de mutación y tamaño de la población	69
5.2.1 Problema ejemplo en 2D.....	70
5.2.2 Modelo de flujo y transporte en 2D.....	70
5.2.3 Simulación estocástica.....	71
5.2.4 Diseño de la red 2D.....	72
5.2.5 Resultados	72
5.3 Problema ejemplo en 3D	76
5.3.1 Diseño de la red de monitoreo en 3D.....	77
Capítulo 6. Conclusiones y recomendaciones.....	81
6.1 Conclusiones	81
6.2 Recomendaciones.....	83

Bibliografía

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1. Comparación de los errores de la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 1).	23
Figura 3.2. Comparación de los errores de la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 1).	24
Figura 3.3. Comparación de los errores de la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 3D (ejemplo 1).	24
Figura 3.4. Comparación de los errores de la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 3D (ejemplo 1).	25
Figura 3.5. Comparación de los errores en la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 2).	27
Figura 3.6. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 2).	27
Figura 3.7. Comparación del error de la media de $\ln(K)$, alcance igual a 672 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).....	28
Figura 3.8. Comparación de los errores en la media de $\ln(K)$, alcance igual a 2500 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).....	28
Figura 3.9. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, alcance igual a 672 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).....	29
Figura 3.10. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, alcance igual a 2500 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).....	29
Figura 4.1. Modelo de flujo y transporte determinista con la pluma de contaminante a los 26 años.....	44
Figura 4.2. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y números de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptima en 3D para el ejemplo 1.....	46
Figura 4.3. Número de muestras contra varianza (a) y coeficiente de variación (b).....	48
Figura 4.4. Distribución del tiempo de monitoreo.....	49
Figura 4.5. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y número de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptimo en 2D (Herrera y Pinder, 2005).	50
Figura 4.6. Comparación del número de muestras calendarizadas en cada semestre para los diseños en 2D y 3D.....	52
Figura 4.7. Modelo determinista de flujo y transporte con la pluma de contaminante después de 26 años (las capas se numeran a partir del basamento hacia la parte superior)	54
Figura 4.8. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y número de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptima en 3D.....	55

Figura 4.9. Número de muestreo contra varianza (a) y coeficiente de variación (b).....	56
Figura 4.10. Distribución del tiempo de monitoreo de las cuatro capas.....	57
Figura 4.11. Concentración simulada y estimada (tiempo 48).....	58
Figura 4.12. Concentración simulada y estimada de los pozos 926 y 742.....	59
Figura 5.1. Selección proporcional o por ruleta (Kuri y Galaviz, 2002).	63
Figura 5.2. Cruzamiento de un punto (Kuri y Galaviz, 2002).	63
Figura 5.3. Diseño del modelo de flujo y transporte con la pluma de contaminante a los 26 años.....	71
Figura 5.4. Estimación de la varianza mínima con el método secuencial y el AG con población inicial aleatoria.	74
Figura 5.5. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruza y de mutación.....	74
Figura 5.6. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruza y de mutación.....	75
Figura 5.7. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruza y de mutación.....	75
Figura 5.8. Comparación de la varianza total del AG con el método secuencial.....	77
Figura 5.9. Puntos de monitoreo y el número de muestras a tomar por capa (AG).....	79
Figura 5.10. Distribución del monitoreo en el tiempo para cada capa.....	80

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 5.1 Valores de la varianza total mínima obtenidos para diferentes probabilidades de cruza y de mutación.....	76
--	----

Capítulo 1. Introducción

Lagos de todos los tamaños, grandes ríos y corrientes más pequeñas abundan a lo largo de nuestro planeta, pero el suministro más grande de agua dulce (en estado líquido) se encuentra por debajo de la superficie terrestre (EPA 1985). El agua subterránea conforma aproximadamente el 96% de toda el agua en estado líquido terrestre (EPA 1985).

El agua subterránea primeramente se almacena en acuíferos –formaciones geológicas de zonas saturadas permeables de roca, arena o grava– que contienen suficiente agua y son explotables por medio de pozos, norias o manantiales. En general ésta se mueve muy lentamente, en formaciones que contienen capas de arcillas consolidadas con poco fracturamiento, se mueve tan lento que solo se avanza unos pocos centímetros por año. En estratos que contienen arena y grava sin consolidar, el agua subterránea puede moverse 800 pies (244 m aproximadamente) o más en un año (EPA 1985). En cavernas de formaciones de calizas el agua subterránea puede moverse comparativamente mucho más rápido.

Los acuíferos se recargan por medio de la infiltración al subsuelo debido a la precipitación o desde cuerpos de agua superficial con los que están interconectados. En la mayoría de los acuíferos las áreas de recarga se encuentran muy cerca del superficie del suelo y pueden ser afectados de forma significativa por las actividades agrícolas, residenciales o industriales. La profundidad del agua subterránea por debajo de la superficie terrestre, el espesor y el tipo de suelo sobre el acuífero, y muchos otros factores influyen de forma importante en los procesos que dan origen a la contaminación de los acuíferos.

El agua subterránea se puede contaminar cuando las filtraciones de contaminantes entran al subsuelo y llegan al acuífero. Las fuentes de contaminación del agua subterránea más comunes pueden ser: vertederos de residuos peligrosos, residuos líquidos y tanques de almacenamiento (EPA 1985).

Otras fuentes de contaminación pueden ser las fosas sépticas, filtraciones de pesticidas y fertilizantes en las zonas agrícolas, derrames accidentales de combustible y productos químicos, filtraciones de residuos de petróleo del revestimiento de carreteras, vertederos clandestinos de residuos peligrosos, minas activas o abandonadas de carbón y minas de metales, entre otros.

Dadas las fuentes de contaminantes descritas anteriormente y considerando los problemas a la salud que éstas pudieran ocasionar si no son detectadas a tiempo y se implementan estrategias de protección o remediación de acuíferos, el monitoreo a largo plazo del agua subterránea es un elemento clave para la conservación y el mejoramiento de la calidad del agua subterránea en el futuro. El monitoreo de la calidad del agua subterránea de largo plazo se refiere a la recolección sistemática de datos de agua subterránea para determinar características físicas, químicas y biológicas a través de escalas de tiempo consideradas adecuadas para demostrar el cumplimiento de los objetivos de calidad del agua o para documentar cambios a largo plazo en el agua subterránea o contaminación del agua subterránea (ASCE, 2003).

Una definición alternativa del monitoreo de largo plazo es: prueba del agua subterránea sobre un periodo de tiempo extendido para recopilar las condiciones del agua subterránea, incluyendo la recolección de datos químicos, tales como PH o concentraciones de contaminantes, y datos físicos tales como niveles del agua o temperatura y en algunos casos, tipos o número de bacterias (ASCE, 2003).

En el monitoreo del agua subterránea es importante considerar que la concentración de los contaminantes del agua subterránea puede variar en la vertical. Es reconocido que si un pozo de muestreo tiene una rejilla grande, ésta tiene mayor probabilidad de interceptar una pluma de contaminante (Fetter, 1993). Sin embargo, esto puede resultar en una muestra de agua no representativa que puede tener serias implicaciones para la implementación de regulaciones del agua subterránea. Para encontrar la concentración de contaminantes real en una pluma

de agua subterránea, puede ser necesario muestrear a diferentes profundidades en la misma posición. Esto puede ser costoso no únicamente debido al costo inicial del pozo sino además debido a los costos de análisis químico múltiple para cada ronda de muestreo. El diseño óptimo de monitoreo en tres dimensiones permite considerar la heterogeneidad espacial del medio por el cual se mueve el contaminante e identificar las variaciones en sus concentraciones en todas las direcciones a un costo mínimo.

Por otro lado, Herrera (1998) propuso un método novedoso para el diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea, que elige tanto posiciones como tiempos de monitoreo. Este método usa una versión del ensamble suavizado (ES), propuesta por Herrera de forma independiente a la versión de van Leeuwen y Evensen (1996), acoplado con un modelo de flujo y transporte estocástico. Para optimizar la red de monitoreo usa un método de optimización secuencial. Posteriormente, Herrera *et al.* (2001) y, Herrera y Pinder (2005) lo probaron en un caso real y una serie de problemas hipotéticos. Zhang *et al.* (2005) utilizaron una modificación de este método para seleccionar cuándo y dónde tomar muestras para reducir la incertidumbre de la distribución estadística de un campo de concentración de contaminación del agua subterránea a un costo mínimo. Dokou y Pinder (2009) también lo utilizaron con algunas modificaciones para crear una estrategia de búsqueda óptima que identifica la fuente de un contaminante usando un número mínimo de muestras de calidad del agua subterránea, posteriormente Dokou y Pinder (2011) aplican dicha estrategia de búsqueda óptima a un caso que considera las tres dimensiones espaciales, esto es, se identifican las posiciones y profundidades de potenciales fuentes de contaminante. Una ventaja del ES es que las correlaciones espacio-tiempo se consideran de forma simultánea, lo cual da la posibilidad de usar información que se proporciona para cada muestra de forma eficiente.

El objetivo general de esta tesis es extender la metodología propuesta por Herrera (1998) y, Herrera y Pinder (2005) para el diseño espacio-temporal de redes de

monitoreo de la calidad del agua subterránea considerando la profundidad del monitoreo en el diseño.

Para alcanzar este objetivo se establecieron los siguientes objetivos particulares. Analizar la convergencia de las realizaciones de conductividad hidráulica para el método de simulación secuencial gaussiana utilizando diferentes semillas para el generador de números aleatorios. Para llevar a cabo la simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea es necesario obtener realizaciones de la conductividad hidráulica. Para el análisis de convergencia se comparan dos métodos que generan realizaciones de la conductividad hidráulica que son el método de muestreo por hipercubo latino (latyn hypercube sampling, LHS, Owen, 1994) llamado la técnica de muestreo de enrejado (lattice) y el método de simulación secuencial gaussiana disponible en GSLIB (Deutsch and Journel, 1998).

Incluir el método de optimización del tipo algoritmo genético como una opción en el diseño de la red de monitoreo y compararlo con el método de optimización actual. Una desventaja del método secuencial, usado por Herrera (1998), es que una vez que se fija una posición como parte de la red de monitoreo, ya no se puede mover y puede haber otra combinación que pudiera dar un mejor valor de la función objetivo. Se plantea usar un algoritmo genético simple en el proceso de optimización del diseño de la red de monitoreo y se compara con la red obtenida aplicando el método secuencial. Por otro lado, el algoritmo genético permitiría incluir el costo dentro de la función objetivo para trabajos posteriores.

En el capítulo 2 de esta tesis se presenta el estado del arte, para lo cual se hizo una revisión bibliográfica detallada considerando dos subtemas que tienen que ver con la metodología que se presenta en este trabajo, los dos subtemas considerados son: 1) diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea y 2) Análisis de convergencia de la conductividad hidráulica.

Cuando se resuelven las ecuaciones que describen el flujo y el transporte del agua subterránea y se considera a la conductividad hidráulica como una función espacial aleatoria, se tiene que la carga hidráulica, las velocidades y las concentraciones se convierten también en funciones espaciales aleatorias. Cuando ese es el caso, para llevar a cabo la simulación estocástica del flujo y del transporte del agua subterránea es necesario obtener un número de realizaciones de la conductividad hidráulica, por lo que surge la pregunta, ¿cuántas realizaciones de la conductividad hidráulica son necesarias para obtener una buena representación de las cantidades relevantes en un problema dado? Diferentes métodos requieren un número distinto de realizaciones; de aquí que es relevante trabajar con aquel que reduzca más el esfuerzo computacional. Por ese motivo, en el capítulo 3 se realiza un análisis de la convergencia de las realizaciones en tres dimensiones de la conductividad hidráulica utilizando el método de muestreo por hipercubo latino, (Owen, 1994) y simulación secuencial gaussiana (Deutsch and Journel, 1998).

En el capítulo 4 se desarrolla el diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea con selección en tres dimensiones de las posiciones de muestro usando un ensamble suavizado (ES).

En el capítulo 5 el método de optimización algoritmo genético simple se combina con el método secuencial para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea con muestreo a diferentes profundidades. Se presenta una comparación de los dos métodos de optimización.

Finalmente en el capítulo 6 se presentan las conclusiones y las recomendaciones de este trabajo.

Capítulo 2. Estado del arte

Para este trabajo se realizó una revisión bibliográfica considerando dos subtemas que tienen que ver con la metodología aquí presentada. Primeramente se revisaron artículos que presentan métodos para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea. En dicha revisión se expone la importancia del diseño de redes de monitoreo así como las principales características de los métodos propuestos. El segundo subtema tiene que ver con la generación de realizaciones de una variable incierta, proceso que se utilizará en la simulación del modelo estocástico de flujo y transporte basada en simulación Monte Carlo, por lo que se presenta una sección para el análisis de convergencia de la conductividad hidráulica, variable considerada como aleatoria en la metodología utilizada en este trabajo. La simulación estocástica requiere de un esfuerzo computacional considerable, y la revisión va encaminada a presentar trabajos en los que se ha realizado simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea y algún método que pudiera ayudar para reducir el esfuerzo computacional requerido.

2.1 Diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea

Los sistemas de monitoreo de la calidad del agua subterránea son una ayuda para los estudios de contaminación del agua subterránea, sin embargo, éstos representan la componente de más alto costo, debido a que generan costos asociados con la operación de los pozos y los análisis de las muestras. Por esta razón un problema importante es cómo reducir los costos asociados con el monitoreo de la calidad del agua subterránea sin reducir significativamente la calidad de la estimación que se obtiene de la colección de datos. El área que considera esta clase de problemas se conoce como diseño óptimo de redes de muestreo. Tal reducción se puede obtener por medio del muestreo de menos pozos, o muestreo de los mismos pozos pero con una reducción en la frecuencia

del muestreo, o por una combinación de ambas estrategias. Un principio básico en el diseño óptimo de una red de muestreo es que una estrategia efectiva debería de resultar en la selección de muestras de pozos localizados tal que no se adquiriera información redundante en el espacio (redundancia espacial); similarmente al seleccionar tiempos de muestreo en los pozos la muestra resultante no debería proporcionar información redundante en el tiempo (redundancia temporal).

Por otro lado, en el monitoreo del agua subterránea es importante considerar que la concentración de los contaminantes en el agua puede variar en la vertical. Es reconocido que si un pozo de muestreo tiene una rejilla grande, ésta tiene mayor probabilidad de interceptar una pluma de contaminante, sin embargo, esto puede resultar en una muestra de agua no representativa (Fetter, 1993). Con el fin de encontrar una mejor estimación de la concentración real de los contaminantes en una pluma, puede ser necesario tomar muestras a diferentes profundidades en la misma posición. Esto puede ser costoso no únicamente debido al costo de construcción del pozo sino además debido a los costos de análisis químico múltiple para cada ronda de muestreo. Un diseño óptimo de muestreo en tres dimensiones, como el que se propone en el presente trabajo, permitiría considerar la heterogeneidad espacial del medio por el cual se mueve el contaminante e identificar las variaciones en las concentraciones del contaminante en todas las direcciones a un costo mínimo.

Loaiciga *et al.* (1992) y ASCE (2003) revisaron métodos alternativos para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea evaluando los principios básicos de cada técnica. Dependiendo de la cantidad de datos e información disponible, la ASCE (2003) clasifica los métodos para el diseño de redes de monitoreo en tres tipos, los basados en reglas (Dhar y Datta, 2010), los estadísticos (Reed *et al.*, 2000; Cameron y Hunter, 2000; Reed y Minsker, 2004; Nunes *et al.*, 2004; Li y Hilton, 2005; Wu *et al.*, 2005; Wu *et al.*, 2006; Bierkens, 2006; Kim y Lee, 2007; Chadalavada y Datta, 2008; Dhar y Datta, 2010) y los

probabilísticos (Herrera, 1998; Wu, 2003; Herrera y Pinder, 2005; Zhank *et al.*, 2005; Bierkens, 2006; Kim y Lee, 2007; Kollat *et al.*, 2011). Se puede hacer una revisión detallada de los métodos descritos arriba en ASCE (2003).

El objetivo principal de los métodos anteriores es el de minimizar el costo de monitoreo por medio de la eliminación de datos redundantes sin que se afecte de forma significativa la precisión de la estimación. Los métodos pueden analizar la redundancia espacial o espacio-temporal. Dependiendo del tipo de análisis de redundancia el diseño de la red de monitoreo se puede clasificar como espacial o espacio-temporal. En el diseño de una red de monitoreo espacial únicamente se seleccionan las posiciones de monitoreo. Algunos trabajos recientes con esta clase de diseño son presentados por Reed *et al.* (2000), Wu (2003), Reed y Minsker (2004), Li y Hilton (2005), Wu *et al.* (2005) Wu *et al.* (2006), Bierkens (2006), Kim and Lee (2007), Chadalavada y Datta (2008), y Dhar y Datta (2010). En un diseño de red de monitoreo espacio-temporal, además del espacio, se considera el tiempo en el diseño de monitoreo. Este trabajo se centra principalmente en esta última clase de diseños.

Para el diseño de redes de monitoreo espacio-temporal se han usado métodos estadísticos y métodos probabilísticos. Dentro de los métodos estadísticos se han usado sobre todo análisis geoestadísticos y para métodos probabilísticos se ha usado sobre todo simulación estocástica y filtro de Kalman.

2.1.1 Métodos estadísticos

Cameron y Hunter (2000) desarrollaron un algoritmo espacial y temporal para optimizar redes de monitoreo del agua subterránea a largo plazo. Por medio de un análisis geoestadístico, las redundancias espacial y temporal se identificaron de forma separada. Este algoritmo involucra el cálculo de un variograma temporal compuesto para determinar la redundancia mínima en el intervalo de monitoreo. Bajo esta medida de correlación entre eventos de monitoreo, el espacio de tiempo

en el cual el variograma alcanza la cima es la misma correlación en la medición y son por lo tanto no redundantes. El algoritmo espacial supone que las posiciones de los pozos son redundantes si pozos cercanos entre sí ofrecen la misma información estadística acerca de la pluma bajo análisis. Un pozo se considera redundante si al mover éste no se tienen cambios significantes en: (i) el mapa interpolado de la pluma; (ii) la varianza de kriging local en esa sección de la pluma; y (iii) el promedio de la varianza de kriging global. Para identificar la redundancia de un pozo, se calcularon los pesos de kriging local dentro de los pesos globales y usados para evaluar cada contribución relativa de cada pozo para el mapa de la pluma interpolada. Para remover temporalmente ese subconjunto de pozos con los pesos de kriging global más bajos y re-mapear la pluma, esto fue posible para determinar cuántos pozos pueden ser removidos sin perder información crítica. Pruebas en los resultados de la Reserva Militar de Massachusetts indicaron un ahorro sustancial en el monitoreo, los costos de análisis y operacionales se pueden realizar utilizando este método.

Nunes *et al.* (2004) presentan una metodología para reducir la dimensión de un red de monitoreo del agua subterránea en el contexto de reducción de la varianza, acoplado con una medida de la redundancia temporal, tal que se detectan las variabilidades temporales locales importantes, y los costos de exploración que consiste en el tiempo tomado del recorrido entre las estaciones. Definen que el término calidad de datos se refiere a la precisión espacial y redundancia temporal, y tiempo de muestreo se refiere a la suma del tiempo de monitoreo más el tiempo que se tarda el recorrido entre las estaciones. La selección del nuevo diseño de red de monitoreo del agua subterránea lo realizaron con un análisis costo-beneficio de la ganancia en la calidad de datos y tiempo de muestreo. Resolvieron el problema de optimización con el método de recosido simulado. Aplicaron el método en un caso de estudio hipotético que consiste en una red de monitoreo con 32 estaciones. Después de aplicar la metodología obtienen como solución óptima una red de monitoreo del agua subterránea de 23 estaciones.

2.1.2 Métodos probabilísticos

Un método innovativo para el diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea, que elige tanto posiciones como tiempos de monitoreo, fue propuesto por Herrera (1998). Este método usa lo que en este trabajo llamamos ensamble suavizado (ES) acoplado con modelo de flujo y transporte estocástico y un método de optimización secuencial y fue desarrollado de forma independiente del de van Leeuwen and Evensen (1996). Éste ha sido llamado antes filtro de Kalman estático (Herrera 1998) y filtro de Kalman ensamblado estático (Nowak et al., 2010). Fue aplicado posteriormente por Herrera *et al.* (2001), Herrera y Pinder (2005) y una modificación de éste por Zhang *et al.* (2005) y Dokou y Pinder (2009). Una ventaja de usar el ES es que las correlaciones espacio-tiempo se consideran de forma simultánea, lo cual da la posibilidad de usar información que se proporciona para cada muestra en un camino más eficiente. Desde nuestro conocimiento esta fue la primera aplicación de ES en el campo hidrogeológico. El método de Herrera (1998) se describe en el capítulo 4 de este trabajo.

Zhang *et al.* (2005) modificó tres elementos de la metodología propuesta por Herrera (1998). El objetivo del diseño de la red de monitoreo fue determinar las posiciones de monitoreo en tiempos fijos para determinar una curva de tendencia que describe cómo cambian las concentraciones con el tiempo dentro de una precisión establecida en un costo mínimo. Herrera (1998) usó simulación secuencial gaussiana para obtener las realizaciones de la conductividad hidráulica mientras que Zhang *et al.* usaron la técnica conocida como muestreo por hipercubo latino (LHS por sus siglas en inglés). Para la optimización Zhang *et al.* usaron algoritmo genético en lugar del método de optimización secuencial usado por Herrera (1998) y por Herrera y Pinder (2005). Empleando la estrategia de diseño óptimo propuesta, se realizó un diseño de red de monitoreo del agua subterránea de costo efectivo.

Recientemente, Kollat *et al.* (2011) propusieron y mostraron el uso de un filtro de Kalman ensamblado y un método de optimización bayesiano jerárquico con muchos objetivos para un proceso de diseño de monitoreo de la calidad del agua subterránea a largo plazo. El método fue probado en un problema ejemplo basado en un experimento de laboratorio con un trazador de cloruro de amonio en 3D.

De los artículos revisados en este trabajo, los únicos que han incluido a las profundidades de muestreo como parte del diseño son el de Dokou y Pinder (2011) y el de Kollat *et al.* (2011). El primero tiene un objetivo diferente al que se presenta aquí, ya que en el diseño localizan las fuentes de contaminantes. El segundo trabajo es diferente al que aquí se presenta ya que ellos estiman las concentraciones de contaminante usando EnKF y en este trabajo se usa el ES, ellos utilizaron el método de turning band para generar las realizaciones de la permeabilidad hidráulica para la simulación estocástica mientras que aquí se usa el método de simulación secuencial gaussiana (Deutsch and Journel, 1998). En lugar del método de optimización bayesiano jerárquico aquí se usa un método de optimización secuencial.

El problema de estimación discreto consiste de calcular un estimado de un estado discreto en el tiempo t_n basado en un conjunto de datos dados. Si los datos incluyen mediciones en los tiempo $t_1 \dots t_l$ con $l = n$, el problema se conoce como filtrado discreto; si $l > n$, el problema es llamado suavizado discreto (Jazwinzki, 1970), En Herrera y Pinder (2005), se sugirió el uso de periodos de manejo para el proceso de diseño de una red de monitoreo óptima. Cuando se usan estos periodos de manejo es posible el uso de datos colectados por la red de monitoreo para actualizar la estimación en todo el periodo de manejo. Kollat *et al.* (2011) sugieren también el uso de periodos de manejo, pero usar un EnKF en el proceso implica que los datos colectados en un tiempo dado se usan para actualizar la incertidumbre de la concentración estimada sólo en los tiempos presente y futuro. En este trabajo se usa por primera vez el ESH para el diseño óptimo de redes de monitoreo con la selección de las posiciones de monitoreo en 3D.

Una herramienta matemática importante para el diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea son los métodos de optimización. Estos métodos son algoritmos numéricos de búsqueda que se pueden usar para que automáticamente se obtenga una red de monitoreo óptima que satisfaga los objetivos de monitoreo y las restricciones especificados por el usuario. Los métodos de optimización matemática ofrecen un enfoque automático para identificar planes óptimos de monitoreo de manera rápida (ASCE, 2003). En los últimos años, diversos métodos de optimización matemática se han aplicado para el diseño de redes de monitoreo óptimo, que optimizan diferentes objetivos de diseño. A continuación se describen algunos de ellos.

Reed *et al.* (2000) usaron un algoritmo genético para minimizar el costo de monitoreo combinado con el error en la estimación de la masa del contaminante.

Herrera, (1998) y Herrera y Pinder, (2005) usaron un método de optimización secuencial combinado con simulación estocástica y un filtro de Kalman el cual minimiza la varianza total del error de la estimación.

Reed y Minsker, (2004) usaron el método de optimización algoritmo genético II sorteado no dominado combinado con kriging para cuantificar la mejor opción de diseño entre los siguientes cuatro criterios de diseño: (1) costo, (2) precisión relativa de las estimaciones de concentración local, (3) precisión relativa de la estimación de masa global, y (4) incertidumbre local como medida para las varianzas de estimación de kriging.

Li y Hilton, (2005) aplicaron un algoritmo de optimización conocido como colonia de hormigas para minimizar el costo de monitoreo, considerando minimizar el número de posiciones de monitoreo conservando la pérdida de datos totales (la raíz del error cuadrático medio de las estimaciones de las concentraciones) bajo un valor preestablecido.

Wu *et al.* (2005) usaron el algoritmo genético para minimizar el costo de monitoreo considerando la precisión de la estimación global de la masa del contaminante y la estimación de los momentos; es una metodología similar a la presentada por Reed *et al.* (2000); la diferencia es que Wu *et al.* agregaron el primer y segundo momento de una pluma de contaminante tridimensional como nuevas restricciones en la formulación de la optimización.

Zhang *et al.* (2005) aplicaron la misma función objetivo que propusieron Herrera y Pinder (2005); la diferencia es que para la optimización Zhang *et al.* usaron el algoritmo genético en lugar del método secuencial usado por Herrera y Pinder (2005).

Wu *et al.* (2006) usaron dos métodos de optimización llamados algoritmo genético simple Monte Carlo y algoritmo genético ruidoso. Para el algoritmo genético simple Monte Carlo se aplica la simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea. La función objetivo es la misma que presentan Wu *et al.* (2005).

Bierkens (2006) usó un método que optimiza secuencialmente. El método minimiza un criterio de costo que es una función del riesgo de un contaminante sin detectar, el costo de instalar y mantener una red de monitoreo, y la realización de análisis químicos.

Kim y Lee (2007) aplicaron un método de optimización secuencial el cual usa el mapa de probabilidad para elegir la posición óptima para un nuevo pozo de monitoreo. Si, en esa posición, el valor esperado de la información de monitoreo está sobre un valor estándar, un nuevo pozo de monitoreo se instala. En el caso contrario todo el proceso, así como la instalación, se detiene. En el primer caso, las muestras se toman de pozos instalados recientemente y, usando este dato, las realizaciones de la pluma de contaminante en conflicto con los datos del contaminante del nuevo pozo se excluyen. En el resto de los escenarios que

coinciden con el dato del pozo, el mapa de probabilidad de la posición del contaminante se puede actualizar. Este proceso se repite para cada nueva posición.

Chadalavada y Datta (2008) usaron un algoritmo genético y compararon dos funciones objetivos. El primer objetivo fue el de minimizar la sumatoria de concentraciones sin monitorear en diferentes posiciones potenciales de monitoreo. La segunda función objetivo considerada es la minimización de las varianzas de la estimación de las concentraciones del contaminante en varias posiciones sin monitorear.

Dhar y Datta (2010) usaron una metodología similar a la desarrollada por Li y Hilton (2005). La diferencia fue que en lugar de usar un algoritmo de optimización de colonia de hormigas, Dhar y Datta usaron una formulación lineal que asegura matemáticamente obtener el óptimo global. Usaron el algoritmo de ramificación y acotación.

Como ya se mencionó antes, Herrera (1998) y, Herrera y Pinder (2005) presentaron una metodología para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea que usa un método de optimización secuencial para el diseño de la red. Una desventaja del método secuencial es que toda vez que se ha fijado una posición como parte de la red de monitoreo, ya no se puede mover y puede haber otra combinación que pudiera dar un mejor valor de la función objetivo. Por lo anterior, en el presente trabajo se usó un algoritmo genético simple en el proceso de optimización del diseño de la red de monitoreo.

Se hizo una comparación de los resultados obtenidos usando ambos métodos de optimización en el diseño de la red de monitoreo.

Por otro lado, como ya se ha mencionado anteriormente, Zhang et, al. (2005) usaron el algoritmo genético en lugar del método secuencial usado por Herrera y

Pinder (2005), Ellos consideran que el número total de posibles posiciones de monitoreo y tiempos totales de los periodos de monitoreo podría ser muy grande, para reducir este número y hacer el algoritmo genético más eficiente y aplicable a un sistema grande, ellos obtuvieron las soluciones para cada periodo de monitoreo de forma secuencial, conservando el objetivo sin cambio, minimizando el costo total de todos los periodos de muestreo. En el presente trabajo las soluciones no se obtienen en forma secuencial como en Zhang et, al. (2005). Aquí se aplica el algoritmo genético considerando todas las posibles posiciones y tiempos totales de monitoreo.

2.2 Análisis de convergencia de la conductividad hidráulica

Para este trabajo el método requiere de la aplicación de simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea, por lo que, hay que determinar el parámetro de mayor incertidumbre. Debido a la heterogeneidad de los sistemas de agua subterránea natural, cualquier descripción cuantitativa de las propiedades hidráulica del acuífero está sujeta a incertidumbre. Consecuentemente, las predicciones de flujo y transporte también están sujetas a incertidumbre. Los modelos estocásticos de flujo y transporte representan esas incertidumbres en términos de variables aleatorias (conductividad hidráulica, condiciones de frontera, recarga vertical, etc.). Generalmente se calculan diferentes momentos de las soluciones de esos modelos, los más usuales son, la media y la matriz de covarianza. La simulación Monte Carlo es un método usado para calcular tales momentos y consiste en generar varias realizaciones de la variable aleatoria considerada y calcular los momentos de interés a través de los promedios de las realizaciones (Zhang, 2002). Diversos investigadores han usado esta clase de método en problemas de agua subterránea para diferentes propósitos. Por ejemplo, Massmann y Frezze (1987) calcularon la probabilidad de detección de una red de monitoreo usando simulación estocástica del transporte de un contaminante, representaron a la conductividad hidráulica como la variable aleatoria; McLaughlin et., al. (1993) usaron simulación estocástica del flujo y

transporte de un soluto en el agua subterránea a través de un campo aleatorio de conductividades hidráulicas generadas sintéticamente para caracterizar la contaminación del agua subterránea; Wong y Yeh (2002) usaron un enfoque sistemático para resolver un problema de manejo de un sistema de suministro de agua subterránea contaminada, usaron un campo de conductividad hidráulica aleatorio para reproducir la variabilidad de contaminación en cada pozo de extracción; Herrera y Pinder (2005) y usaron simulación estocástica combinado con filtro de Kalman y un método de optimización para el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea, la conductividad hidráulica y la fuente de contaminante se representaron como variables aleatorias. En trabajos más recientes se propuso además la calibración de modelos estocásticos (Franssen *et al.*, 2009; Sun *et al.*, 2009; Briseño-Ruiz, 2012). Una consideración práctica importante en la aplicación de tales métodos es su costo computacional.

La técnica Monte Carlo proporciona un método práctico para evaluar las incertidumbres (ver Zhang, 2002, para una revisión general del método Monte Carlo). La incertidumbre se representa por medio de una distribución de probabilidad o por medio de cantidades relacionadas tales como los momentos estadísticos. Cuando las ecuaciones que describen el flujo y transporte del agua subterránea se resuelven y el campo de conductividad hidráulica se considera como una función espacial aleatoria, la carga hidráulica, las velocidades y las concentraciones son también funciones espaciales aleatorias. Para resolver las ecuaciones de flujo y transporte por medio de simulación Monte Carlo es necesario obtener realizaciones de la conductividad hidráulica, y generar una corrida del modelo de flujo y transporte del agua subterránea para cada realización. Para problemas a escala de campo, el tiempo computacional que se requiere para correr varias veces esos modelos puede ser enorme. Un método de simulación Monte Carlo se basa en la hipótesis de que los momentos de las realizaciones tienden a los momentos verdaderos cuando el número de realizaciones incrementa (ver Orr, 1993 y Harter, 1994 para una revisión detallada). El esfuerzo computacional que requiere el método Monte Carlo cuando

se trabaja con un problema de flujo y transporte dependerá del número de realizaciones requeridas para la convergencia de los momentos de más interés de la carga hidráulica y/o concentraciones, es natural esperar que este número sea más pequeño si la convergencia de los momentos de la conductividad hidráulica requieren menos realizaciones. Así, una pregunta importante es: ¿cuántas realizaciones de la conductividad hidráulica son necesarias para obtener una buena representación de los momentos relevantes en un problema dado?

En un trabajo previo realizado por Zhang y Pinder (2003) se reporta un método Monte Carlo que reduce el esfuerzo computacional que se requiere para la simulación de del flujo y transporte del agua subterránea. El método es un caso específico del método de muestreo por hipercubo latino (latyn hypercube sampling, LHS) llamado la técnica de muestreo de enrejado (lattice). Ellos compararon este método con otros tres algoritmos que generan campos aleatorios: simulación secuencial gaussiana (SGS), método de bandas rotantes y método de descomposición LU. Algunas de las conclusiones obtenidas por Zhang y Pinder (2003) son las siguientes:

- Observaron que cuando se usan semillas aleatorias diferentes los estadísticos de las realizaciones pueden ser diferentes.
- La matriz de covarianza de las realizaciones obtenidas con el LHS converge más rápido que cualquiera de los otros tres métodos.
- Los estadísticos de las realizaciones obtenidas con LHS no son afectados por las semillas.
- La técnica del LHS reduce el esfuerzo computacional.

En el presente trabajo se hace un análisis de convergencia de la conductividad hidráulica considerando las tres dimensiones espaciales, ya que Zhang y Pinder (2003) únicamente consideraron dos dimensiones en su análisis. Para el análisis de convergencia se comparan los métodos SGS y LHS para ver cuál de los métodos converge más rápido a los momentos. Lo anterior con la idea de aplicar

el método que converge más rápido para generar las realizaciones de la conductividad hidráulica requeridas para la simulación estocástica.

Capítulo 3. Análisis de convergencia de la conductividad hidráulica

En la revisión del estado del arte se encontró que Zhang y Pinder (2003) presentan un análisis de la convergencia de $\ln(K)$ el que comparan cuatro métodos para generar realizaciones de dicho parámetro. Los métodos considerados en dicho análisis son: descomposición LU, método de bandas rotantes, simulación secuencial gaussiana (SGS) y el método de muestreo por hipercubo latino (LHS por sus siglas en inglés) llamada técnica de muestreo por de enrejado (lattice). En el análisis que ellos presentan los métodos de SGS y LHS son los que mejor se comportan. Zhang y Pinder únicamente consideran dos dimensiones y una sola función de autocovarianza (exponencial). En este capítulo se presenta un análisis de la convergencia considerando dos funciones de autocovarianza (exponencial y esférico) para dos alcances diferentes, además de considerar las tres dimensiones espaciales (x,y,z) en el análisis (Simuta-Champo y Herrera-Zamarrón, 2010).

3.1 Metodología

Se compararon las técnicas LHS y SGS con respecto a la media y la matriz de covarianza de las realizaciones de $\ln(K)$ generadas por cada método. Se supuso un campo aleatorio de $\ln(K)$ estacionario de segundo orden e isotrópico, para el cual se supone que se conocen los estadísticos. El análisis se hizo para dos y tres dimensiones, y para dos alcances diferentes; para lo cual se consideraron dos problemas: (1) la matriz de correlación objetivo está dada por una función de autocovarianza del tipo exponencial de $\ln(K)$ y (2) la matriz de correlación objetivo está dada por una función de autocovarianza del tipo esférico.

Para cada uno de los dos métodos, se generaron diferentes números de realizaciones de $\ln(K)$ en un rango de 100 a 1800. Se calcularon los estadísticos relevantes para los diferentes números de realizaciones y se compararon con los

estadísticos verdaderos. La raíz del error cuadrático medio (RECM) se usó para este fin. Para la comparación de la media, RECM se calcula como $\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i^2}$, donde r_i es la diferencia entre la media de las realizaciones y la media verdadera en la posición i , y N es el número total de posiciones. Para la comparación de la covarianza el error se calculó como $\sqrt{\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N r_{ij}^2}$, donde r_{ij} es la diferencia entre la covarianza (en la posición i y j) calculada de las realizaciones y la covarianza verdadera.

Para el problema (2), en el que se supone un campo de conductividad hidráulica aleatorio tridimensional, se analiza el efecto que tienen diferentes semillas aleatorias. Para cada número de realizaciones se hicieron cinco corridas con cinco semillas aleatorias diferentes y se calcularon las desviaciones de cada corrida con respecto a los estadísticos verdaderos.

3.2 Muestreo por hipercubo latino (latin hypercube sampling, LHS)

El muestreo por hipercubo latino (LHS) se desarrolló para responder a la necesidad de evaluar la incertidumbre para una clase particular de problemas (Wyss and Jorgensen, 1998). Considere una variable Y que es una función de p variables estadísticamente independientes X^1, X^2, \dots, X^p , y F_j es la distribución de X^j , $j = 1, 2, \dots, p$. El muestreo por hipercubo latino selecciona n diferentes valores de cada una de esas p variables de la siguiente manera (Owen, 1994):

$$X_i^j = F_j^{-1}((\pi_j(i) - U_{ij})/n), \quad i = 1, \dots, n \text{ y } j = 1, \dots, p \quad (3.1)$$

donde $\pi_j(1), \dots, \pi_j(n)$ es una permutación aleatoria de $1, \dots, n$ en el que todos los $n!$ resultantes son igualmente probables, U_{ij} es una variable aleatoria $U(0,1)$, y las p permutaciones y np variables uniformes son mutuamente independientes. En otras palabras, el método LHS se caracteriza por una segmentación de la distribución

de probabilidad propuesta en un número de intervalos no sobrepuestos de igual probabilidad. De cada intervalo se muestrea un valor aleatorio.

La técnica de muestreo de enrejado (lattice sampling technique) es un caso especial del LHS. En el muestreo de enrejado, las F_j son distribuciones uniformes discretas y n es un múltiplo del número de átomos en cada F_j . En este caso las U_{ij} no afectan a las X_i^j , y todas ellas se toman como 0.5 (Owen, 1994).

3.3 Simulación secuencial gaussiana

El método de simulación secuencial gaussiana (SGS) es un algoritmo de simulación estocástica bien conocido que se usa para generar campos aleatorios gaussianos (para una revisión de la teoría ver Deutsch y Journel, 1998). El algoritmo que se usó en este trabajo se tomó del GSLIB (Deutsch y Journel, 1998), un paquete de software geoestadístico desarrollado en la Universidad de Stanford.

3.4 Ejemplo 1

Se supone un campo aleatorio de $\ln(K)$, el cual es estacionario de segundo orden e isotrópico. Se generaron realizaciones sobre una malla de 27 x 27 elementos cuadrados, cada elemento tiene 100 m de longitud en cada lado, se tienen dos capas uniformes en la vertical de 150 m de espesor cada una. La matriz de correlación objetivo está dada por la función de autocovarianza para la cual se supone:

$$C(h) = C_1 \exp[-3h] \quad (3.2)$$

$$h = \sqrt{\left(\frac{h_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{h_y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{h_z}{a_z}\right)^2}$$

donde $C(h)$ es la covarianza de las posiciones separadas una distancia h ; h_x, h_y y h_z son las distancias entre dos posiciones en las direcciones x, y y z , respectivamente; y, a_x, a_y y a_z son los alcances en las direcciones x, y y z , respectivamente. Se consideran dos alcances en el análisis: 672 m y 2500 m ($a_x = a_y = a_z$), que están dentro del rango de valores de $\ln(K)$ reportados en la literatura (Gelhar, 1993), y se hizo el análisis considerando dos y tres dimensiones. Para el análisis en dos dimensiones se considera a $h_z = 0$. El ejemplo en 2D es el mismo que se reporta en Zhang and Pinder (2003).

3.4.1 Comparación de resultados para el ejemplo 1

La Figura 3.1 muestra la comparación los errores para la media de $\ln(K)$, de las realizaciones generadas con LHS contra las generadas con el SGS en 2D. La técnica de muestro de enrejado del LHS no tiene sesgo, por esa razón no se tienen errores para la media (Zhang y Pinder, 2003). La Figura 3.2 muestra la comparación del error de las covarianzas de $\ln(K)$, de las realizaciones generadas con LHS contra las generadas con el SGS en 2D. La curva LHS es suave y converge conforme el número de realizaciones se incrementa y cuando el número de realizaciones es igual o mayor a 800 el error ya no disminuye de manera significativa (la RECM es del orden de 0.001). El SGS presenta errores más altos que el LHS, así cuando se tienen 1500 realizaciones, el error con el SGS es de 0.026 cuando el alcance es de 672 m, y de 0.034 cuando el alcance es de 2500 m.

La Figura 3.3 muestra la comparación del error de la media de $\ln(K)$ para las realizaciones generadas por el LHS contra las obtenidas con el SGS en 3D. Las medias obtenidas con el LHS siempre presentan el mismo comportamiento, esto es, no se tienen desviaciones para las medias. La Figura 3.4 muestra la comparación del error de la covarianza de las realizaciones generadas con el LHS contra las del SGS en 3D. La curva del LHS es suave y converge conforme el número de realizaciones aumenta y cuando el número de realizaciones es igual o

mayor que 1500 el error ya no disminuya de forma significativa (la RECM para el LHS es del orden de 0.001). El SGS presenta errores más altos que el LHS, incluso cuando se tienen 1500 realizaciones, el error del SGS es de 0.025 si el alcance es de 672 m, y de 0.029 si el alcance es igual a 2500 m.

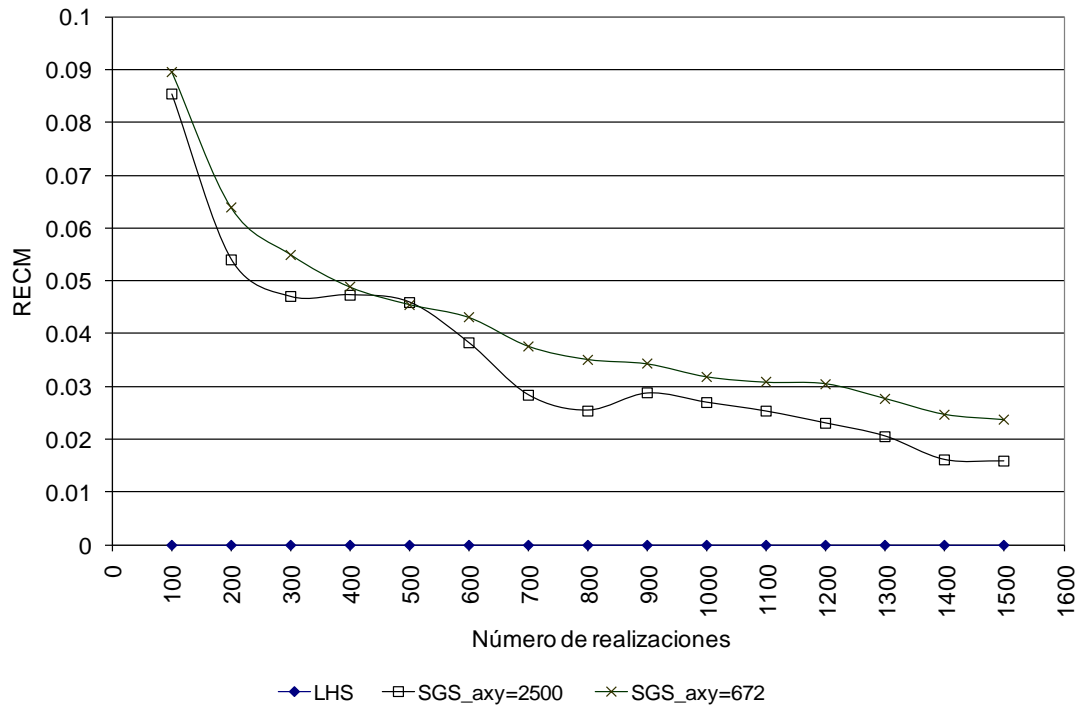


Figura 3.1. Comparación de los errores de la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 1).

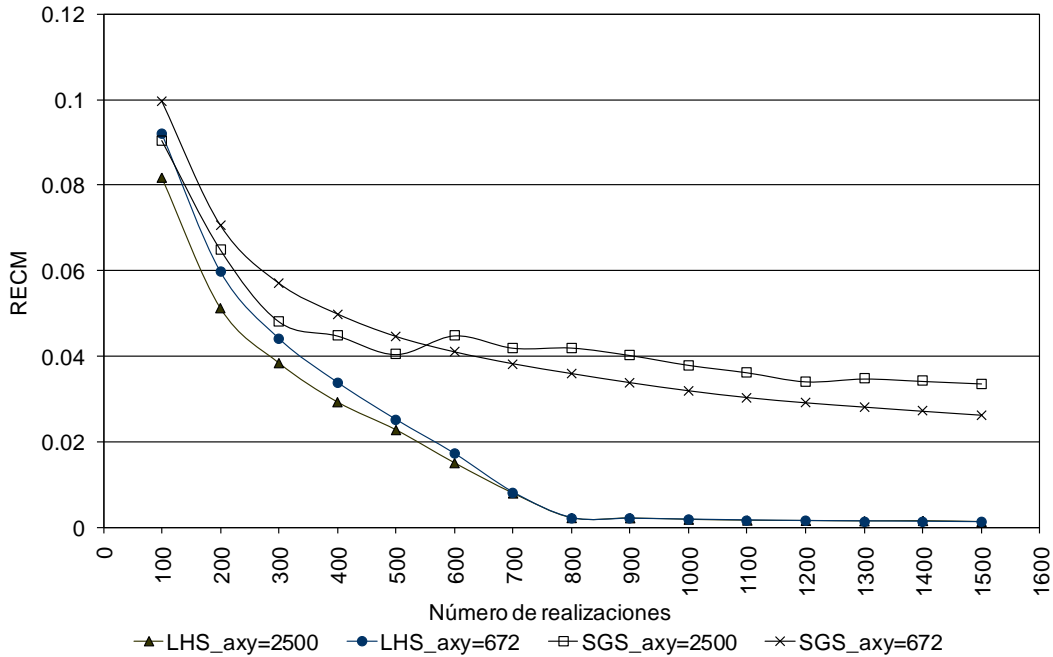


Figura 3.2. Comparación de los errores de la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 1).

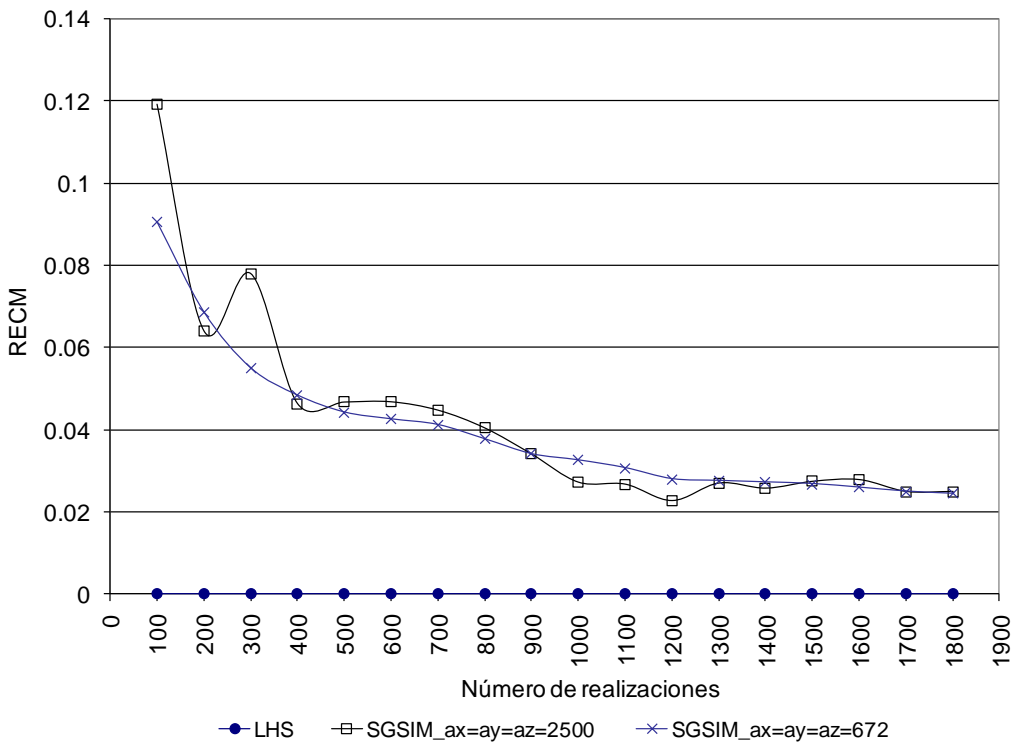


Figura 3.3. Comparación de los errores de la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 3D (ejemplo 1).

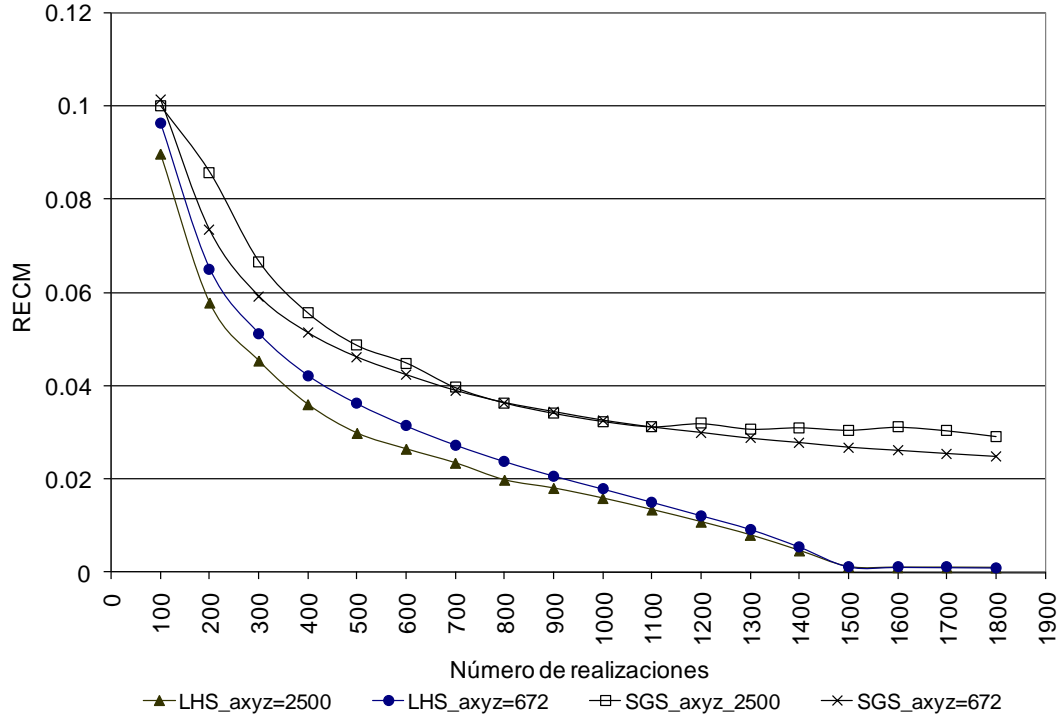


Figura 3.4. Comparación de los errores de la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 3D (ejemplo 1).

3.5 Ejemplo 2

Se supone un campo aleatorio de $\ln(K)$, el cual es estacionario de segundo orden e isotrópico. Las realizaciones se generan sobre una malla de 29 x 21 elementos cuadrados, cada elemento tiene 25 m de longitud por cada lado, en la vertical se tienen dos capas uniformes de 150 m de espesor cada una. La matriz de correlación objetivo es dada por la función de autocovarianza del tipo esférica la cual supone:

$$C(h) = C_0 + C_1[1 - \gamma_1(h)] = C_0 + \begin{cases} C_1 - C_1[1.5h - 0.5h^3] & \text{si } h \leq 1 \\ 0 & \text{si } h > 1 \end{cases} \quad (3.3)$$

donde $C(h)$, C_0 , h , a_x , a_y y a_z se han definido en el ejemplo 1. Para este ejemplo se consideró $C_0 = 0.3$, $\sigma^2 = C_0 + C_1 = 1.3$ y dos alcances, 672 m y 2500 m, además de hacerse al análisis para dos y tres dimensiones.

3.5.1 Comparación de resultados para el ejemplo 2

La Figura 3.5 muestra la comparación del error de la media de $\ln(K)$, para las realizaciones generadas con LHS contra las obtenidas con el SGS en 2D. La Figura 3.6 muestra la comparación de los errores de la covarianza generados con LHS contra SGS en 2D. La curva obtenida con LHS es suave y converge conforme el número de realizaciones aumenta y cuando el número de realizaciones es igual o mayor a 600 el error no disminuya de forma significativa (la RECM es del orden de 0.001). El SGS presenta errores más altos que el LHS, incluso cuando se tiene 1500 realizaciones, el error con SGS es de 0.043 si el alcance es de 672 m y de 0.044 si el alcance es de 2500 m.

Las Figuras 3.7 y 3.8 muestran la comparación del error de la media de $\ln(K)$ para los alcances igual a 672 m y 2500 m, respectivamente, generadas con LHS contra SGS en 3D. Como se mencionó antes, se utilizaron cinco semillas aleatorias diferentes. Con 1500 realizaciones los momentos obtenidos con SGS son claramente afectados por la semilla. Las Figuras 3.9 y 3.10 muestran la comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$ para los alcances de 672 m y 2500 m, respectivamente, generadas con LHS contra SGS en 3D. Comparados con el método de SGS, las estadísticas de las realizaciones del LHS no son afectados de forma significativa por la semilla. Se puede considerar que después de 1300 realizaciones el método de LHS no tiene efecto por la semilla. Las curvas del LHS son más suaves y convergen conforme el número de realizaciones aumenta y cuando el número de realizaciones es igual o mayor a 1300 el error no disminuye de forma significativa (el error del LHS es del orden de 0.001). El SGS presenta errores más altos en un rango que va de 0.037 a 0.064.

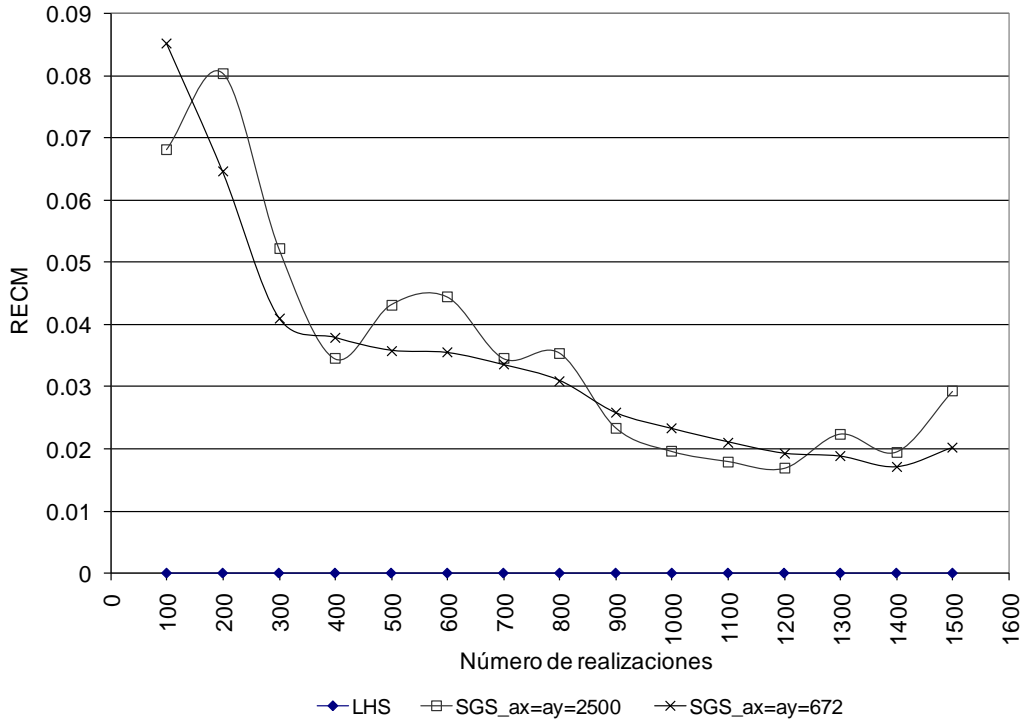


Figura 3.5. Comparación de los errores en la media de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 2).

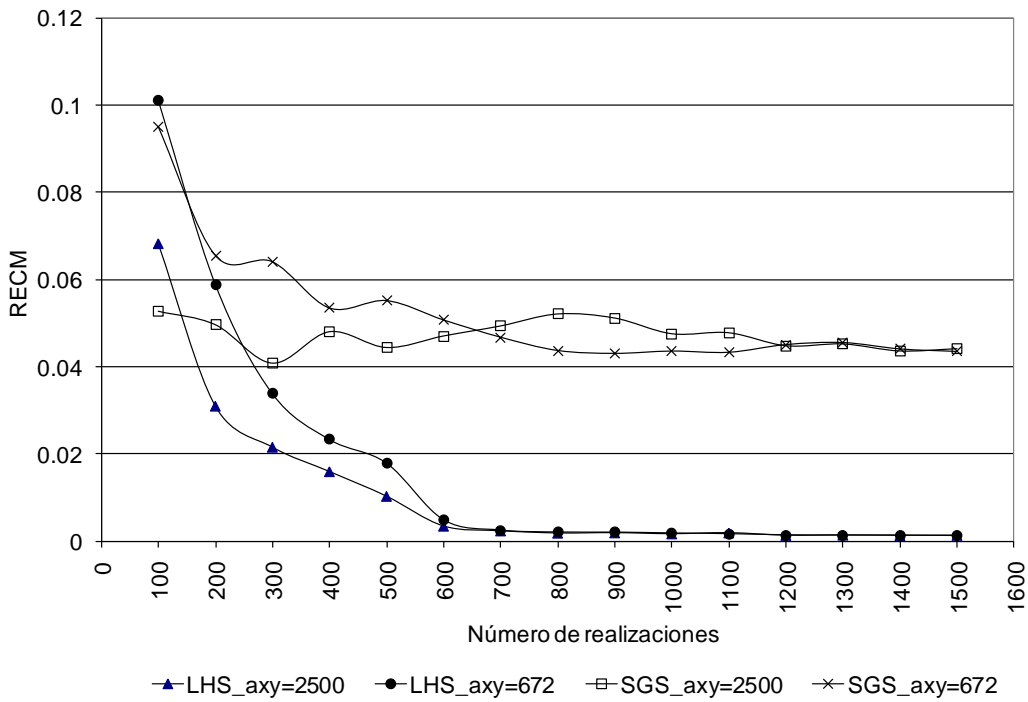


Figura 3.6. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, generados por LHS contra SGS en 2D (ejemplo 2).

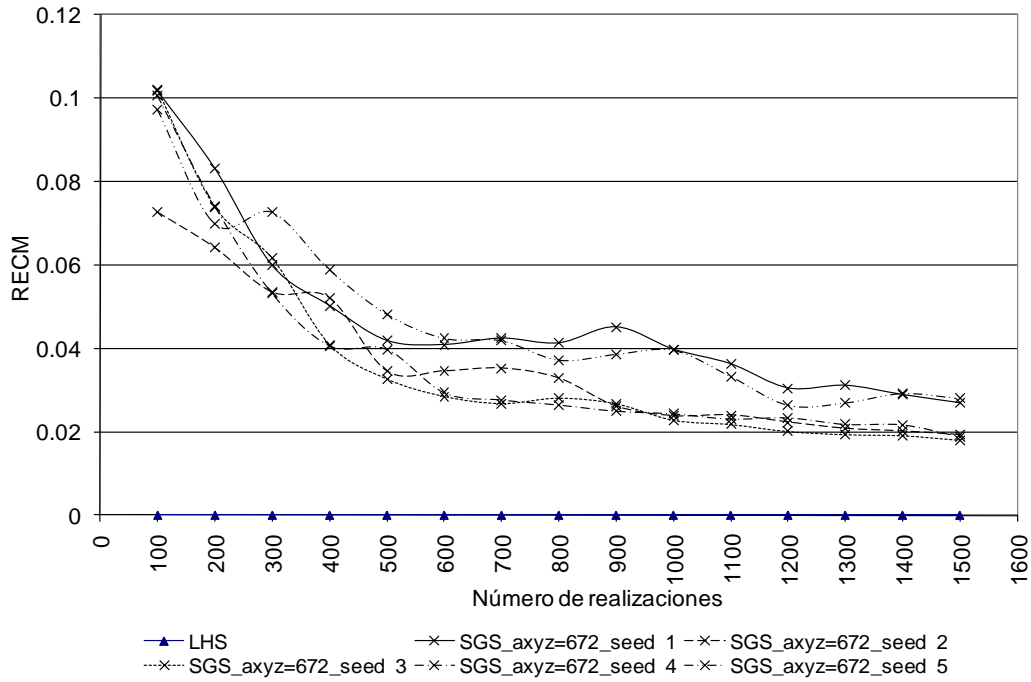


Figura 3.7. Comparación del error de la media de $\ln(K)$, alcance igual a 672 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).

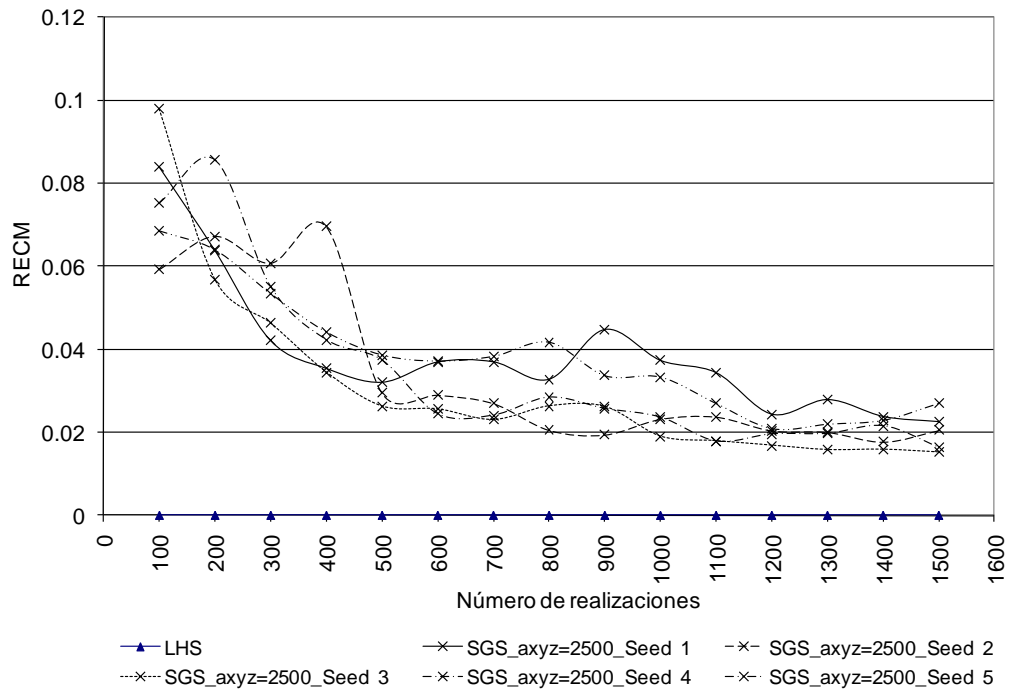


Figura 3.8. Comparación de los errores en la media de $\ln(K)$, alcance igual a 2500 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).

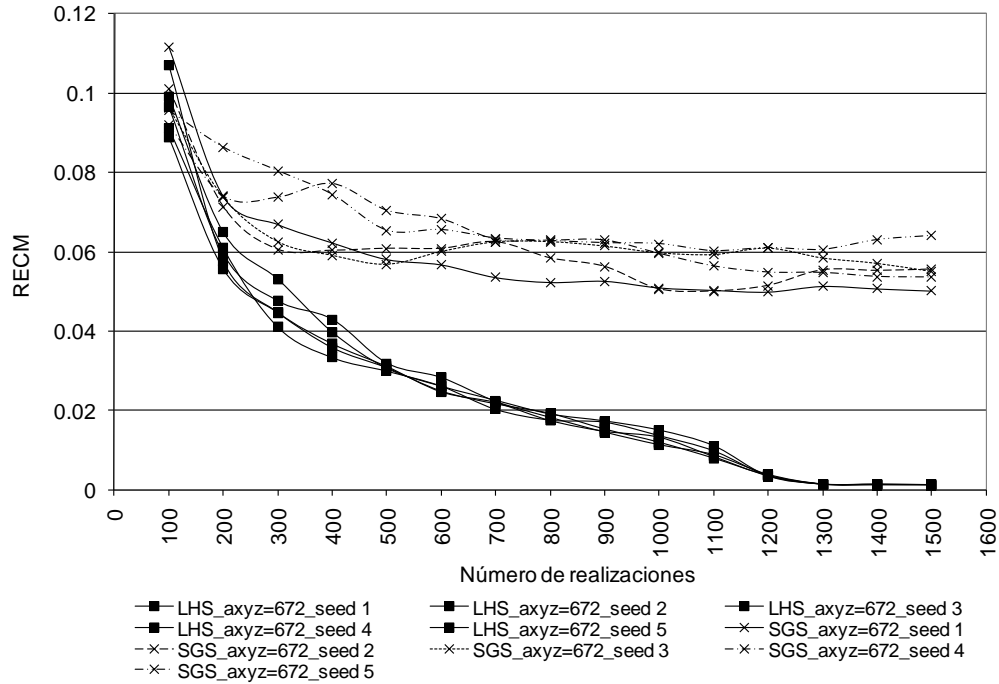


Figura 3.9. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, alcance igual a 672 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).

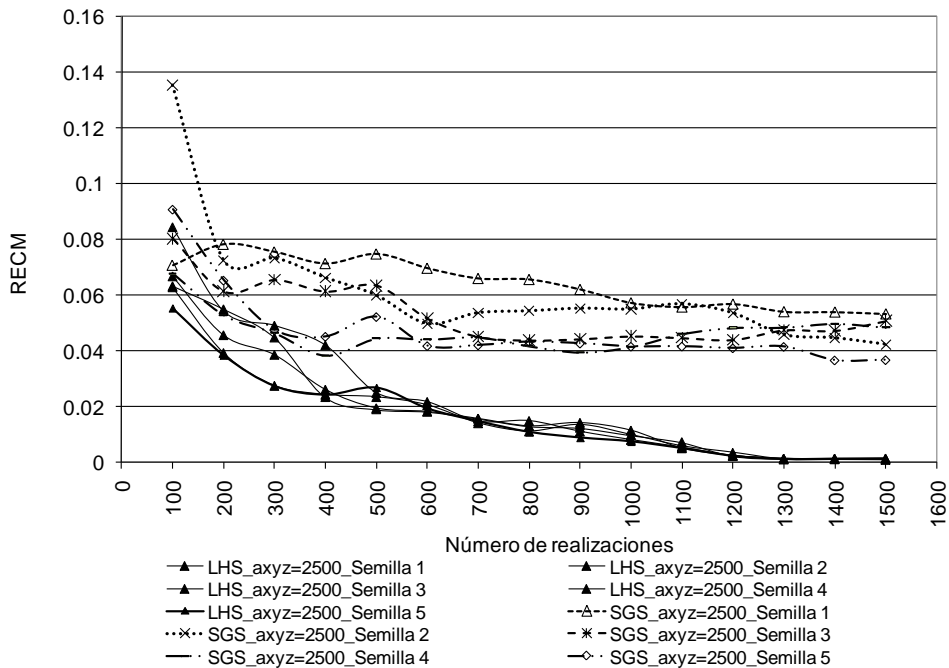


Figura 3.10. Comparación de los errores en la covarianza de $\ln(K)$, alcance igual a 2500 m, generados por LHS contra SGS en 3D usando diferentes semillas (ejemplo 2).

Capítulo 4. Extensión del método de Herrera al monitoreo en 3D

En este capítulo se presenta la extensión del método de Herrera (1998) para considerar mediciones en la vertical en el diseño óptimo de una red de monitoreo de la calidad del agua subterránea y se demuestra el método en un ejemplo hipotético.

4.1 Metodología

La metodología propuesta por Herrera (1998) se puede extender para incluir la selección en 3D de las posiciones de monitoreo (Herrera y Simuta-Champo, 2012), como se explica a continuación.

4.1.1 Simulación estocástica

Se resuelven las ecuaciones generales de flujo y de transporte conservativo con convección y dispersión acopladas por medio de la ley de Darcy, para describir la evolución de una pluma de un contaminante. Con este fin se utilizó el simulador Princeton Transport Code (PTC) de flujo y transporte del agua subterránea (Babu *et al.*, 1997). PTC usa las ecuaciones diferenciales parciales que describen el flujo del agua subterránea para la carga hidráulica, h ,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - S \frac{\partial h}{\partial t} + Q = 0 \quad (4.1)$$

las componentes de la velocidad del agua subterránea

$$V_x = -K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad V_y = -K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y}, \quad V_z = -K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \quad (4.2)$$

donde:

h es la carga hidráulica [L],

- K_{xx} es la conductividad hidráulica en la dirección horizontal x [LT^{-1}],
 K_{yy} es la conductividad hidráulica en la dirección horizontal y [LT^{-1}],
 K_{zz} es la conductividad hidráulica en la dirección horizontal z [LT^{-1}],
 S es el coeficiente de almacenamiento específico [L^{-1}],
 Q es el término fuente/sumidero en la posición (x, y, z) en el tiempo t [L^3T^{-1}]
 (por ejemplo, bombeo; valores positivos implican inyección),

y el transporte de contaminante descrito por la concentración, c ,

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial c}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial c}{\partial z} \right] \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{zx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{zy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right] - \left[V_x \frac{\partial c}{\partial x} + V_y \frac{\partial c}{\partial y} + V_z \frac{\partial c}{\partial z} \right] \\
 & + Q(c^w - c) - \theta [1 + E(c)] \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = 0
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Los términos de dispersión en (4.3) se definen como:

$$\begin{aligned}
 D_{xx} &= (\alpha_L V_x^2 + \alpha_T V_y^2 + \alpha_V V_z^2) / V + D_M \\
 D_{yy} &= (\alpha_T V_x^2 + \alpha_L V_y^2 + \alpha_V V_z^2) / V + D_M \\
 D_{zz} &= (\alpha_V V_x^2 + \alpha_V V_y^2 + \alpha_L V_z^2) / V + D_M \\
 D_{yx} &= D_{xy} = (\alpha_L - \alpha_T) V_x V_y / V \\
 D_{yz} &= D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_V) V_y V_z / V \\
 D_{zx} &= D_{xz} = (\alpha_L - \alpha_V) V_z V_x / V
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

y los términos restantes son:

- D_M es el coeficiente de difusión molecular, generalmente pequeño [L^2T^{-1}],
 α_L es la dispersividad longitudinal [L],

- α_T es la dispersividad transversal horizontal [L],
- α_V es la dispersividad transversal vertical [L],
- V es la magnitud del vector velocidad [LT^{-1}] ($V \equiv \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}$),
- c es la concentración química en la posición (x, y, z) en el tiempo t [ML^{-3}]
- θ es la porosidad del acuífero [adimensional],
- $E(c)$ es la función que representa las propiedades de adsorción química,
- Q es el esfuerzo de bombeo (fuente/sumidero) [T^{-1}]
- $$Q = Q_i \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i)$$
- Q_i es la tasa de descarga volumétrica inyección/descarga [L^3T^{-1}] en la posición (x_i, y_i, z_i) ,
- c^w es la concentración del fluido bombeado en la posición (x_i, y_i, z_i) ,
- $\delta(\)$ es la función delta de Dirac.

Para todos los casos de extracción ($Q_i \leq 0$), suponemos que la concentración del fluido extraído en el bombeo, c^w , es igual a la concentración c en la vecindad del agua ambiente. Así, en todos los pozos de descarga, el término $Q(c^w - c) \equiv 0$ en (4.3). El código, por lo tanto, conserva el término de Q en (5.3) sólo cuando el bombeo inyecta el soluto ($Q_i > 0$), con concentración c^w representando la concentración del fluido inyectado.

En las aplicaciones presentadas, como ya se mencionó, el transporte se supone conservativo, por lo que $E(c)$ es nulo.

Algoritmo de solución de PTC

La solución del sistema de ecuaciones (4.1) - (4.4) para sistemas físicos complejos generalmente requiere de la aplicación de métodos numéricos. Para los sistemas a escala de campo, el esfuerzo computacional para resolver una discretización numérica de esas ecuaciones tridimensionales es grande. PTC emplea un algoritmo de división especial para resolver las ecuaciones tridimensionales, el cual reduce la carga computacional de manera significativa.

El algoritmo discretiza el dominio en capas horizontales aproximadamente paralelas. En cada capa se usa una discretización en elemento finito que permite la representación precisa de dominios irregulares. Las capas se conectan en la vertical por medio de una discretización en diferencias finitas. Este acoplamiento híbrido de los métodos elemento finito y diferencias finitas da la oportunidad de aplicar el procedimiento de división. Durante un tiempo dado de iteración, todos los cálculos se dividen en dos pasos. En el primer paso se resuelven las discretizaciones en elemento finito de todas las capas horizontales de forma independiente unas de otras. En el segundo paso, se resuelven todas las ecuaciones verticales que unen las capas (se puede consultar este algoritmo con más detalle en Babu *et al.*, 1997).

Es bien conocido que la conductividad hidráulica es una fuente importante de incertidumbre en los modelos de flujo y transporte. Por esta razón, en los ejemplos presentados en este trabajo, la conductividad hidráulica se representa con un campo aleatorio correlacionado espacialmente. Además, la fuente de contaminante se representa también como un campo aleatorio en la simulación estocástica.

4.1.2 Filtro de Kalman

El filtro de Kalman (FK) es un procedimiento matemático secuencial para la asimilación de los datos que opera por medio de mecanismos de predicción y corrección (Jazwinski, 1970). Este algoritmo predice un nuevo estado a partir de un estimado previo por medio de un término de corrección que incorpora la información proporcionada por las nuevas mediciones, de tal forma que el error de la predicción se minimiza estadísticamente. La solución es óptima debido a que el filtro combina todos los datos observados en un paso de tiempo dado y el conocimiento a priori del sistema, para producir un estimado del estado con varianza del error mínima. El filtro es secuencial debido a que éste calcula la

solución para cada tiempo en el que se tiene disponible una nueva medición sin necesidad de usar los datos previos.

4.1.2.1 El filtro de Kalman discreto

El filtro de Kalman discreto ayuda a resolver el problema general de estimar el estado $X \in R^n$ de un proceso en tiempo discreto, el cual se representa por una ecuación estocástica lineal como sigue

$$X_{k+1} = \mathbf{A}X_k + w_k \quad (4.5)$$

Con una medición $Z \in R^m$ que se relaciona linealmente con el estado

$$Z_k = \mathbf{H}X_k + v_k \quad (4.6)$$

La matriz A de dimensión $n \times n$ relaciona el estado en un tiempo k con el estado en un tiempo $k + 1$. La matriz H de dimensiones $m \times n$ relaciona el estado en el tiempo k con la medición Z_k , para el mismo tiempo. Las variables aleatorias w_k y v_k representan el error de proceso y medición respectivamente. Suponemos que las sucesiones $\{w_k\}$ y $\{v_k\}$ son ruido blanco normalmente distribuido ($p(w_k) \sim N(0, \mathbf{Q}_k)$, $p(v_k) \sim N(0, \mathbf{R}_k)$), y son independientes unos de otros. Donde \mathbf{Q}_k es la matriz de covarianza del error del proceso y \mathbf{R}_k es la matriz de covarianza del error de medición.

Las ecuaciones que se usan en el filtro de Kalman se pueden dividir en dos grupos: las ecuaciones de predicción o pronóstico, y las ecuaciones de corrección que actualizan esta predicción con las mediciones. El primer grupo se encarga de la proyección del estado y la matriz de covarianza de su error a un tiempo $k + 1$, a partir del estado en el tiempo k . El segundo conjunto de ecuaciones se utilizan para incorporar nuevas mediciones a las estimaciones previas para así lograr una estimación mejorada del estado.

Las ecuaciones de pronóstico del filtro de Kalman son:

$$\hat{X}_{k+1}^k = \mathbf{A}\hat{X}_k^k \quad (4.9)$$

$$\mathbf{P}_{k+1}^k = \mathbf{A}\mathbf{P}_k^k\mathbf{A}^T + \mathbf{Q}_k \quad (4.10)$$

y las ecuaciones de corrección son:

$$K_{k+1} = \mathbf{P}_{k+1}^k\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{P}_{k+1}^k\mathbf{H}^T + \mathbf{R}_k)^{-1} \quad (4.11)$$

$$\hat{X}_{k+1}^{k+1} = \hat{X}_{k+1}^k + K_{k+1}(Z_{k+1} - \mathbf{H}\hat{X}_{k+1}^k) \quad (4.12)$$

$$\mathbf{P}_{k+1}^{k+1} = (\mathbf{I} - K_{k+1}\mathbf{H})\mathbf{P}_{k+1}^k \quad (4.13)$$

Para implementar el filtro de Kalman se requiere un estimado a priori del estado, \hat{X}^0 , y una matriz de covarianza a priori del error estimado \mathbf{P}^0 .

La primera tarea para actualizar la proyección del estado es calcular la ganancia de Kalman K_{k+1} (4.11). Este factor de peso, o ganancia, se selecciona de tal forma que se minimiza la varianza del error del nuevo estimado del estado. El siguiente paso es incorporar el proceso de mediciones Z_{k+1} para generar un nuevo estimado del estado usando la ecuación (4.12). El paso final es obtener un nuevo estimado de la covarianza del error usando la ecuación (4.13).

Después de aplicar la predicción y las ecuaciones de corrección, el proceso se repite tomando como punto inicial la nueva estimación del estado y la matriz de covarianza de su error.

4.1.2.2 El filtro de Kalman ensamblado

Tradicionalmente para modelos no lineales se ha aplicado el filtro de Kalman extendido (Janzwinski, 1970). Sin embargo, éste depende de ecuaciones linealizadas aproximadas y Evensen (2009) demostró que para ecuaciones

altamente no lineales este filtro puede divergir. Otro método para la asimilación de datos secuencial es llamado filtro de Kalman ensamblado (EnKF). Evensen (1994) lo propuso como una alternativa estocástica o Monte Carlo del filtro de Kalman extendido.

El filtro de Kalman ensamblado se diseñó para resolver dos problemas relacionados al uso del filtro de Kalman extendido que son: *i*) la necesidad de linealizar las ecuaciones y entonces cortar las series sin conocer la contribución real de los términos que se desprecian y *ii*) el enorme esfuerzo computacional asociado con el almacenamiento e integración subsecuente de la matriz de covarianza del error.

El filtro de Kalman ensamblado usa el modelo para generar realizaciones del estado, corrige cada realización con las mediciones Z_{k+1} y las ecuaciones del filtro de Kalman (4.11), (4.12) y (4.13), y reemplaza las ecuaciones de pronóstico con un cálculo del ensamble, esto es, las ecuaciones (4.9) y (4.10) no se usan y se substituyen con el ensamble promedio \bar{X}_{k+1}^k y la matriz de covarianza del ensamble \bar{P}_{k+1}^k . Además, en el filtro de Kalman ensamblado se usan las mediciones perturbadas para obtener la covarianza correcta (Evensen, 2009).

4.1.2.3 El ensamble suavizado

Van Leeuwen y Evensen (1996) propusieron el ensamble suavizado (ES) y lo probaron con un modelo cuasi geostrópico no lineal para interacciones reales Eddy-oceanográficas; las condiciones iniciales y los errores de medición se consideraron inciertas en el modelo. El ES es similar al kriging ordinario o interpolación en espacio y tiempo de Gauss-Markov, usando una representación de ensamble para la matriz de covarianza del error espacio-tiempo (Evensen, 2009). Herrera (1998) también desarrolló este método de forma independiente y lo llamó filtro de Kalman estático. La aplicación de su interés fue la optimización espacio-temporal de redes de monitoreo del agua subterránea para lo cual usó un

modelo de transporte lineal. En contraste con van Leeuwen y Evensen (1996), la fuente de incertidumbre considerada fueron las condiciones de frontera y dos parámetros: la velocidad y la dispersión. En esta tesis llamaremos a la versión de Herrera ensamble suavizado de Herrera (ESH).

El ESH tiene tres características principales: 1) debido a la aplicación que le da origen y a las fuertes correlaciones del error del modelo en el tiempo, el vector estado X incluye a la variable en todas las posiciones y tiempos en los que las estimaciones se calculan y las posiciones de los posibles pozos de monitoreo y los posibles tiempos de monitoreo; 2) Usando las realizaciones del estado, se calcula el ensamble promedio espacio-tiempo \bar{X}^0 y la matriz de covarianza espacio-tiempo del ensamble \bar{P}^0 y después se corrige esta estimación y su matriz de covarianza del error usando las ecuaciones del filtro de Kalman (4.11), (4.12) y (4.13); 3) a diferencia del ES no se usan las mediciones perturbadas.

Además el tiempo no está presente explícitamente en el estado, y los datos se procesan de forma secuencial, las ecuaciones de correlación para el ESH se pueden reescribir de la siguiente forma:

$$K_{k+1} = P^k H^T (H P^k H^T + R)^{-1} \quad (4.14)$$

$$\hat{X}^{k+1} = \hat{X}^k + K_{k+1} (Z_{k+1} - H \hat{X}^k) \quad (4.15)$$

$$P^{k+1} = (I - K_{k+1} H) P^k \quad (4.16)$$

Donde los subíndices muestran el orden en el cual se procesan los vectores de datos $\{Z_1, Z_2, \dots, Z_k, \dots\}$, y el proceso inicia con \bar{X}^0 y \bar{P}^0 .

Una diferencia en la forma en que van Leeuwen y Evensen (1996) implementan el ES es que ellos actualizan independientemente cada miembro del ensamble individual.

4.1.3 Método de estimación propuesto

¿Cómo se puede usar el ESH para estimar la pluma de un contaminante en movimiento? Es posible calcular la matriz de covarianza espacio-temporal para la concentración por medio de simulación estocástica. Si se definiera la variable de estado como un vector de concentraciones para todas las posiciones y todos los tiempos, la matriz de covarianza espacio-tiempo de las concentraciones de la simulación estocástica debería ser un estimado del vector estado. Entonces, para condicionar al estimado de la concentración del contaminante obtenido de la simulación estocástica usando datos de concentración, se puede usar en el ESH la media de las concentraciones espacio-tiempo de la simulación como un estimado inicial, y su matriz de covarianza como la matriz de covarianza del error inicial.

En las ecuaciones del filtro de Kalman (4.11), (4.12) y (4.13) se sustituye a la x por C , el vector de concentración del contaminante que contiene las concentraciones para todas las posiciones y todos los tiempos:

$$C = (c_{1,1}, c_{2,1}, \dots, c_{M,1}, c_{1,2}, c_{2,2}, \dots, c_{M,2}, \dots, c_{M,T}) \quad (4.17)$$

donde c_{it} es la concentración en la posición x_i en el tiempo t , M es el número total de puntos en el espacio (x, y, z) y T es el número total de tiempos. La matriz de covarianza correspondiente es:

$$P = \begin{pmatrix} P_{1,1;1,1} & P_{1,1;2,1} & \cdots & P_{1,1;M,1} & P_{1,1;1,2} & \cdots & P_{1,1;M,T} \\ P_{2,1;1,1} & P_{2,1;2,1} & \cdots & P_{2,1;M,1} & P_{2,1;1,2} & \cdots & P_{2,1;M,T} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ P_{M,T;1,1} & P_{M,T;2,1} & \cdots & P_{M,T;M,1} & P_{M,T;1,2} & \cdots & P_{M,T;M,T} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

4.2 Estimación de los momentos iniciales por simulación estocástica

Para obtener la media de las concentraciones y su matriz de covarianza se usó simulación estocástica. Si c_{il}^k denota la k -ésima realización de la concentración en la posición x_i en el tiempo t_l , entonces las concentraciones de la pluma media obtenida con N realizaciones,

$$\bar{c}_{il} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_{il}^k \quad (4.19)$$

Los elementos $(i, l; p, s)$ de la matriz de covarianza correspondientes son:

$$Cov(c_{il}, c_{ps}) = Cov_{il;ps} = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (c_{il}^k - \bar{c}_{il})(c_{ps}^k - \bar{c}_{ps}) \quad (4.20)$$

Se define a C^0 como el vector que contiene las \bar{c}_{ik} para todas las posiciones (x_i), y todos los tiempos t_k , y P^0 como la matriz de covarianza, $Cov_{il;ps}$ asociada con este vector.

Hasta ahora este método se ha probado con buenos resultados en la estimación de la concentración de un soluto (Herrera, 1998; Herrera *et al.*, 2001; Zhang *et al.*, 2005; Herrera y Pinder, 2005 y Dokou y Pinder 2009). Posteriormente en Herrera y Briseño (2010) y Briseño (2012) el método se extendió a la estimación combinada de las cargas hidráulicas, concentraciones y el logaritmo de la conductividad hidráulica. Además, Nowak *et al.* (2010) lo usaron para la estimación de algunos parámetros del semivariograma del logaritmo de la conductividad hidráulica.

4.3 Optimización de la red de monitoreo del agua subterránea

El objetivo de diseño de la red de monitoreo es elegir de entre un conjunto predefinido de pozos y tiempos de monitoreo (puntos de monitoreo espacio-temporales), aquellos que proporcionen suficiente información para obtener una buena estimación de la concentración de una variable de interés sobre un conjunto de posiciones en diferentes tiempos, con el mínimo número de pozos. Las posiciones y los tiempos para los que se quiere obtener estimados se llaman puntos espacio-temporales de estimación.

Para calcular la varianza del error de la variable estimada se usó el ESH con la variable de estado considerada para todos los puntos espacio-temporales de estimación y en todos los puntos espacio-temporales de monitoreo en el periodo de interés. Sea E el conjunto de puntos espacio-temporales de estimación y S el conjunto de puntos espacio-temporales de monitoreo, ambos para todo el periodo de interés; entonces la dimensión del estado, N , sería la dimensión de $E \cup S$.

Para la selección óptima de las posiciones de los pozos y tiempos de monitoreo, se usó un método de optimización que minimiza una función de la varianza del error del estimado. Esta función es la suma de la varianza del error sobre todas las posiciones y tiempos en donde se requiere obtener un estimado con varianza pequeña, y a la que llamamos la varianza total de la estimación y la denotamos σ_T^2 . Cuando esta varianza se calcula con un plan de monitoreo que incluye n muestras, por ejemplo $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, con $x_i = (u_i, v_i, w_i, t_i)$ en donde (u_i, v_i, w_i) es la posición espacial y t_i el tiempo, para $i = 1, \dots, n$, entonces esto se puede escribir como:

$$\sigma_T^2(S) = \sum_{(i,p) \in I_E} \sigma_{i,p}^2(S) \quad (5.21)$$

donde

$$\sigma_{i,p}^2(x) = Cov_{ip;ip}(S)$$

I_E es el conjunto de pares de índices los puntos espacio-temporales de estimación y $\sigma_{i,p}^2(S)$ es la varianza del error del estimado en la i -ésima posición de estimación y p -ésimo tiempo cuando se ha usado el plan de monitoreo $S = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$.

4.3.1 Método de optimización secuencial

Para seleccionar las posiciones y tiempos de monitoreo, se utiliza un algoritmo de optimización secuencial, el cual parte de un conjunto dado M de posiciones de monitoreo espacio-temporales potenciales para obtener un subconjunto óptimo $S \subseteq M$ como se describe a continuación:

1.- Sea $x_1 \in M$ tal que

$$\sigma_T^2(x_1) \leq \sum_{i \in I_E; p \in I_E} \sigma_{i,p}^2(x) \quad \forall x \in M$$

$$S = \{x_1\}, \quad M = M \setminus S$$

2.- Sea $x_2 \in M$ tal que

$$\sigma_T^2(S \cup x_2) \leq \sum_{i \in I_E; p \in I_E} \sigma_{i,p}^2(x) \quad \forall x \in M$$

$$S = S \cup \{x_2\}, \quad M = M \setminus S$$

3.- El proceso se repite hasta que una condición de paro se cumple. Las condiciones de paro pueden ser, por ejemplo:

$$\left(1 - \frac{\sigma_T^2(S) - \sigma_T^2(M)}{\sigma_T^2(0) - \sigma_T^2(M)} \right) * 100 \geq P$$

o

$$M \geq M_D$$

o

$$\sigma_T^2 \geq \sigma_{T0}^2$$

donde:

P es el porcentaje de reducción de la varianza total.

M_D es el tamaño de red deseada asignada por el usuario

σ_{T0}^2 es la varianza total del error deseada asignada por el usuario.

4.4 Programa GWQMonitor

Se cuenta con un paquete llamado GWQMonitor (Groundwater Quality Monitor) que fue desarrollado en lenguaje FORTRAN para aplicar la metodología antes descrita considerando únicamente las posiciones (x,y) en dos dimensiones (Herrera, 1998). A este paquete se le hicieron las modificaciones necesarias para incluir la posición z como una tercera dimensión espacial en el diseño de la red de monitoreo.

4.5 Problema ejemplo 1

El primer problema ejemplo presentado en este trabajo es esencialmente el ejemplo presentado por Herrera y Pinder (2005) pero usando un modelo en 3D y eligiendo un red de monitoreo en 3D. Una representación para éste se muestra en la Figura 4.1. Una fuente de contaminante, localizada sobre el lado izquierdo de una región de 500 m x 700 m, ha estado activa durante 26 años. Para el propósito del modelo, la región se representa por dos capas de 150 m cada una, y la fuente de contaminante se encuentra únicamente en la capa superior. Durante los últimos tres años han operado tres pozos de agua potable en ambas capas con un caudal de 216 m³/día. Para el saneamiento del acuífero se colocó un sistema de bombeo y tratamiento en ambas capas, que consiste en tres pozos de inyección de 650 m³/día cada uno y tres pozos de extracción de 650 m³/día cada uno, localizados como se muestra en la Figura 4.1. Se supone que se tiene disponible un modelo de flujo y transporte en estado transitorio calibrado para el sitio que incluye

además un periodo de predicción de dos años para el sistema de bombeo y tratamiento.

El problema se resolvió con el simulador Princeton Transport Code (Babu *et al.*, 1997) usando una malla con elementos triangulares. Las condiciones de frontera para el flujo y transporte se muestran en la Figura 4.1, como se puede ver, la concentración en la fuente de contaminante se estandarizó a 1 y las cargas hidráulicas están en metros. Además, se usaron condiciones de frontera del tipo II igual a cero en los nodos de la frontera que no son parte de la fuente de contaminante. Para simular el periodo de predicción de dos años, se usaron 48 pasos de tiempo ($\Delta t = 15 \text{ días}$) y se mantuvo la fuente de contaminante activa durante este periodo. Los parámetros asignados a este modelo son los siguientes: $K_x = K_y = 0.25 \text{ m/día}$, $K_z = 0.05 \text{ m/día}$ para ambas capas; el coeficiente de almacenamiento, $S = 0.0001$; los coeficientes de dispersión, $\alpha_x = 30 \text{ m}$, $\alpha_y = \alpha_z = 3 \text{ m}$; y la porosidad $\theta = 0.20$.

El objetivo de este programa de monitoreo del contaminantes es estimar las concentraciones en los tres pozos de agua potable cada seis meses durante un periodo de dos años.

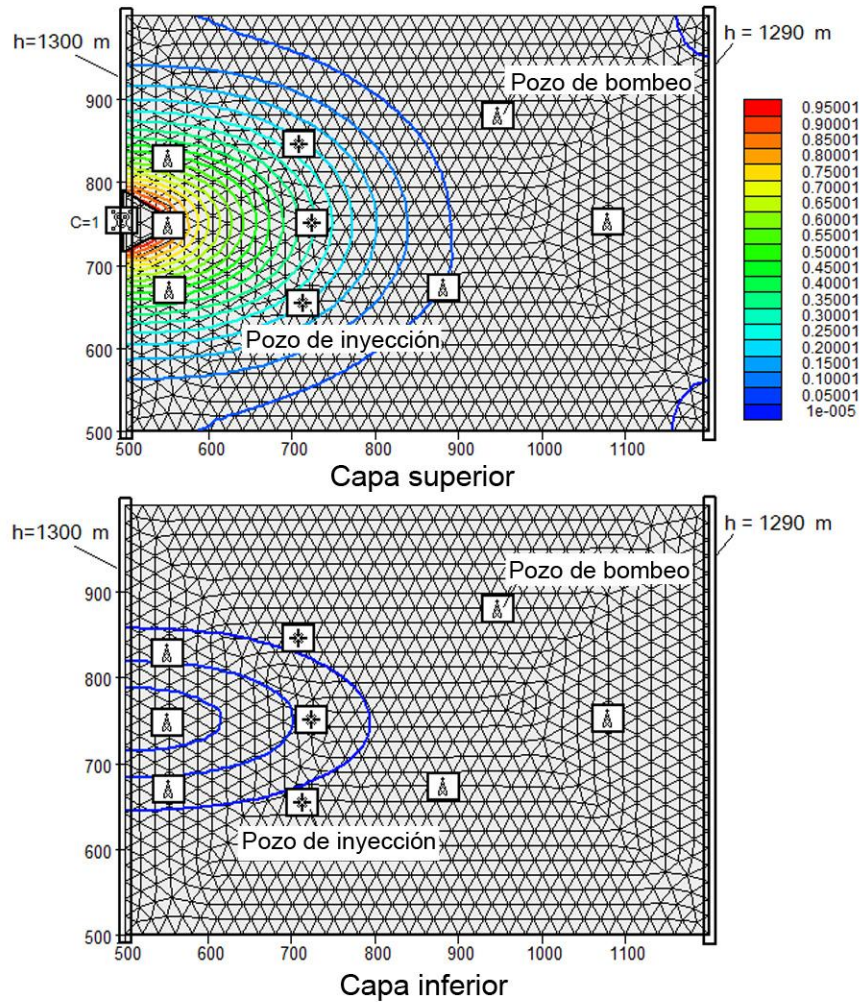


Figura 4.1. Modelo de flujo y transporte determinista con la pluma de contaminante a los 26 años.

4.5.1 Modelo estocástico

El modelo estocástico se basó en el modelo de flujo y transporte determinista. El parámetro de conductividad hidráulica es aleatorio, la media se supone conocida e igual a 0.25 m/día. La estructura espacial del $\ln(K)$ se describe por medio de un semivariograma esférico:

$$\gamma(h) = a_0 + a_1\gamma(h_x, h_y, h_z) = c_0 + c_1\gamma_1(h_1) = c_0 + c_1 \begin{cases} 1.5h_1 - 0.5h_1^3 & \text{si } h_1 \leq 1 \\ 1 & \text{si } h_1 > 1 \end{cases}$$

$$h_1 = \sqrt{\left(\frac{h_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{h_y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{h_z}{a_z}\right)^2} \quad (4.22)$$

donde h_x , h_y y h_z son las componentes de h en las direcciones x, y y z , respectivamente. $c_0 = 0.3$ es el efecto pepita, $c_1 = 0.7$ es la cima menos la pepita, los alcances son $a_x = a_y = 100$ m y $a_z = 200$ m en las direcciones x, y y z , respectivamente.

Las concentraciones en las diferentes posiciones de la fuente son modeladas como variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas. La concentración en la fuente, igual a 1 en el modelo determinista, se perturba en cada nodo agregando el término $e(t)$ el cual es una perturbación aleatoria de media cero, con distribución lognormal y con varianza igual a 0.0625. Se usa una perturbación aleatoria diferente en cada paso de tiempo de la simulación para cada nodo en la fuente.

Se usó un método llamado simulación secuencial Gaussiana (SGS) para obtener las realizaciones aleatorias de la conductividad hidráulica por medio del programa SGSIM del paquete GSLIB (Deutsch y Journel, 1998). Para este ejemplo se usaron 1000 realizaciones de la conductividad hidráulica y de la pluma de contaminante. Se resolvió el modelo de flujo y transporte para cada realización de la conductividad hidráulica y así obtener la media y la matriz de covarianza de las concentraciones en los puntos de monitoreo y de estimación.

4.5.2 Selección de los pozos de monitoreo y el calendario de monitoreo

El siguiente paso es seleccionar las posiciones de los pozos de monitoreo y su tiempo de monitoreo aplicando el ESH y el método de optimización. La Figura 4.2 muestra las posiciones de los posibles pozos de monitoreo (ellos se marcan con pequeños cuadros) y los puntos de estimación (que son los tres pozos de agua

potable). Únicamente uno de los posibles pozos de monitoreo es además punto de estimación. Por otro lado, en cada pozo una muestra se puede tomar cada 15 días y los tiempos de estimación son al final del mes de cada semestre (esto es, en el periodo de dos años se tienen cuatro tiempos de estimación). El error de las mediciones es 1×10^{-7} .

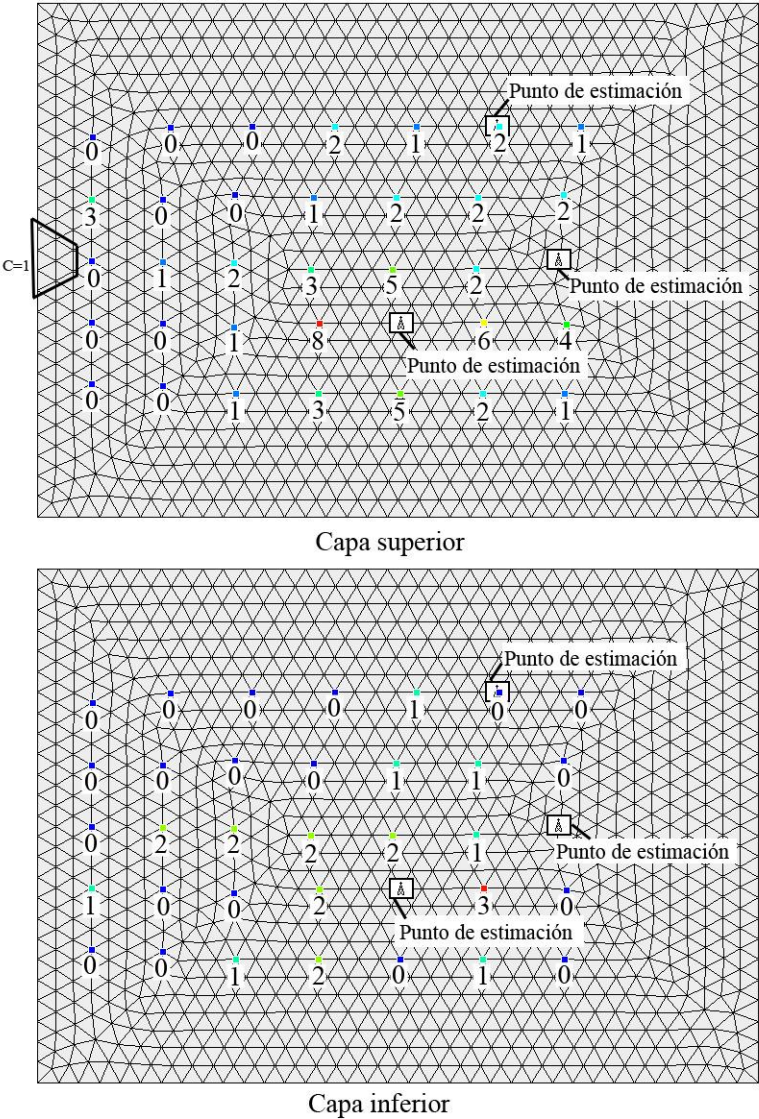


Figura 4.2. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y números de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptima en 3D para el ejemplo 1.

Para decidir el número de pozos y tiempos de monitoreo a ser incluidos en la red de monitoreo y su calendario de monitoreo usando esta metodología, usualmente

se hace un análisis de la varianza contra el número de posiciones de monitoreo y/o el coeficiente de variación (la desviación estándar del error de la estimación después de tomar un número dado de muestras dividido por la concentración a priori estimada en el punto). Por ejemplo, se podría incluir el número de muestras necesarias para obtener una reducción del porcentaje de certidumbre de la varianza inicial o del coeficiente de variación inicial, como se muestra en el segundo ejemplo. Aquí, para comparar los resultados con los del segundo ejemplo presentado por Herrera y Pinder (2005), se incluyen 82 posiciones espacio-tiempo. En la Figura 4.3a se muestra el número de muestras contra la varianza total y máxima (definida como la varianza máxima sobre los tres puntos de estimación), y en la Figura 4.3b se muestra el número de muestras contra el coeficiente de variación total y máxima (definido como el coeficiente de variación máximo sobre los tres puntos de estimación). En el ejemplo en 2D presentado por Herrera y Pinder (2005) después de que se toman 82 muestras, el coeficiente de variación máximo fue de 1.1, en el ejemplo en 3D presentado aquí el coeficiente de variación máximo después de que se toma el mismo número de muestras es de 1.16. Para el mismo número de muestras el coeficiente de variación total para el ejemplo en 2D fue de 4.8, para el ejemplo en 3D de este trabajo el coeficiente de variación total es de 6.8. Para la varianza máxima en el ejemplo en 2D con 82 muestras fue de 6.0×10^{-8} en cambio para el ejemplo en 3D es de 5.3×10^{-6} . La varianza total en el ejemplo en 2D fue de 9.2×10^{-4} , para el ejemplo en 3D se obtuvo una varianza total de 1.0×10^{-4} . Puede observarse con los resultados obtenidos que la varianza total para una red de monitoreo de 82 posiciones espacio-tiempo en 3D resulta ser más pequeña que la obtenida en el ejemplo en 2D.

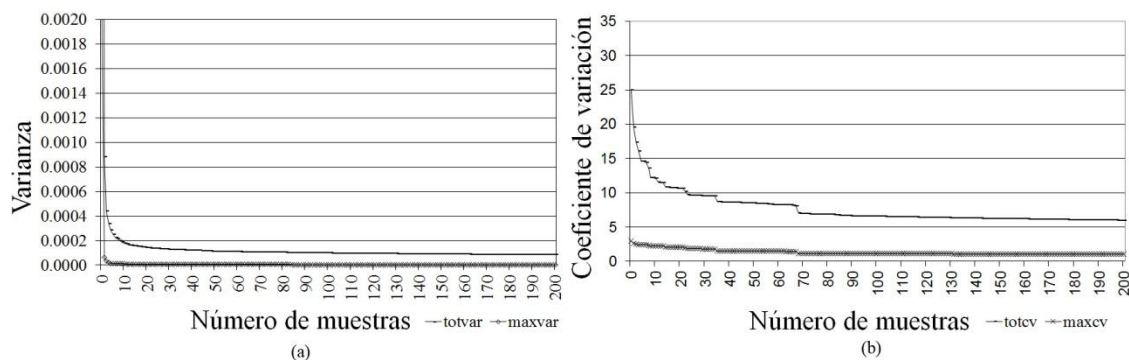


Figura 4.3. Número de muestras contra varianza (a) y coeficiente de variación (b).

La red de monitoreo resultante se muestra en la Figura 4.2. Las posiciones seleccionadas como parte de la red de monitoreo tienen un número mayor que cero próximo a ellos, éste indica el número de muestras que se colectarán en dicha posición durante un periodo de dos años. Se tienen 60 posiciones espacio-tiempo en la capa superior y 22 posiciones espacio-tiempo en la capa inferior y el orden de selección indica que las primeras siete posiciones espacio-tiempo se eligen de la capa superior. Es natural tener más muestras calendarizadas para la capa superior debido a que la varianza a priori durante el periodo de dos años en las posiciones de estimación son más grandes que las que se obtienen para la capa inferior y las muestras de las posiciones de la capa superior tienen concentraciones de contaminantes fuertemente correlacionadas con ellas. Por la misma razón, es natural que las primeras posiciones espacio-tiempo de la red se elijan en la capa superior.

Como se puede observar, las posiciones de los seis puntos de estimación tienen una influencia en la selección de la red de monitoreo. Los pozos que tienen más muestras calendarizadas tienen 8 y 6 en la capa superior, y 3 en la capa inferior. Todos ellos localizados en la parte central cerca de uno de los puntos de estimación, esto se debe a que dicho punto de estimación es el que presenta las varianzas del error de la estimación a priori más grandes en el periodo de dos años de predicción.

En la capa superior únicamente unos pocos pozos se eligen cerca de la fuente de contaminante, un total de cuatro localizados en las primeras dos columnas de los posibles pozos de monitoreo. Por otro lado, tres pozos se eligen en esas dos columnas en la capa inferior. No obstante, el primer pozo elegido en esas dos columnas de la capa inferior tienen un orden de selección de 51, esto indica que después de elegir 50 pozos, todos ellos localizado en el área central, cerca del punto de estimación, el pozo localizado en la capa inferior, cerca de la fuente, da suficiente información para ser elegido.

La distribución en el tiempo del calendario de monitoreo para cada capa se muestra en la Figura 4.4. El número de muestras para cada capa disminuye cada semestre. El primer semestre tiene 42, el segundo tiene 11, el tercero tiene 4, y el último tiene 3 para la capa superior. En la capa inferior, el primer semestre tiene 19, el segundo tiene 3 y para el tercer y cuarto semestre no se presenta muestreo. Esto significa que para este ejemplo, en el cual la media de la concentración del contaminante en la fuente no cambia con el tiempo, el primer semestre da más información que el resto. Se puede observar que el número de muestras incrementa en el final de cada semestre; éste es un comportamiento lógico debido a que el algoritmo minimiza la varianza del error de la estimación total para esos tiempos.

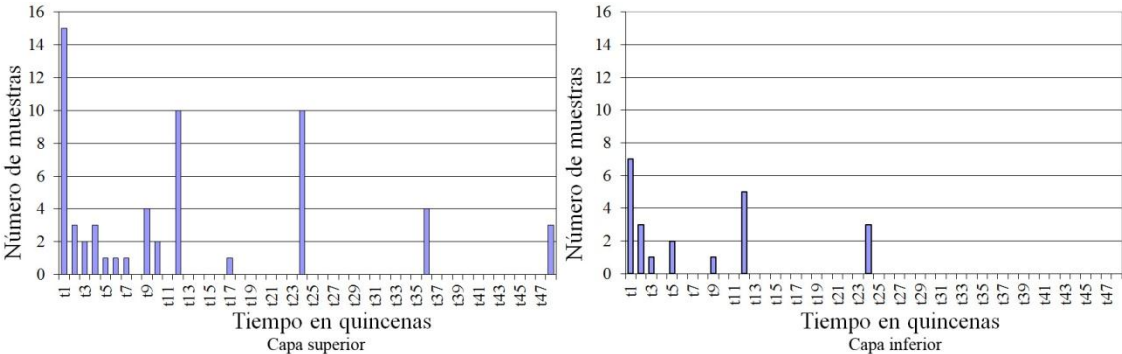


Figura 4.4. Distribución del tiempo de monitoreo.

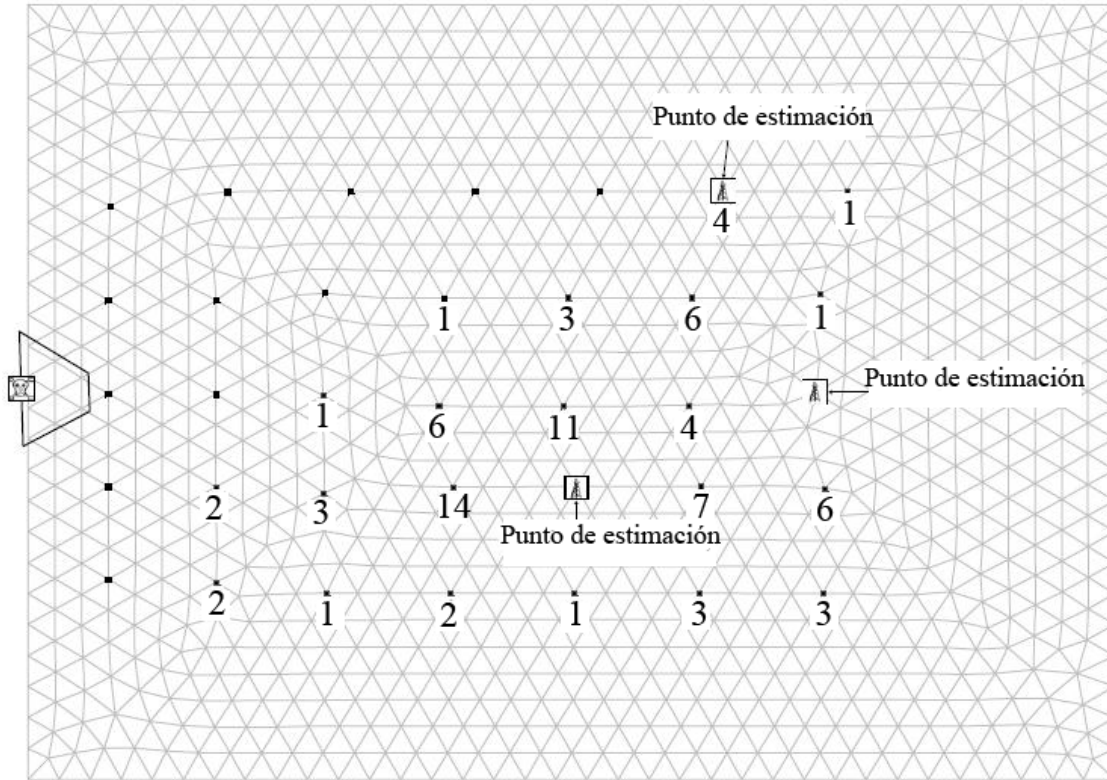


Figura 4.5. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y número de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptimo en 2D (Herrera y Pinder, 2005).

4.5.3 Comparación con el ejemplo en 2D de Herrera y Pinder

Es interesante comparar los resultados de la red de monitoreo resultante de este ejemplo con los resultados obtenidos por Herrera y Pinder (2005). Es importante notar que el método de optimización usado aquí no da un óptimo global, las redes de monitoreo resultante son sub-óptimas. El algoritmo secuencial que se usa si en un paso de la optimización se tienen dos pozos que reducen la varianza en la misma cantidad, uno es descartado de manera arbitraria. En este sentido, se pudieran obtener redes de monitoreo diferentes y calendarios de monitoreo que producen estimaciones con valores similares en la varianza total. Por esta razón se hace la comparación de las redes de monitoreo en 2D y 3D considerando las características generales de las redes. La comparación tiene dos objetivos: ilustrar los beneficios de diseñar en 3D y puntualizar las similitudes y diferencias de los

diseños, además si se obtienen diseños completamente diferentes puede ser una señal de inestabilidad en el método.

Para el diseño de la red de monitoreo en 2D, de las 82 muestras elegidas 48 (58%) se localizan en el área central, próximas al punto de estimación, mientras que para el diseño en 3D 47 (57 %), 34 en la capa superior y 13 en la capa inferior (ver Figura 4.2 y Figura 4.5). Se puede decir que en ambos diseños se usa un porcentaje alto de muestras para reducir la varianza de la estimación en el punto de estimación localizado en el área central con porcentajes de medición muy similares.

En el diseño en 3D únicamente 9 pozos no fueron elegidos para ser muestreados en el periodo de dos años, en contraste, en el diseño en 2D 12 pozos no fueron elegidos. Esto significa que más pozos proporcionan información para el problema de estimación en 3D que para el problema en 2D. Por ejemplo, en el diseño en 2D no se eligieron pozos en la primera columna de posibles pozos a ser elegido como parte de la red en cambio en el ejemplo en 3D se eligen cuatro pozos de esa columna, 3 en la capa superior y 1 en la capa inferior.

Con respecto al calendario, se presenta en la Figura 4.6 una comparación del número de muestras en cada semestre (la suma para cada 12 tiempos de monitoreo) para los diseños en 2D y 3D. Para el diseño en 3D se presenta la suma del número de muestras para cada semestre de la capa superior e inferior. Como se puede observar el número de muestras para cada semestre es muy similar y en ambos diseños se toma más muestras en el primer semestre. Esto muestra que incluso cuando la distribución espacial de las muestras para cada diseño es diferente, la calendarización en el tiempo muestra gran consistencia.

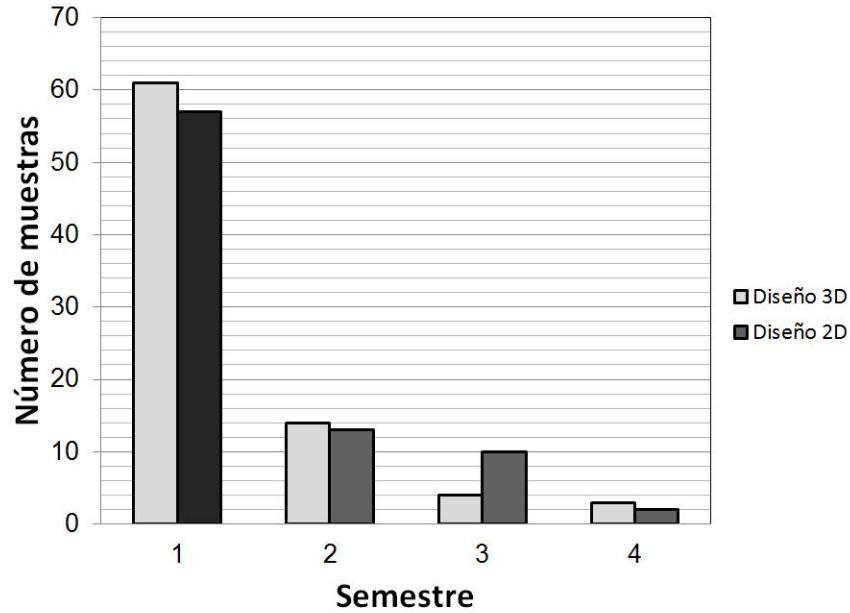


Figura 4.6. Comparación del número de muestras calendarizadas en cada semestre para los diseños en 2D y 3D.

4.6 Problema ejemplo 2

Como en los ejemplos previos, se tiene una fuente de contaminante sobre el lado izquierdo que ha estado activa durante 26 años. En la vertical la región tiene tres capas geológicas, dos capas de arena separados por un acuitardo de arcilla. La capa superior de arena tiene un espesor de 150 m, la capa inferior de arena tiene un espesor de 100 m, y el acuitardo un espesor de 50 m. La elevación del basamento para el sistema multicapa es de 1050 m. El acuitardo tiene una ventana de arena (ver capa 3 en la Figura 4.7). Se tiene disponible un modelo de flujo y transporte en estado transitorio del sitio. Cada capa de arena se dividió en dos capas numéricas. Las condiciones de frontera para el flujo y transporte se pueden observar en la Figura 4.7. Una condición de frontera del tipo II igual a cero se usó para la concentración sobre los nodos de la frontera que no son parte de la fuente de contaminante. Se usaron 48 pasos de tiempo para simular el periodo de predicción de dos años ($\Delta t = 15 \text{ días}$). Los parámetros en las capas numéricas que representan los acuíferos de arena y la ventana de arena son los siguientes:

$K_x = K_y = 0.25 \text{ m/día}$, $K_z = 0.05 \text{ m/día}$; $S_s = 0.0001$; los coeficientes de dispersión son $\alpha_x = 30 \text{ m}$, $\alpha_y = \alpha_z = 3 \text{ m}$; y porosidad $n = 0.20$. El acuitardo tiene los siguientes parámetros $K_x = K_y = 5 \times 10^{-5} \text{ m/día}$, $K_z = 1 \times 10^{-5} \text{ m/día}$; y el coeficiente de almacenamiento específico $S_s = 0.001$.

La Figura 4.7 muestra los resultados de la concentración del contaminante del modelo determinista. Como se puede observar, el contaminante viaja en la dirección del flujo; éste alcanza la ventana de arena y va hacia abajo las capas inferiores. En esas capas la dirección de la pluma cambia debido al gradiente impuesto por la presencia de la ventana de arena.

El objetivo del programa de monitoreo de contaminante es estimar la concentración de contaminante en los dos acuíferos y en el acuitardo para los dos años de predicción a un mínimo costo.

4.6.1 Modelo estocástico

Del mismo modo que en los ejemplos previos, las fuentes de incertidumbre considerados son la conductividad hidráulica y la fuente de contaminante. La conductividad hidráulica en las dos capas de arena es un campo aleatorio lognormal. La media de la conductividad hidráulica para cada capa es igual al valor en el modelo determinista y la desviación estándar es igual a 0.25. Una variable auxiliar distribuida normalmente se usó para las dos capas la cual es transformada para producir un campo de K con la media y varianza deseada, éste es un semivariograma esférico con *Efecto nugget* 0.3, *sill* 1, rangos $a_x = a_y = 200 \text{ m}$ y $a_z = 70 \text{ m}$. Las concentraciones en la fuente se modelan de la misma manera que en el ejemplo 1. Para este ejemplo se usaron 1000 realizaciones de la conductividad hidráulica y de la pluma de contaminante. La corrida tardó 14 horas con 7 minutos en una PC Intel® Core™ i5 CPU, 2.53 GHz, con 6.0 GB de memoria Ram.

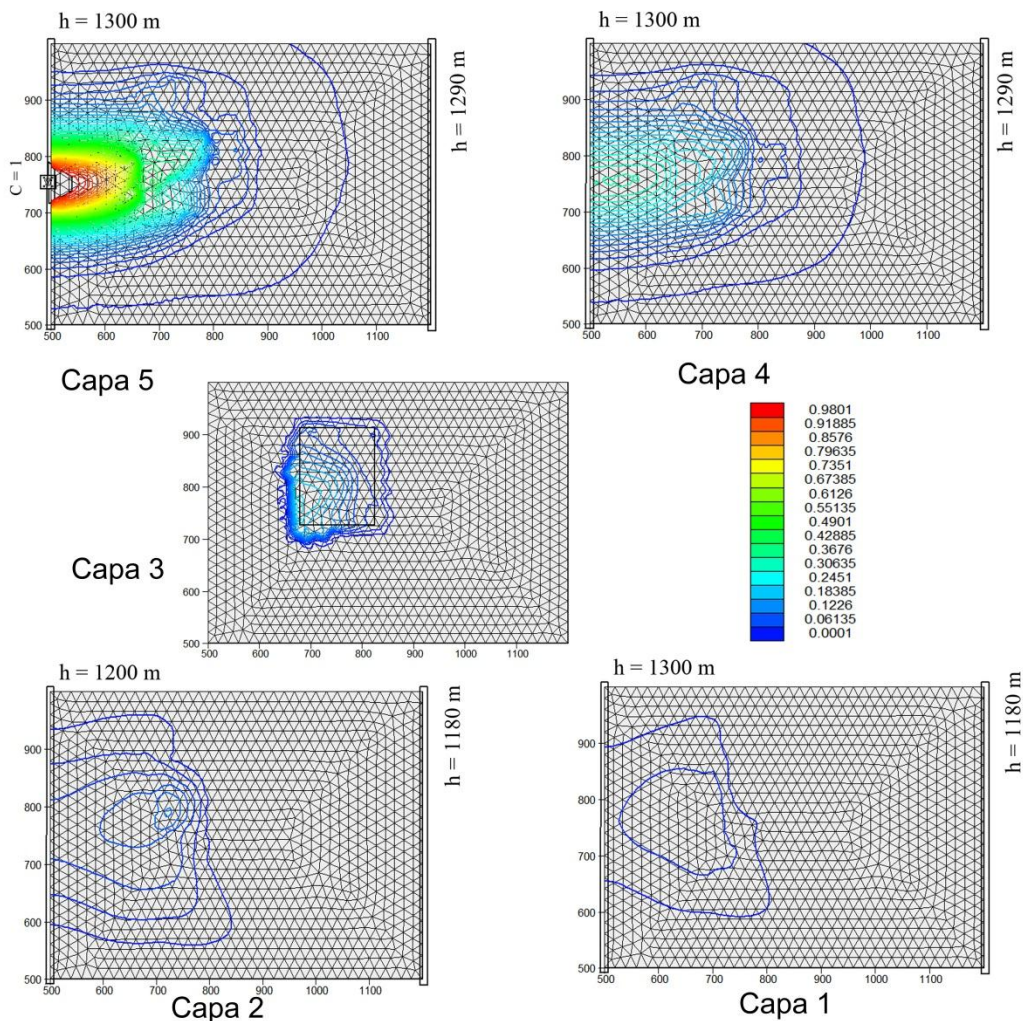


Figura 4.7. Modelo determinista de flujo y transporte con la pluma de contaminante después de 26 años (las capas se numeran a partir del basamento hacia la parte superior)

4.6.2 Selección de los pozos de monitoreo y el calendario de monitoreo

La Figura 4.8 muestra la posiciones y los posibles pozos de monitoreo y los puntos de estimación espacial (ellos están marcados con cuadros pequeños), para este ejemplo los puntos de estimación y monitoreo coinciden para todas las capas, excepto para la capa 3 en donde únicamente se tienen puntos de estimación. En cada pozo una muestra puede ser tomada cada 15 días y los tiempos de estimación son también a cada 15 días. Hay un total de 48 tiempos de estimación

y monitoreo. Así, hay 5760 puntos de monitoreo espacio tiempo y además 7200 puntos de estimación espacio tiempo. El error de muestreo es de 1×10^{-7} .

Se pretende elegir de todos los puntos de monitoreo espacio-tiempo a las posiciones que conserven el mismo nivel de información que se obtiene cuando se muestrean todos los posibles puntos de monitoreo espacio-tiempo. Así, se usó una reducción de la varianza total igual a 99.8 % de la reducción lograda cuando se usan todos los puntos de monitoreo espacio-tiempo. Para calcular esta reducción se aplicó la siguiente fórmula.

$$\left(1 - \frac{\sigma_T^2(n) - \sigma_T^2(5760)}{\sigma_T^2(0) - \sigma_T^2(5760)}\right) * 100 \quad (4.23)$$

Donde $\sigma_T^2(n)$ es la varianza total obtenida con el programa de monitoreo óptimo $\{x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n}\}$.

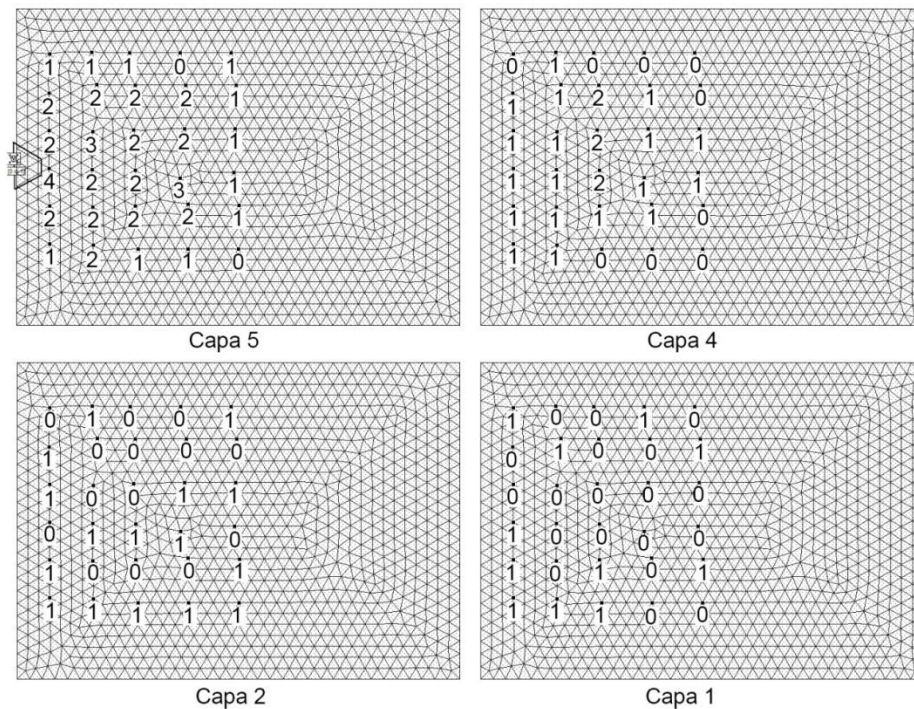


Figura 4.8. Posibles pozos de monitoreo, puntos de estimación y número de muestras para cada pozo en la red de monitoreo óptima en 3D.

Las figuras 4.9a y 4.9b muestran el número de muestras contra la varianza total y máxima, y el número de muestras contra el coeficiente de variación total y máximo, respectivamente, para las primeras 100 puntos de monitoreo espacio tiempo seleccionados. La varianza total inicial es 6.2, después de que 5760 muestras se toman ésta se reduce a 2.22×10^{-5} y después de que 100 muestras son tomadas se reduce a 0.01. Por otro lado, el coeficiente de variación total inicial es 1990.3, después de 5760 muestras se reduce a 13.3 y después de que se toman 100 muestras se reduce a 154.8. Entonces con 100 muestras la varianza total se reduce en un 99.8 % con respecto a la varianza original y el coeficiente de variación total se reduce un 92.8 % con respecto al coeficiente de variación total inicial.

La red de monitoreo resultante se muestra en la Figura 4.8. Se seleccionaron 49 muestras de la capa superior (capa 5), 24 muestras se seleccionaron de la capa 4, 16 muestras se seleccionaron de la capa 2 y 11 muestras se seleccionaron de la capa 1 (capa inferior). La distribución espacial de las muestras es coherente con los resultados del modelo determinista de transporte.

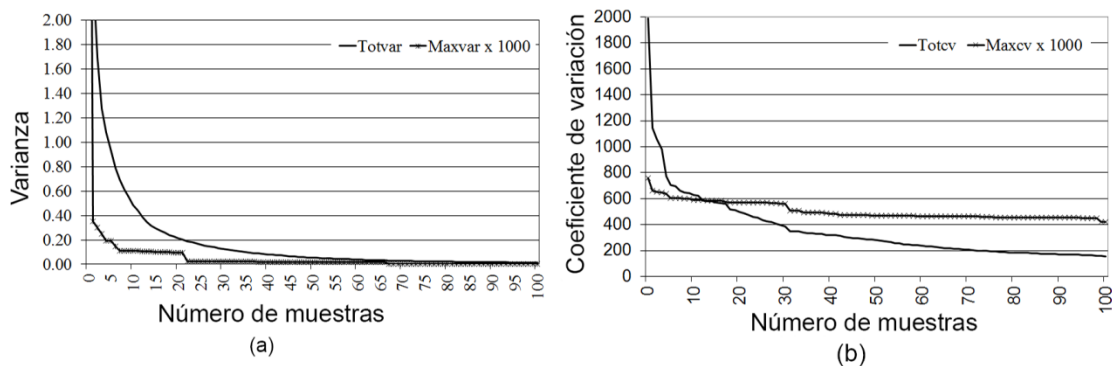


Figura 4.9. Número de muestreo contra varianza (a) y coeficiente de variación (b).

La distribución en el tiempo del programa de monitoreo para cada capa se muestra en la Figura 4.10. El primer tiempo de monitoreo da más información que el resto y el número de muestras disminuye con la profundidad. Así, para el primer tiempo de monitoreo, la capa cinco tiene 22 muestras, la capa cuatro tiene 17, la

capa dos tiene 16 y la capa uno tiene 13 posiciones de monitoreo; en total para el primer tiempo hay 68 posiciones de monitoreo. Para las capas 1 y 2 (capa geológica inferior) únicamente el primer tiempo de monitoreo fue seleccionado.

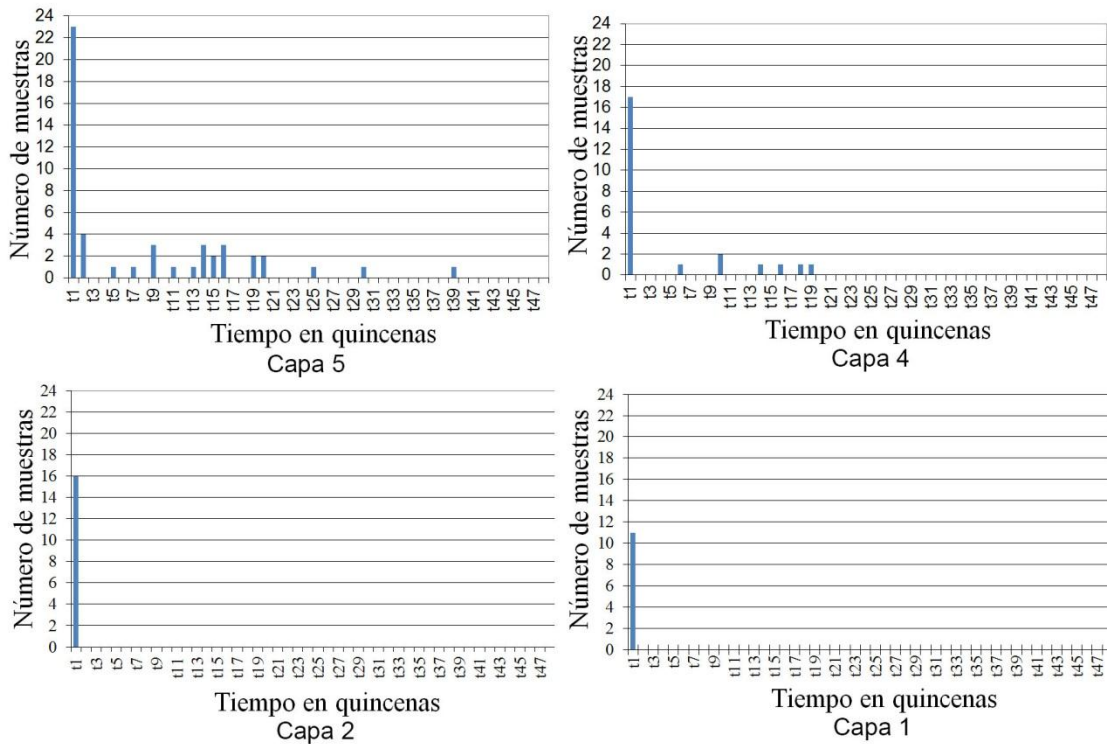


Figura 4.10. Distribución del tiempo de monitoreo de las cuatro capas.

4.6.3 Validación de la red

Para ilustrar la precisión de la estimación obtenida de la pluma en 3D en la metodología que aquí se presenta, se seleccionó una pluma aleatoria obtenida de la simulación Monte Carlo y se supuso a ésta como una pluma de contaminante real. Luego, usando todos los datos que se obtuvieron de la red de monitoreo anteriormente, se estimaron los valores de las concentraciones de contaminantes de la pluma usando el ESH. Se calcularon los errores de la estimación para los puntos de estimación en las cinco capas para los 48 tiempos de estimación; el error medio es 8.36×10^{-5} , el error cuadrático medio es 1.1×10^{-3} y la media del error del porcentaje absoluto, donde el error del porcentaje absoluto es calculado

como $Abs(c_{real} - c_{est}) * 100 / c_{real}$ es 1.77. Calculando la media del error del porcentaje absoluto para cada una de las capas se obtiene que para la capa 5 es de 2.19; para la capa 4, 2.06; para la capa 3, 2.19; para la capa 2, 1.01; y para la capa 1, 1.39. En la Figura 4.11 se presenta la comparación de la concentración estimada contra la concentración simulada (supuesta como la concentración real) para el tiempo 48. La media del error del porcentaje para dicho tiempo en la capa 5 es de 3.44; capa 4, 2.16; capa 3, 2.12; capa 2, 1.13; y capa 1, 1.77. La estimación que se obtiene para esta pluma en particular es muy buena.

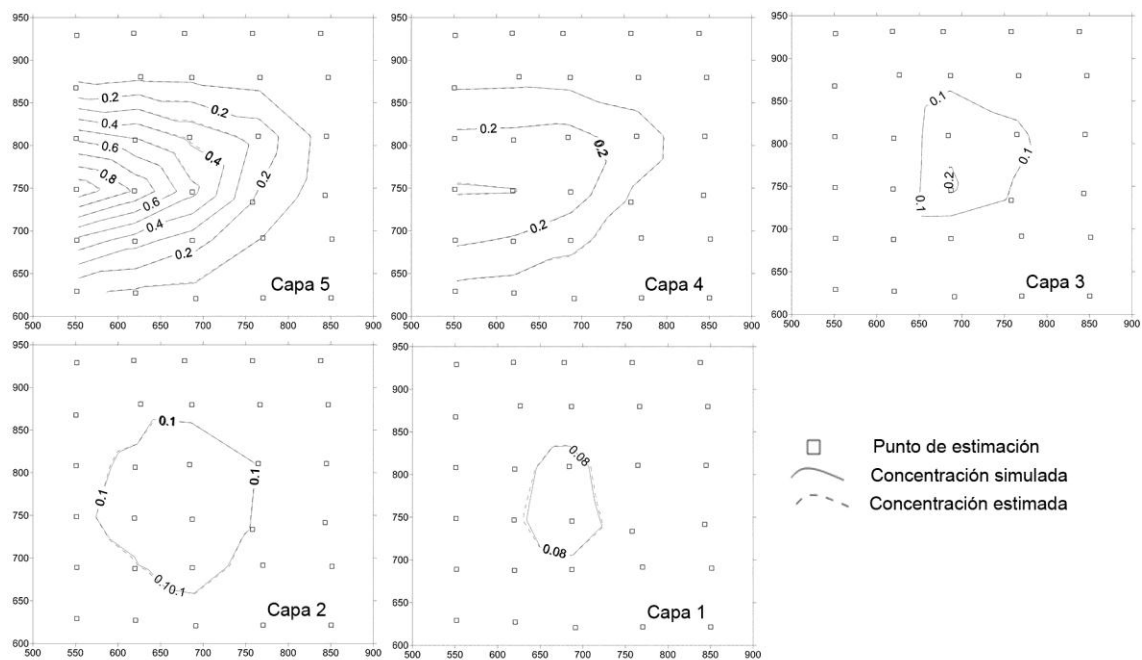


Figura 4.11. Concentración simulada y estimada (tiempo 48).

En la Figura 4.12 se presenta además las concentraciones estimadas (con red y sin red) y simuladas de los pozos 926 y 742. El pozo 926 está próximo a la fuente de contaminante y el pozo 742 está colocado en la zona de la ventana de arena de la capa 3. Se puede observar que las concentraciones estimadas con el ES son muy parecidas a las concentraciones supuestas como reales (tomadas de una realización de la simulación estocástica), se puede decir entonces que se tiene una buena estimación con el ESH. Por otro lado se aprecia también que las

estimaciones obtenidas sin considerar la red de monitoreo son diferentes a las simuladas y estimadas considerando la red de monitoreo.

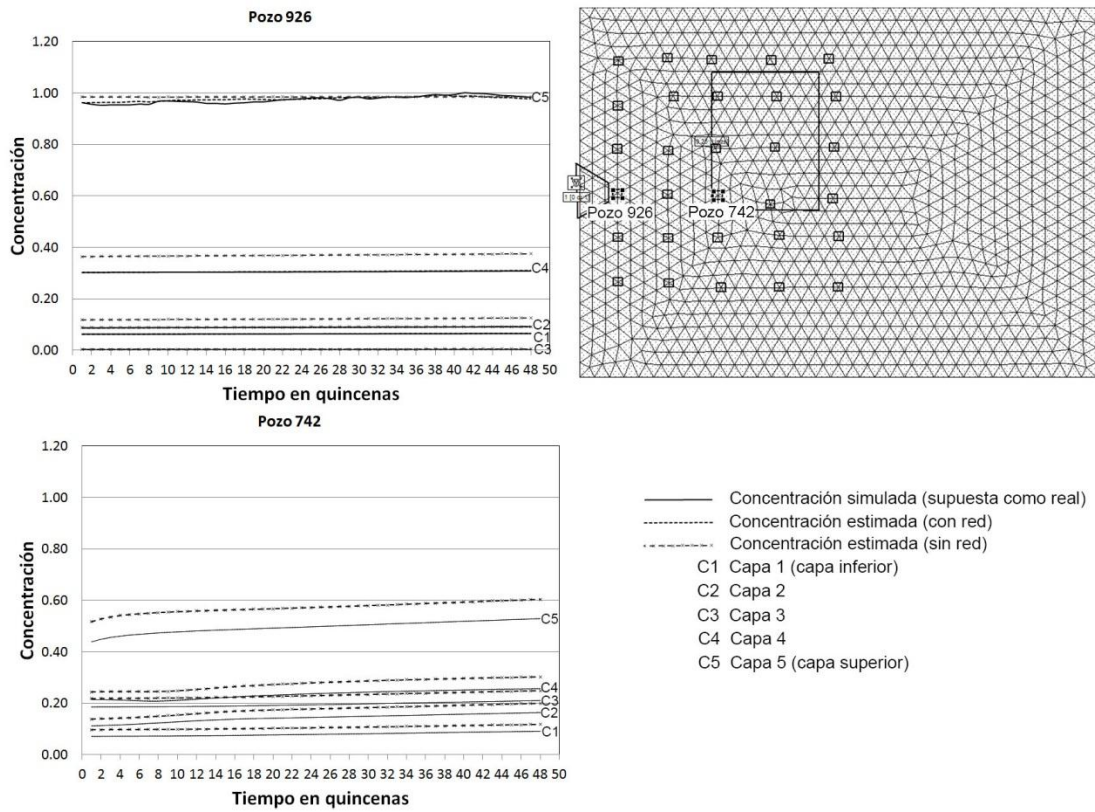


Figura 4.12. Concentración simulada y estimada de los pozos 926 y 742.

Capítulo 5. Aplicación del método de optimización algoritmo genético simple

En el capítulo 4 se presentó la extensión a 3D de la metodología de Herrera (1998) en el que se incluye un método de optimización secuencial para el diseño de la red. Una desventaja del método secuencial es que toda vez que se ha fijado una posición como parte de la red de monitoreo, ya no se puede mover y puede haber otra combinación que pudiera dar un mejor valor de la función objetivo. En este capítulo se usa un algoritmo genético simple (AGS) en el proceso de optimización del diseño de la red de monitoreo y sus resultados se comparan con los del método secuencial.

5.1 Algoritmo genético simple

Los algoritmos genéticos (AG) son métodos heurísticos de búsqueda inspirados en lo que sabemos acerca del proceso de evolución natural (Goldberg, 1989). Si la naturaleza ha sido capaz de generar organismos óptimos para desempeñarse en medio ambientes sumamente complejos, por qué no copiar sus métodos para resolver nuestros propios problemas y tratar de encontrarles soluciones que, de alguna manera sean óptimas.

Kuri y Galaviz, (2002) presentan la manera de seleccionar individuos, de cruzarlos y mutarlos en el proceso de un algoritmo genético simple como se describe a continuación:

1. Decidir cómo codificar el dominio del problema.
2. Generar un conjunto aleatorio (población inicial) de N posibles soluciones codificadas al problema. A esta se le llamará la población actual.
3. Calificar cada posible solución (individuo) de la población actual.
4. Seleccionar dos individuos de la población actual con una probabilidad proporcional a su calificación.

5. Lanzar una moneda al aire (con probabilidad p_c cae cara).
6. Si cayó cara mezclar los códigos de los dos individuos seleccionados para formar dos híbridos, a los que llamaremos *nuevos individuos*.
7. Si cayó cruz llamamos a los individuos seleccionados *nuevos individuos*.
8. Por cada bit de cada nuevo individuo lanzar otra moneda al aire (con probabilidad p_m cae cara).
9. Si cae cara cambiar el bit en turno por su complemento.
10. Si cae cruz el bit permanece inalterado.
11. Incluir a los dos nuevos individuos en una *nueva población*.
12. Si la nueva población tiene ya N individuos, llamarla *población actual* y regresar al paso 3, a menos que se cumpla alguna condición de terminación.
13. Si no, regresar al paso 4.

En el algoritmo se utiliza el término “lanzar una moneda al aire” para referirse a un experimento de Bernoulli (aquel en el que pueden ocurrir exclusivamente dos eventos posibles, uno con probabilidad p y otro con probabilidad $1-p$). Es decir, el lanzamiento de una moneda “extraña” en las que no necesariamente ambas caras son igualmente probables.

La condición de terminación, a la que se hace referencia en el paso 12, puede definirse de muchas maneras. Se puede fijar un número máximo de generaciones que ejecutará el algoritmo, o puede terminar cuando la mayoría de la población, digamos el 85 %, tenga una calificación que esté dentro de 0.6 desviaciones estándar de la media. En fin, opciones hay muchas. Generalmente la decisión acerca de cuándo es conveniente detenerse depende del problema o de las preferencias personales.

En el paso 4 se menciona que hay que seleccionar dos individuos con probabilidad proporcional a su calificación. Este tipo de selección proporcional es también llamado de “ruleta” (*roulette wheel selection*) por lo siguiente: supóngase

que se suman las calificaciones de todos los individuos de la población y esta suma es considerada el 100 % de una circunferencia. Luego, a cada individuo se le asigna el trozo que le corresponde de ésta según su aportación a la suma de las calificaciones. Es decir, si la calificación de un individuo es x_i entonces le corresponde un segmento de circunferencia dado por la simple regla de tres:

$$s = 2\pi \frac{x_i}{\sum_j x_j}$$

¿Qué ocurrirá entonces si se considera ésta como una ruleta y se coloca una lengüeta que roce el borde de ella? (Figura 5.1). La probabilidad de que dicha lengüeta quede en el arco correspondiente al individuo de calificación x_i cuando la rueda se detenga tras realizar algunos giros, es:

$$p(i) = \frac{x_i}{\sum_j x_j}$$

lo que es proporcional a la calificación (x_i) del individuo.

Aún queda por aclarar cómo es que se mezclan los códigos de dos individuos para formar los híbridos. En general hay muchas maneras de hacerlo, sin embargo, la que se usa en el AGS y una de las más populares, es el cruzamiento de un punto (*1-point-crossover*). En este tipo de cruzamiento, dados dos individuos se elige aleatoriamente un punto de corte entre dos bits cualesquiera del cromosoma. Esto define segmentos izquierdos y derechos en cada genotipo. Se procede entonces a intercambiar los segmentos derechos (o izquierdos, indistintamente) de cada individuo. De esto resulta, al igual que en el caso del cruzamiento de cromosomas, dos híbridos (Figura 5.2).

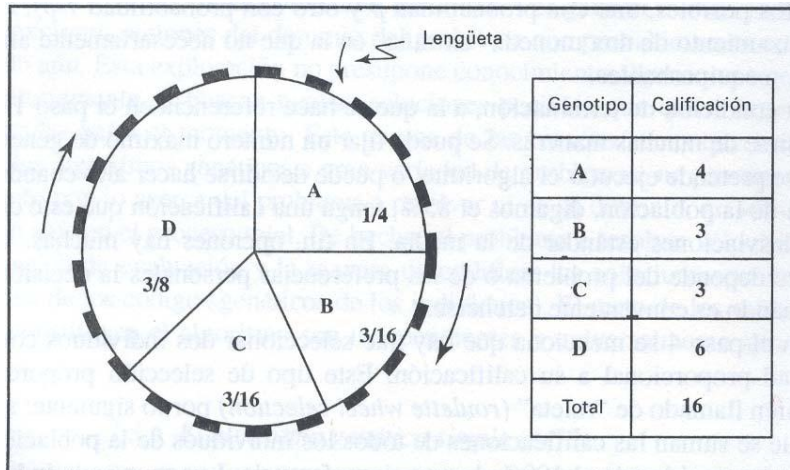


Figura 5.1. Selección proporcional o por ruleta (Kuri y Galaviz, 2002).

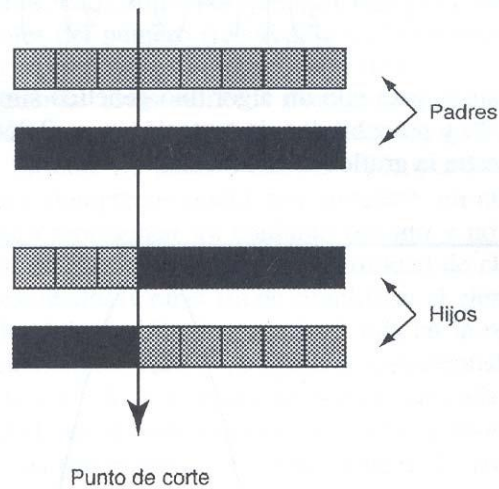


Figura 5.2. Cruzamiento de un punto (Kuri y Galaviz, 2002).

En el presente trabajo se hará referencia frecuentemente al algoritmo genético simple como aquel caracterizado por tener:

1. Tamaño de población fijo en todas las generaciones.
2. Selección proporcional (de ruleta).
3. Cruzamiento de un punto. La probabilidad de cruce se mantiene fija para todas las generaciones y todas las parejas.

4. Mutación uniforme (todas las posiciones de las cadenas genéticas tienen la misma probabilidad de ser cambiadas). La probabilidad de mutación permanece fija para todas las generaciones y todas las posiciones del individuo.
5. Selección no elitista. Esto es, no se copian individuos de una generación a otra sin pasar por el proceso de selección aleatoria (en este caso, proporcional).

5.1.1 Procedimiento de aplicación del algoritmo genético

En la aplicación del algoritmo genético simple para el diseño de una red de monitoreo óptima con la metodología descrita en el capítulo 4 se usaron dos estrategias de solución. La primera genera la población inicial de forma aleatoria. La segunda genera la población inicial de forma aleatoria pero incluye dentro de esta población al mejor individuo obtenido con el método secuencial.

Para comparar los dos métodos de optimización considerados, en la aplicación del algoritmo genético se siguió la misma filosofía del método secuencial: el algoritmo de solución va construyendo el diseño de la red de monitoreo en forma secuencial, esto es, primero diseña una red de monitoreo óptima para una sola posición, encontrada la posición óptima para una sola posición, el algoritmo agrega otra posición y busca ahora un diseño de monitoreo óptimo para dos posiciones, una vez obtenidas las dos posiciones óptimas el algoritmo agrega una nueva posición para obtener ahora una red óptima para tres posiciones y así sucesivamente hasta lograr el tamaño de la red deseada. El procedimiento se hace de la siguiente manera:

1. Se genera la población inicial, en la que cada individuo representa una solución posible para el diseño de la red de monitoreo de una sola posición. Se elige al mejor individuo para una red de monitoreo de una sola posición

espacio-tiempo. En este paso, el mejor individuo es el que se obtiene con el método secuencial.

2. Una vez obtenido el óptimo para la red de una sola posición, se genera nuevamente la población inicial, pero ahora cada individuo de la población inicial representa una solución posible para una red de monitoreo óptima de dos posiciones. La población inicial se genera en forma aleatoria y se incluye en ésta la solución óptima (de dos posiciones) obtenida con el método secuencial. Se corre el algoritmo genético (proceso de cruce y mutación) y se obtiene así la solución óptima para dos posiciones de monitoreo. Cabe además mencionar que el individuo obtenido con el método secuencial (solución óptima del método secuencial) siempre se conserva en la población a menos que éste sea mejorado durante el proceso de cruce y mutación. Si la solución obtenida con el método secuencial es mejorado, se conserva como solución al mejor individuo. En este proceso intermedio del diseño no se aceptan más de 100 evaluaciones de la función objetivo sin mejorar su valor. Si la función objetivo se ha evaluado 100 veces sin mejorar su valor se pasa al paso 3.
3. Se genera ahora una población inicial en donde cada individuo considera un tamaño de diseño de tres posiciones. Al mejor individuo obtenido en el paso 2 (que considera dos posiciones de monitoreo) se le agrega una nueva posición de monitoreo y se incluye éste a la población inicial. Nuevamente se corre el algoritmo genético como se explica en el paso 2. Se elige la mejor solución.
4. El proceso se repite hasta llegar al número de posiciones de monitoreo total de la red (valor asignado por el usuario). Cuando cada uno de los individuos de la población inicial incluyen el número de monitoreo total de la red, si la función objetivo no es mejorada, se corre el algoritmo genético durante 1000 evaluaciones de la función objetivo para ver la posibilidad de obtener

una mejor solución. Una vez cumplida las 1000 evaluaciones el proceso termina.

5.1.2 Procedimiento de cruce

Para el procedimiento de cruce la probabilidad de cruce (P_c) es conocida y asignada por el usuario.

De la población inicial se eligen dos individuos en forma aleatoria.

Se genera un número aleatorio ($randval$) entre 0 y 1, si $randval \leq P_c$ se lleva a cabo el proceso de cruce, caso contrario los dos individuos pasan a formar parte de la nueva población para la siguiente generación.

Cada individuo está compuesto por bits marcados con 0s y 1s. Los bits marcados con 0s indican las posiciones que no se consideran como de monitoreo y los marcados con 1s las posiciones consideradas para formar parte de la solución de monitoreo.

Para el procedimiento de cruce, a la pareja de individuos que se van a cruzar se marcan con apuntadores como se ilustra en el siguiente ejemplo.

Suponga que, de acuerdo con la probabilidad de cruce, se tienen dos individuos que deben ser cruzados, cada individuo consta de un total de 10 posibles posiciones de monitoreo ($DimSamp=10$) y se desea obtener una red de monitoreo de cuatro posiciones ($Nsamp=4$), como se observa a continuación:

Apuntador	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Individuo A	0	0	1	0	1	1	0	0	1	0
Individuo B	1	1	0	0	1	0	1	0	0	0

Se extraen de los individuos A y B, los apuntadores marcados con 1s.

Individuo A	3	5	6	9
Individuo B	1	2	5	7

Para determinar la posición de cruce se elige un número aleatorio entre 1 y $N_{\text{samp}}-1$. Así por ejemplo si el número aleatorio es 2, la cruce se lleva a cabo en la posición 2 de los apuntadores. Antes de realizar la cruce se busca si existe algún apuntador del individuo A igual al que se va a intercambiar desde B, en ese caso, no se cambian las parejas en las que se tienen los valores iguales y se realiza la cruce intercambiando los apuntadores restantes a partir del punto de cruce. Esto se hace para evitar que se repita una misma posición en un mismo individuo. En nuestro ejemplo el apuntador que se repite en ambos individuos es el 5. Por lo que las parejas que no se intercambian son:

Individuo A'		5	6	
Individuo B'		2	5	

En este ejemplo la cruce finalmente se tendría como sigue:

Individuo A'	3	5	6	7
Individuo B'	1	2	5	9

Una vez realizada la cruce con los apuntadores, se obtienen los nuevos individuos, recordando que el número del apuntador indica en qué posición de cada individuo se tiene un 1.

Apuntador	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Individuo A'	0	0	1	0	1	1	1	0	0	0
Individuo B'	1	1	0	0	1	0	0	0	1	0

5.1.3 Procedimiento de mutación

Para el proceso de mutación se conoce la probabilidad de mutación (P_m) asignado por el usuario. Se separan los apuntadores con 0s y los que tienen 1s.

Supongamos que se va a realizar el proceso de mutación para el individuo A' obtenido en el proceso de cruce del ejemplo anterior. Se tendría entonces al individuo A' con sus apuntadores como sigue:

Apuntador	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Individuo A'	1	0	0	0	1	1	0	0	1	0

Del individuo A' se tendrían los siguientes apuntadores:

0s	2	3	4	7	8	10
----	---	---	---	---	---	----

1s	1	5	6	9
----	---	---	---	---

Se realiza la mutación para los 1s, si alguno de los apuntadores de los 1s muta, se intercambiaría con alguno de los apuntadores de los 0s en forma aleatoria. Para el ejemplo, primero se determina si el apuntador 1 debe de mutar, para lo cual se genera un número aleatorio ($randval$) entre 0 y 1, si $randval < P_m$ entonces el apuntador 1 muta y se intercambia con un apuntador de los 0s. Para lograr lo anterior se genera un número aleatorio entre 1 y ($Dimsamp - N_{samp}$). Supongamos que para nuestro ejemplo $randval < P_m$ y el número aleatorio generado entre 1 y 6 es igual a 3. Por lo tanto el apuntador 1 de los 1s se intercambia con el apuntador 4 de los 0s y así se genera las siguientes cadenas para los 0s y los 1s.

0s	2	3	1	7	8	10
----	---	---	---	---	---	----

1s	4	5	6	9
----	---	---	---	---

Ahora para continuar con la mutación se excluyen los apuntadores intercambiados anteriormente como se muestra:

0s	2	3	7	8	10
----	---	---	---	---	----

1s	5	6	9
----	---	---	---

Se hace ahora el proceso de mutación para el apuntador 5 de los 1s siguiendo el mismo procedimiento explicado anteriormente hasta terminar con el proceso de mutación. Como P_m es muy pequeño, siempre se tendrán pocos apuntadores mutados. Supongamos que para nuestro ejemplo ninguno de los tres apuntadores restante (5,6,9) de los 1s mutó, se tendría entonces al nuevo individuo después de proceso de mutación como sigue:

Apuntador	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Individuo A''	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0

Éste sería el individuo para la población de la siguiente generación. El mismo procedimiento de mutación se aplicaría para el individuo B'

5.2 Probar el método de optimización AG para diferentes valores de probabilidad de cruce, probabilidad de mutación y tamaño de la población

Para aplicar el método de optimización AG en el diseño de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea es necesario primero realizar corridas del método de optimización para encontrar los valores de los parámetros (probabilidad de cruce, probabilidad de mutación y tamaño de población) con los que el método se acerca más a la solución óptima. Para hacer dichas pruebas se eligió un problema

de diseño de una red de monitoreo de la calidad del agua subterránea en dos dimensiones que se describe a continuación.

5.2.1 Problema ejemplo en 2D

Al lado izquierdo de una región de 500 m x 700 m se tiene una fuente de contaminante activa durante 26 años, para los últimos cinco años se tienen tres pozos de extracción de agua potable en el lado derecho de la región (Figura 5.3). Se procede a sanear el acuífero con tres pozos de extracción próximos a la fuente de contaminante y tres pozos de inyección aguas abajo de la fuente del contaminante por los dos años siguientes (un periodo total de simulación de 28 años). El objetivo es diseñar una red de monitoreo espacio-temporal para los dos años de saneamiento. En la Figura 5.3 se muestran las características del modelo de flujo y transporte.

5.2.2 Modelo de flujo y transporte en 2D

Se diseñó un modelo de flujo y transporte con las características siguientes:

- Dominio 500 x 700 m.
- Conductividad hidráulica 0.25 m/día.
- Condición inicial: se tomó la condición en estado permanente
- Condiciones de frontera: cargas asignadas a la izquierda y a la derecha de 1300 m y 1290 m respectivamente.
- Elevación del basamento es de 1000 msnm y la elevación superior del acuífero de 1350 msnm.
- El gasto de los pozos de extracción de agua potable de 432 m³/día.
- Coeficiente de almacenamiento específico = 0.0001
- Coeficiente de dispersión: $\alpha_x = 30$ m y $\alpha_y = 3$ m.
- Porosidad = 0.20
- Las condiciones de frontera de transporte se asignaron igual a 1.

Hay un sistema de bombeo y tratamiento que consiste de tres pozos de extracción y tres pozos de inyección con un caudal de $1300 \text{ m}^3/\text{día}$ cada uno.

En la Figura 5.3 se muestran las características del modelo de flujo y transporte en estado permanente.

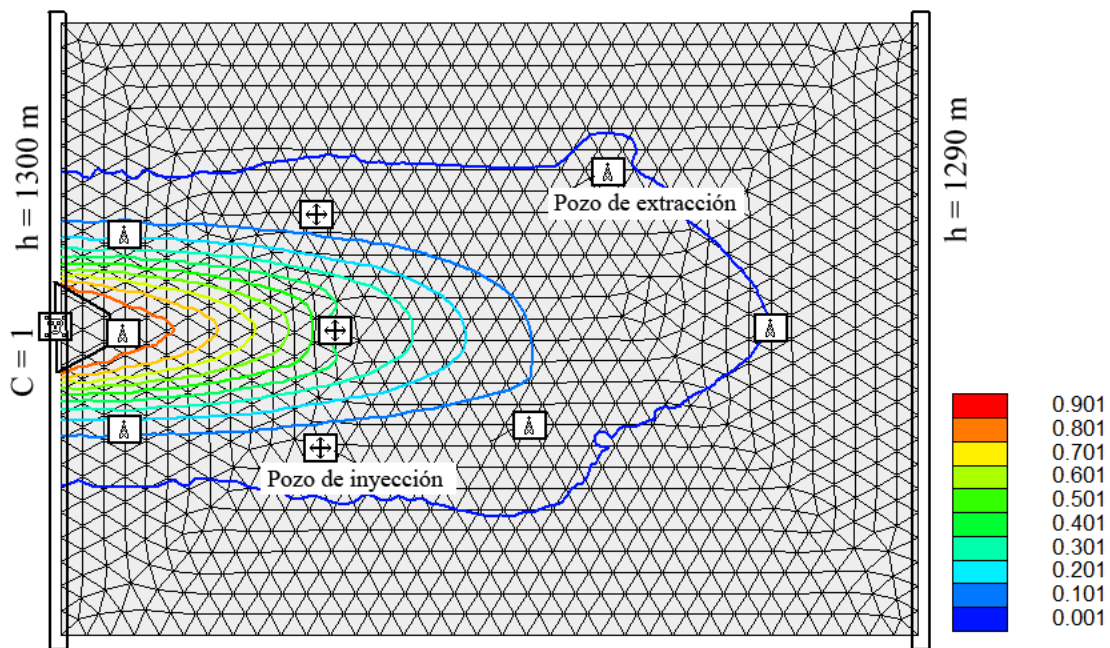


Figura 5.3. Diseño del modelo de flujo y transporte con la pluma de contaminante a los 26 años.

5.2.3 Simulación estocástica

Para la simulación estocástica la conductividad hidráulica es aleatoria, suponiendo conocidas la media de la conductividad hidráulica y el semivariograma de $\ln(K)$.

Con el programa SGSIM se obtuvieron 1000 realizaciones de la conductividad hidráulica para todo el dominio del modelo descrito anteriormente. Para el SGSIM se supuso lo siguiente:

- Una malla rectangular de 156 x 106 elementos
- Un modelo esférico del semivariograma con los parámetros siguientes: $\text{sima} = 0.7$, $\text{alcance} = 100$ y $\text{Pepita} = 0.3$
- Un algoritmo de kriging simple.

Una vez que se generaron las realizaciones de la conductividad hidráulica, éstas se utilizaron para la simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea obteniendo las realizaciones de la concentración de contaminante. Con lo anterior se obtuvo la media y la matriz de covarianza de las concentraciones en los puntos de monitoreo y estimación.

5.2.4 Diseño de la red 2D

El paso siguiente fue la selección óptima de los puntos de muestreo espacio temporales aplicando el ESH y los métodos de optimización AG o secuencial para seleccionar una red de 35 posiciones espacio-temporales. Para la aplicación de los métodos optimización se tienen los siguientes casos:

1. Estimación de la varianza mínima usando únicamente el método de optimización secuencial.
2. Estimación de la varianza mínima usando únicamente el método de optimización AG.
3. Estimación de la varianza mínima usando el método de optimización AG pero considerando en la población inicial la solución obtenida con el método secuencial. Para este caso se probó para diferentes probabilidades de cruce y probabilidades de mutación conservándose una población fija de diez individuos.

5.2.5 Resultados

En la Figura 5.4 se presenta la varianza total mínima estimada para el método secuencial (caso 1) y para el AG (caso 2) utilizando una población aleatoria y una probabilidad de cruce de 0.6, probabilidad de mutación de 0.01 y una población inicial de diez individuos. Se observa en esta figura que el método secuencial da una mejor solución en la estimación de la varianza total mínima.

En las Figuras 5.5, 5.6 y 5.7 se presentan la varianza total mínima que se obtiene al considerar en la población inicial del AG la solución obtenida con el método secuencial (caso 3) para diferentes probabilidades de cruce y de mutación. Se observa que las soluciones están muy próximas a la solución que se obtiene al utilizar únicamente el método secuencial y las diferencias en los valores de la varianza total mínima no se puede apreciar en dichas figuras.

En la Tabla 5.1 se observan los valores de las varianzas totales mínimas obtenidas al utilizar diferentes combinaciones de probabilidades de cruce y probabilidades de mutación, usando una población inicial de diez individuos. Se puede observar que se tienen dos combinaciones que dan un mejor estimado en la varianza total mínima (se presentan en las celdas sombreadas de la tabla 5.1). Las combinaciones son cuando la probabilidad de cruce es igual a 0.5 con la probabilidad de mutación igual a 0.02; y cuando la probabilidad de cruce igual a 0.6 con probabilidad de mutación de 0.06. El valor estimado de la varianza total mínima con las combinaciones anteriores es de 0.00075266. Si se aplica únicamente el método secuencial la varianza total mínima es de 0.00075310. La diferencia que se tiene entre el algoritmo genético combinado con el método secuencial y el puro método secuencial no es significativa. Por otro lado si se usa el algoritmo genético generando la población inicial de forma aleatoria la varianza mínima fue de 00081705.

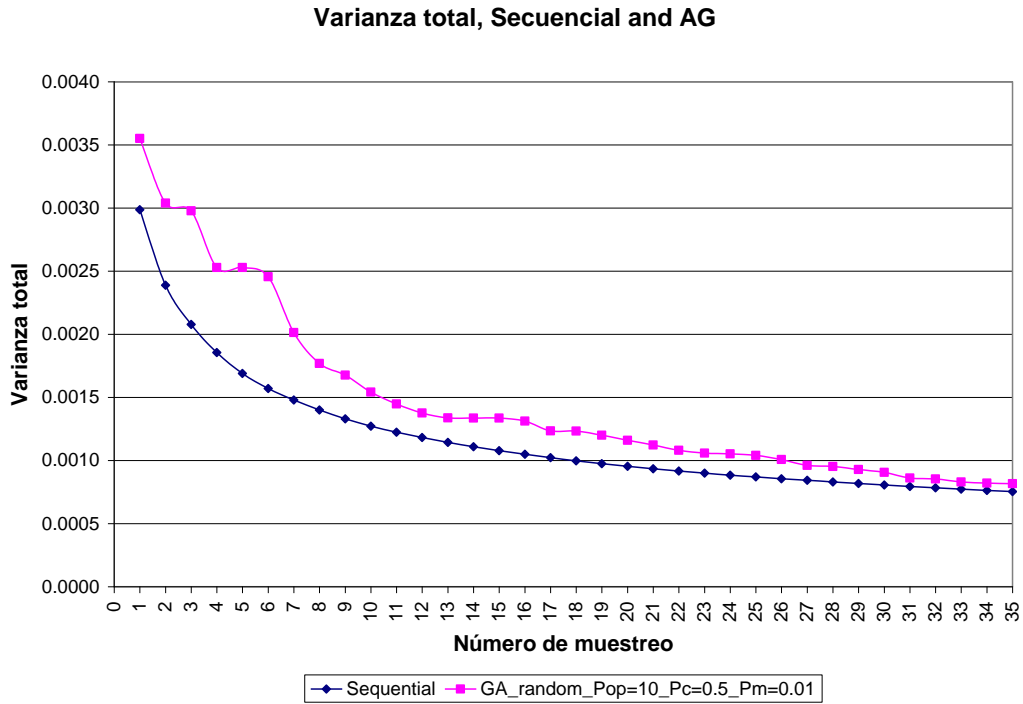


Figura 5.4. Estimación de la varianza mínima con el método secuencial y el AG con población inicial aleatoria.

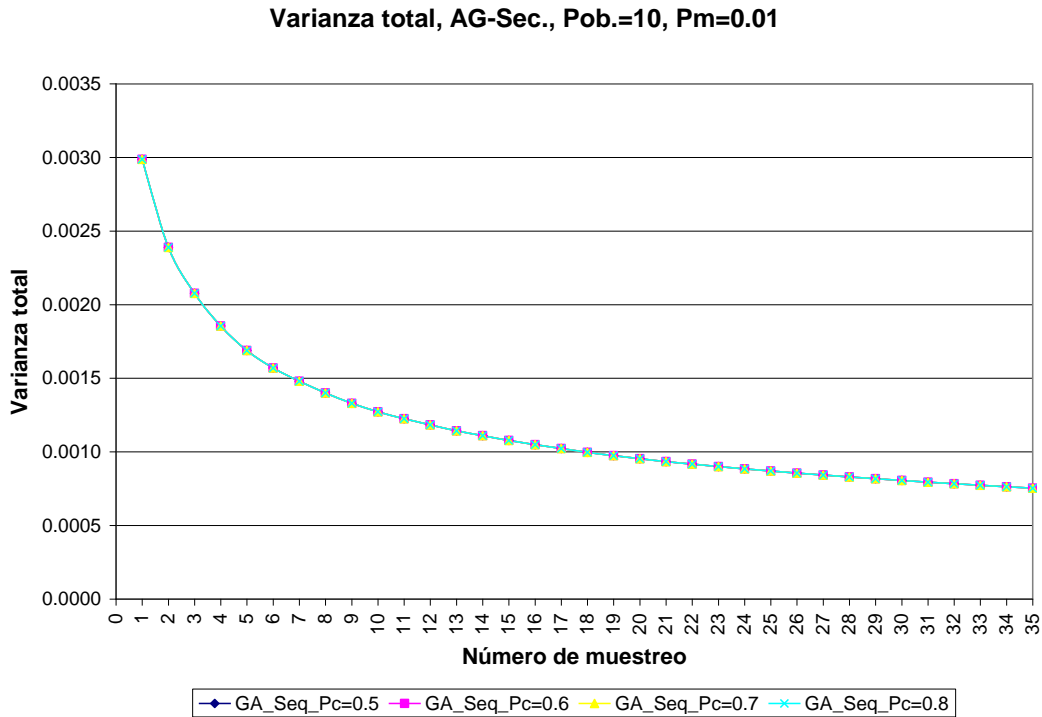


Figura 5.5. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruza y de mutación.

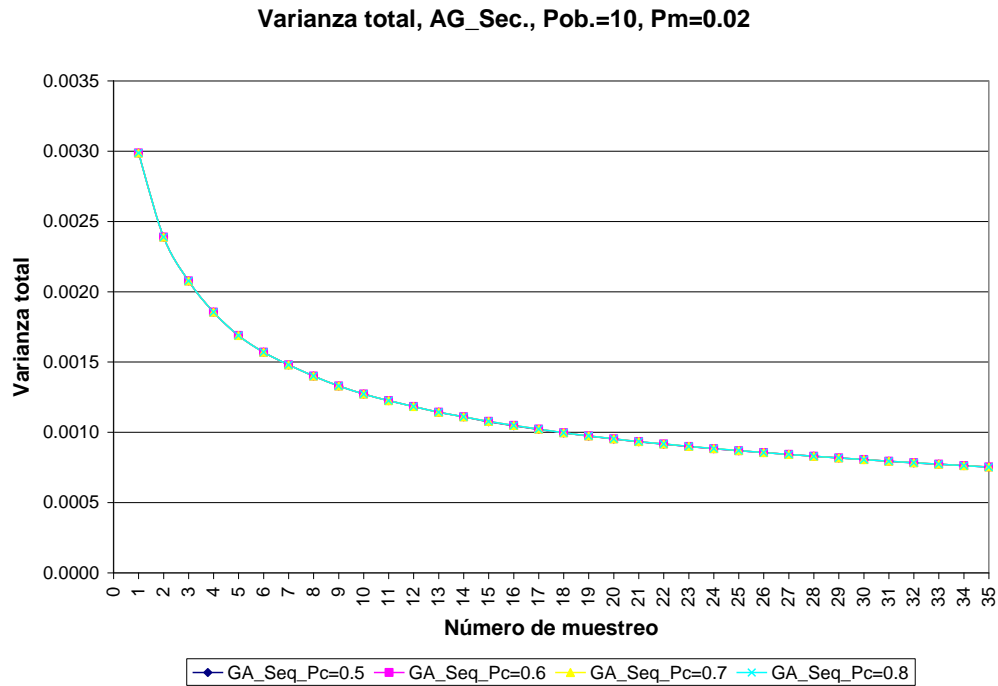


Figura 5.6. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruce y de mutación.

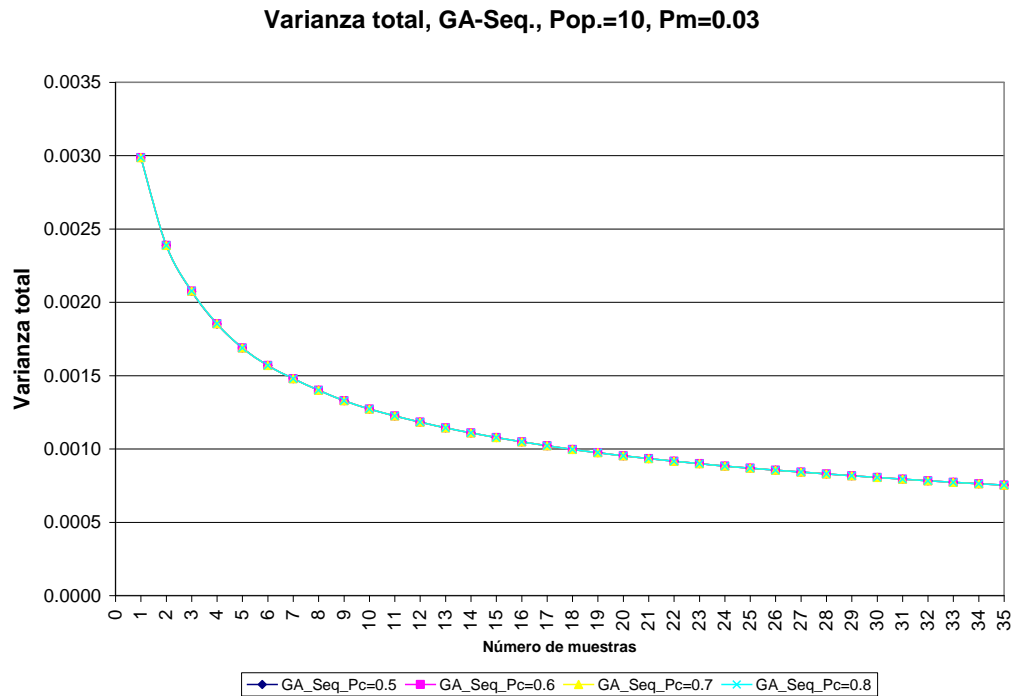


Figura 5.7. Varianza total mínima para diferentes valores de la probabilidad de cruce y de mutación.

Tabla 5.1 Valores de la varianza total mínima obtenidos para diferentes probabilidades de cruce y de mutación.

Pm\Pc	Varianza total mínima, GA-Seq., Pop.=10				
	0.5	0.6	0.7	0.8	Mejor solución
0.01	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310
0.02	0.00075266	0.00075289	0.00075310	0.00075282	0.00075266
0.03	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310
0.04	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075282	0.00075282
0.05	0.00075310	0.00075310	0.00075309	0.00075310	0.00075309
0.06	0.00075310	0.00075266	0.00075310	0.00075310	0.00075266
0.07	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310
0.08	0.00075310	0.00075281	0.00075310	0.00075310	0.00075281
0.09	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310
0.1	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310	0.00075310
Mejor solución					
AG_Sec.					0.00075266
Secuencial					0.00075310
AG, pob. Aleatoria					0.00081705

5.3 Problema ejemplo en 3D

Para aplicar el AG como método de optimización en el diseño óptimo de redes de monitoreo de la calidad del agua subterránea se usó el problema ejemplo 1 que se presentó en el capítulo 4 de este trabajo. La única diferencia radica en el método de optimización utilizado.

5.3.1 Diseño de la red de monitoreo en 3D

Al igual que en el problema ejemplo 1 del capítulo 4, aquí se seleccionaron los puntos de monitoreo aplicando el ESH solo que ahora combinado con el método de optimización AG en lugar del método secuencial. Para decidir el número de puntos de monitoreo espacio-temporales se hizo un análisis de la varianza total contra número de monitoreo considerando inicialmente 200 puntos de monitoreo y se comparó la solución del AG con la solución obtenida con el método secuencial. En la Figura 5.8 se observa la diferencia entre el método secuencial y el AG, puede observarse que con el AG la varianza total mínima se mejora aunque no de manera significativa. Cabe además mencionar que en la aplicación del algoritmo genético se considera dentro de la población inicial a la solución obtenida con el método secuencial, una probabilidad de cruce de 0.6 y probabilidad de mutación de 0.06. El AG ejecutado en una PC Intel® Core™ i5 CPU, 2.53 GHz, con 6.0 GB de Ram tardó 240 horas con 10 minutos.

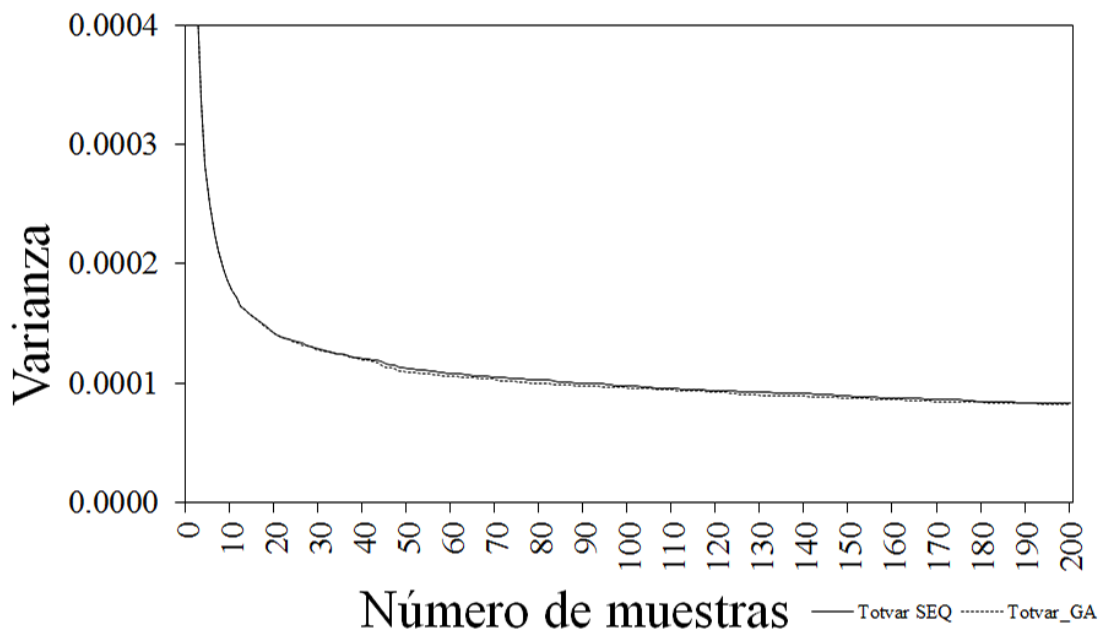


Figura 5.8. Comparación de la varianza total del AG con el método secuencial.

En la Figura 5.9 se presentan los puntos de monitoreo y el número de muestras a tomar para cada capa. Los puntos a muestrear en la Figura 5.9 tienen un número asociado que indica el número de muestras a tomar durante los dos años, se puede observar que los puntos de estimación tienen una influencia importante en la obtención de la red de monitoreo, los puntos más muestreados tienen 4 y 10 muestreos para la capa superior, 2 y 4 muestreos para la capa inferior y se localizan en el área central muy cercanos a uno de los puntos de estimación. Se observa además que conforme uno se aleja de los puntos de estimación el número de muestras disminuye. Se tienen más muestras en el punto de estimación ubicado en la parte central debido a que este punto presenta la varianza del error de la estimación más grande durante los dos años de predicción, esto se debe a que la concentración esperada en ese punto es mayor en dicho tiempo.

En la Figura 5.10 se presenta la distribución del muestreo en el tiempo para cada capa y el muestreo total (ambas capas). Se observa que el número de muestras disminuye para cada semestre en cada capa. Para la capa superior en el primer semestre se toman 28 muestras, en el segundo semestre se toman 11 muestras, en el tercer semestre se toman 7 muestras y en el cuarto semestre se toman 13 muestras para tener un total de 59 muestreos en la capa superior. Para la capa inferior en el primer semestre se toman 13 muestras, en el segundo semestre se toma 1 muestra, en el tercer semestre se toman 4 muestras y en el cuarto semestre se toman 5 muestras haciendo un total de 23 muestras en todo el periodo. El resultado anterior significa que el primer semestre da más información que el resto de los semestres. Se puede observar también que el número de muestreo aumenta al final de cada semestre, este comportamiento es lógico ya que el algoritmo minimiza el error de la varianza total estimada en la última quincena de cada semestre.

Si se comparan los resultados obtenidos con los métodos de optimización secuencial y algoritmo genético simple se tiene lo siguiente:

En cuanto a la distribución espacial los resultados son muy similares. En ambos métodos se muestrea más en la parte central cerca los puntos de estimación, el punto con mayor muestro en la parte central tiene 8 muestras en la capa superior con el método secuencial, mientras que en ese mismo punto con el algoritmo genético se tienen 10 muestras. El punto que más se muestrea en la parte central de la capa inferior tiene 3 muestras con el método secuencial, mientras que con el método de algoritmo genético este mismo punto presenta 4 muestras. En cuanto a la distribución del muestreo en el tiempo, se tienen diferencias importantes, con el método secuencial se muestrea más al final de cada semestre, teniéndose únicamente muestreo en los tiempos intermedios del primer semestre, no así con el algoritmo genético, que aunque tiende a muestrear más al final de cada semestre, lo hace en menor cantidad que el método secuencial, distribuyendo el muestreo en los tiempos intermedios de cada semestre. Aunque el algoritmo genético mejora ligeramente la función objetivo, en la forma en que se muestrea en el tiempo puede resultar más costoso que el método secuencial, dado que el método secuencial considera mayor muestreo al final de cada semestre y únicamente considera muestreo en los tiempos intermedios del primer semestre. Sin embargo, si se considera el costo de muestreo en la función objetivo, es probable que con el algoritmo genético se tuviera un diseño de red diferente.

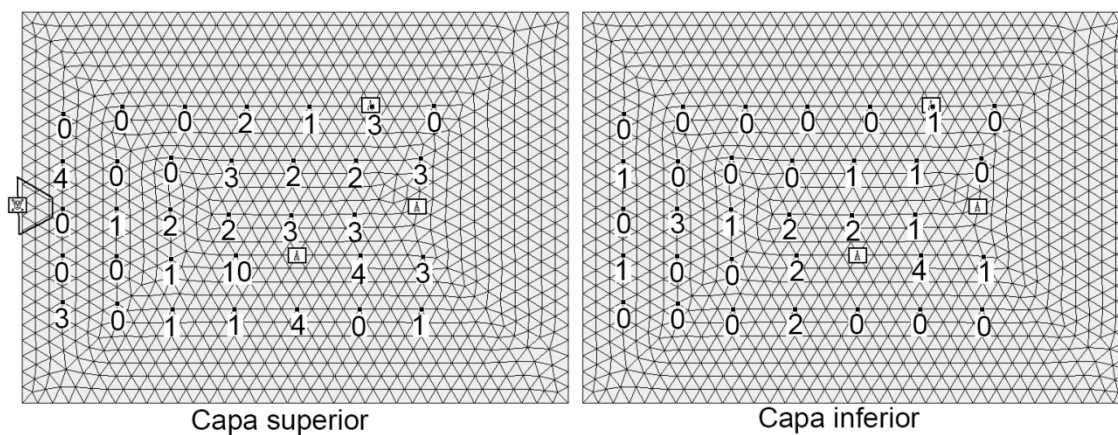


Figura 5.9. Puntos de monitoreo y el número de muestras a tomar por capa (AG).

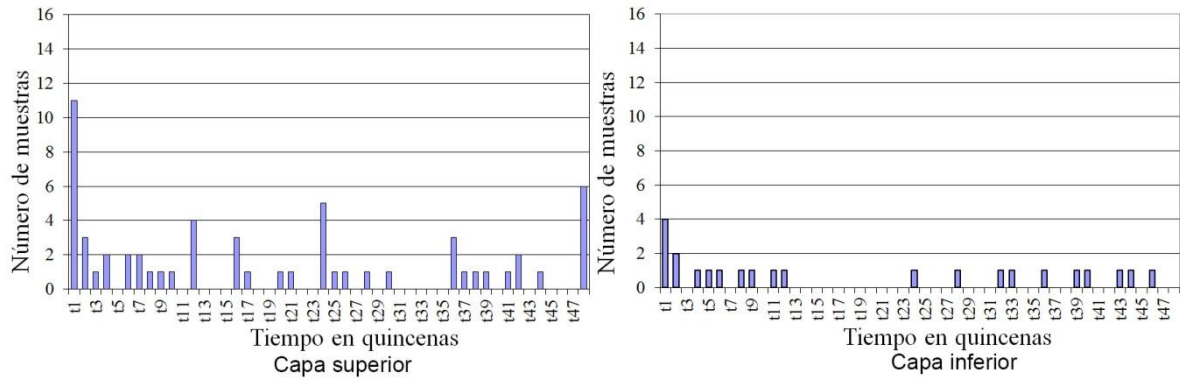


Figura 5.10. Distribución del monitoreo en el tiempo para cada capa.

Capítulo 6. Conclusiones y recomendaciones

6.1 Conclusiones

Las conclusiones que se obtuvieron referentes al análisis de convergencia de la conductividad hidráulica en la cual se comparan los métodos de LHS y SGS son las siguientes.

1. De acuerdo con los resultados obtenidos en los ejemplos presentados se concluye que el método de LHS converge con menos realizaciones que el método de SGS, por lo que, si se generan realizaciones de K con dicho método se tendría un ahorro importante en el esfuerzo computacional de la simulación estocástica del flujo y transporte del agua subterránea.
2. La semilla tiene mucho menor efecto sobre el método LHS que sobre el método SGS.
3. Hay dos desventajas importantes del método LHS en comparación con el método SGS. Una de las primeras es que si n_1 realizaciones se generan con el método LHS, los momentos se pueden evaluar únicamente después de que todas las realizaciones se han obtenido. Si los momentos no son satisfactorios, es necesario generar un nuevo conjunto de realizaciones, n_2 , donde $n_2 > n_1$. Esto es, no es posible acumular las realizaciones de una forma secuencial para el método LHS, mientras que para el método SGS sí es posible. La segunda desventaja del LHS es que requiere mucha memoria computacional debido a que es necesario almacenar al menos una matriz de $N \times N \times N_r$, donde N es el número de posiciones a ser generadas y N_r es el número de realizaciones.
4. Cuando se trabaja con problemas de simulación estocástica de flujo y transporte, si se tiene memoria de cómputo suficiente, se recomienda usar

el método LHS debido a que éste puede ahorrar una cantidad considerable de esfuerzo computacional.

Con respecto a la extensión del método de Herrera al monitoreo en 3D:

1. Los resultados indican que la metodología de Herrera se puede extender exitosamente para el diseño óptimo de redes de monitoreo que incluye la selección de muestras de agua a diferentes profundidades. Este método puede ser una herramienta valiosa para el diseño óptimo de redes de monitoreo con sistemas multinivel.
2. El ESH fue usado para problemas de aguas subterráneas antes que el EnKF, y aun no se ha publicado una comparación del funcionamiento de ambos métodos en el contexto de problemas de contaminación del agua subterránea. La comparación de ambos métodos podría hacerse en un trabajo futuro para evaluar los beneficios y debilidades de ambos métodos.
3. Los resultados muestran que el método propuesto puede ser una herramienta importante para el diseño de redes de monitoreo a diferentes profundidades para profesionales con recursos de cómputo limitado dado que éste no requiere de un esfuerzo computacional enorme a diferencia de, por ejemplo, Kollat et al. (2010) que utilizaron un entorno de supercómputo en paralelo para el diseño de una red de monitoreo multiobjetivo.

Finalmente en la comparación del método de optimización algoritmo genético simple y el método secuencial:

1. El esfuerzo computacional es mayor si se usa el método de optimización AG. Para el método secuencial es del orden de dos minutos y para el AG de 240 horas con 10 minutos considerando un tamaño de red de 200 posiciones, en una PC Intel® Core™ i5 CPU, 2.53 GHz, con 6.0 GB de Ram.

2. Aunque con los métodos probados se obtienen redes de monitoreo con diferencias en la distribución espacial de los pozos, las diferencias son mínimas. Sin embargo, en la distribución temporal del monitoreo se tienen diferencias importantes, con el método secuencial se muestrea más al final de cada semestre, teniéndose únicamente muestreo en los tiempos intermedios del primer semestre, no así con el algoritmo genético, que aunque tiende a muestrear más al final de cada semestre, lo hace en menor cantidad, distribuyendo el muestreo en los tiempos intermedios de cada semestre. Aunque el algoritmo genético mejora ligeramente la función objetivo, en la forma en que se muestrea en el tiempo puede resultar más costoso que el método secuencial, dado que el método secuencial considera mayor muestreo al final de cada semestre y únicamente considera muestreo en los tiempos intermedios del primer semestre. Sin embargo, es probable que si se considerara en el AG el costo de muestreo en la función objetivo, pudiera obtenerse un diseño de red económicamente más favorable.
3. A pesar de que en los problemas probados y con los parámetros considerados el AG no mejora significativamente la varianza mínima, con el AG es posible incluir el costo de monitoreo en la función objetivo, lo que no se puede hacer con el método secuencial.

6.2 Recomendaciones

En la función objetivo del presente trabajo únicamente se minimiza la varianza como criterio de optimización de la red de monitoreo, se sugiere considerar en la función objetivo dos elementos adicionales. El primero es el costo de muestreo y de perforación y el segundo es el costo asociado con la incertidumbre (riesgo de falla de la red) además del costo de muestreo y perforación.

Función objetivo propuesta considerando los costos de muestreo y construcción de los pozos.

La función objetivo que se propone para considerar el costo y la construcción de los pozos es la siguiente:

$$\text{Min} \sum_j \left(\sum_i C \cdot w_{i,j} + C_j \right) \cdot x_j$$

Sujeto a

$$w_{i,j} \leq x_j (\forall i \in I1, j \in J)$$

$$cv_{i,k} \leq cv_0 (\forall i \in I2, k \in K)$$

$$x_j = \begin{cases} 1 & \text{si un pozo se instala en la posición } j \\ 0 & \text{si un pozo no se instala en la posición } j \end{cases} \quad \forall j \in J;$$

$$w_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si se toma una muestra en el tiempo } i, \text{ posición } j \\ 0 & \text{si no se toma una muestra en el tiempo } i, \text{ posición } j \end{cases} \quad \forall i \in I1, j \in J$$

donde

J : pozos de muestreo

$I1$: tiempos de muestreo,

$I2$: tiempos de estimación,

K : pozos de estimación

C_j : costo de instalación pozo

C : costo de muestra pozo existente.

σ^2 : varianza

Esta función objetivo es solo una propuesta y podría modificarse al hacer pruebas en cuanto a su efectividad en el diseño de una red de monitoreo de la calidad del agua subterránea.

Función objetivo que considera el costo asociado con la incertidumbre.

En trabajos realizados por Massmann and Freeze (1987) y Massmann *et al.* (1990), presentan el riesgo $R(t)$ definido como el costo esperado asociado con la probabilidad de falla de detección de un contaminante, la expresión que se presenta en dicho trabajo es la siguiente:

$$R(t) = P_f(t)CF(t)\gamma(CF)$$

$P_f(t)$ probabilidad de falla en el año t (fracción decimal)

$CF(t)$ costo que se producirá debido a las consecuencias de una falla en el año t
(M.N)

$\gamma(CF)$ función de utilidad normalizada.

Considerando los trabajos antes mencionado se propone incluir el costo asociado a la incertidumbre y se propone la siguiente función objetivo.

$$\text{Min} \sum_j \left(\sum_i c \cdot w_{i,j} + c_j \right) \cdot x_j + \sum_{t=0}^T \frac{R(t)}{(1+i)^t}$$

Sujeto a

$$w_{i,j} \leq x_j (\forall i \in I1, j \in J)$$

$$cv_{i,k} \leq cv_0 (\forall i \in I2, k \in K)$$

$$x_j = \begin{cases} 1 & \text{si un pozo se instala en la posición } j \\ 0 & \text{si un pozo no se instala en la posición } j \end{cases} \quad \forall j \in J;$$

$$w_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si se toma una muestra en el tiempo } i, \text{ posición } j \\ 0 & \text{si no se toma una muestra en el tiempo } i, \text{ posición } j \end{cases} \quad \forall i \in I, j \in J$$

donde

J : pozos de muestreo

I_1 : tiempos de muestreo,

I_2 : tiempos de estimación,

K : pozos de estimación

C_j : costo de instalación pozo

c : costo de muestra pozo existente.

c.v.: Coeficiente de variación

t : tiempo

T : tiempo horizonte

i : tasa descuento (fracción decimal)

$R(t)$: riesgo en el tiempo t (M.N.)

Bibliografía

ASCE Task Committee, (2003). *“Long-term groundwater monitoring: The state of the art.”*. Reston, Va.

Babu, D., G. F. Pinder, A. Niemi, D. P. Ahlfeld, y A. Stothooff, (1997). *“Chemical transport by three dimensional groundwater flows (PTC-Princeton Transport Code)”*. Rep. 84-WR-3, Princeton University, Department of Civil Engineering. Princeton, N.J.1997.

Bierkens, M. F. P., (2006). “Designing a monitoring network for detecting groundwater pollution with stochastic simulation and a cost model”. *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.* 20: 335-351.

Briseño, J. (2012). *“Método para la calibración de modelos estocásticos de flujo y transporte en aguas subterráneas, para el diseño de redes de monitoreo de calidad del agua”*. Tesis de doctorado. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México. 316 pp.

Cameron, K. y P. Hunter, (2000). “Optimization of LTM Networks Using GTS: Statistical Approaches to Spatial and Temporal Redundancy”. *Tech. Rep., Air Force Center for Environmental Excellence*, Brooks AFB, Tx.

Chadalavada, S. y B. Datta, (2008). “Dynamic Optimal Monitoring Network Design for Transient Transport of Pollutants in Groundwater Aquifers”. *Water Resources Management* 22:651–670. DOI 10.1007/s11269-007-9184.

Deutsch, C. V. y A. G. Journel, (1998). *“GSLIB Geostatistical Software Library and User’s Guide”*. Universidad de Oxford.

Dhar, A. y B. Datta, (2010). "Logic based design of groundwater monitoring network for redundancy reduction". *Journal of Water Resources Planning and Management, ASCE*, 136 (1), 88-94.

Dokou, Z. y G. F. Pinder, (2009). "Optimal search strategy for the definition of a DNAPL source". *Journal of Hydrology*, vol. 376, págs. 542-556.

Dokou, Z. y G. F. Pinder, (2011). "Extension and field application of an integrated DNAPL source identification algorithm that utilizes stochastic modeling and a Kalman filter". *Journal of hydrology*, vol, 398, págs. 277–291

EPA (1985). "*Protecting our groundwater*". USA.

Evensen, G., (1994). "Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics". *J. Geophys. Res.*, 99, 10143-10162, 1994.

Evensen, G., (2009). "*Data assimilation-The ensemble Kalman filter*". Second Edition, Springer-Verlag.

Fetter, C. W., (1993). "*Contaminant Hydrogeology*". Macmillan Pub. Co.

Franssen, H.J.H., A. Alcolea, M. Riva, M. Bakr, N. v. d. Wiel, F. Stauffer, y A. Guadagnini, (2009). "A comparison of seven methods for the inverse modelling of groundwater flow. Application to the characterization of well catchments". *Advances in Water Resources*, doi: 10.1016/j.advwatres.2009.02.011.

Freeze, R. A., J. Massmann, L.S.T. Sperling, y B. James, (1990). "Hydrogeological decision analysis: 1. A framework". *Groundwater*, vol. 28, no. 5.

Gelhar, L. W., (1993). “*Stochastic Subsurface Hydrology*”. Prentice Hall, New Jersey.

Goldberg, D. E., (1989). “*Genetic Algorithm in search, optimization and machine learning*”. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Boston, MA, USA.

Harter, T., (1994). “*Unconditional and conditional simulation of flow and transport in heterogeneous, variably saturated porous media*”. Tesis de doctorado. Universidad de Arizona, E.U.

Herrera de Olivares, G. S., (1998). “*Cost Effective Groundwater Quality Sampling Network Design*”. Tesis de doctorado. Universidad de Vermont, E.U.

Herrera, G. S., J. Guarnaccia, G. Pinder, y R. Simuta-Champo, (2001). “Design of efficient space-time groundwater quality sampling networks”. *Memorias del International Symposium on Environmental Hydraulics*, Arizona, E.U., 2001.

Herrera, G. S. y Briseño, J., (2010). “Hydraulic conductivity and state estimation for stochastic flow and transport models”. *Memorias de la International Conference on Water Rock Interaction*, Guanajuato, México, 16-20 de agosto de 2010.

Herrera, G. S. y R. Simuta-Champo, (2012). “Optimal Design of Groundwater-Quality Sampling-Networks with 3D Selection of Sampling Locations Using an Ensemble Smoother”. *Journal of Water Resources Planning and Management* doi:10.1061/(ASCE)WR.1943-5452.0000230

Herrera, G. y G. Pinder, (2005). “Space-time optimization of groundwater quality sampling networks”. *Water Resources Research*, vol. 41, W12407. doi:10.1029/2004WR003626.

Jazwinski, A. H., (1970). *“Stochastic processes and filtering theory”*. Elsevier, New York, E.U.

Kim, K. y K. Lee, (2007). “Optimization of groundwater-monitoring networks for identification of the distribution of a contaminant plume”. *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.* 21: 785-794.

Kollat, J.B., P.M. Reed, y R. Maxwell, (2011). “Many-objective groundwater monitoring network design using bias-aware ensemble Kalman filtering, evolutionary optimization, and visual analytics.” *Water Resour. Res.*, v47, W02529, doi:10.1029/2010WR009194.

Kuri-Morales, A. y J. Galaviz-Casas, (2002). *“Algoritmos genéticos”*. Ciencia de la Computación, México.

Li, Y. y A. B. C. Hilton, (2005). “Reducing spatial sampling in long-term groundwater monitoring networks using ant colony optimization”. *International Journal of Computational Intelligence Research*, vol. 1, no. 1, 19-28.

Loaiciga, H. A., R.J. Charbenneau, L.G. Everett, G.E. Fogg, y B.F. Hobbs, (1992). “Review of groundwater quality monitoring network design”. *Journal Hydraulic Engineering* (ASCE), vol. 118, 1, 11-32 pp.

Massmann, J. y R. A. Freeze, (1987). “Groundwater contamination from waste management sites: the interaction between risk-based engineering design and regulatory policy. 1. Methodology”. *Water Resources Research*, vol. 23, no. 2, págs. 251-367.

McLaughlin, D., B.R. Lynn, L. Shu-Guang y J. Hyman, (1993). “A stochastic method for characterizing ground-water contamination”. *Groundwater*, vol. 31, no. 2.

Nowak W., F.J.P. de Barros y Y. Rubin, (2010). "Bayesian geostatistical design: Task-driven optimal site investigation when the geostatistical model is uncertain". *Water Resources Research*, vol. 46, W03535, doi:10.1029/2009WR008312.

Nunes, L. M., M. C. Cunha y L. Ribeiro, (2004). "Optimal space-time coverage and exploration costs in groundwater monitoring networks". *Environmental Monitoring and Assessment*, vol. 93, 103-104 pp.

Orr, S., (1993). "*Stochastic approach to steady state flow in nonuniform geologic media*". Tesis de doctorado. Universidad de Arizona, E.U.

Owen, A. B., (1994). "Controlling correlations in latin hypercube samples". *Journal of the American Statistical Association*, 89.

Reed, P., B. Minsker, y A. J. Volocchi, (2000). "Cost-effective long-term groundwater monitoring design using a genetic algorithm and global mass interpolation". *Water Resources Research*, vol. 36, no. 12, 3731-3741.

Reed, P. M. y B. Minsker, (2004). "Striking the balance: long-term groundwater monitoring design for conflicting objectives". *Journal of Water Resources Planning and Management*, vol. 130, no. 2.

Simuta-Champo, R y G. S. Herrera-Zamarrón, (2010). "Convergence analysis for Latin-hypercube lattice-sample selection strategies for 3D correlated random hydraulic-conductivity fields". *Geofísica Internacional*, 49 (3), 131-140.

Sun, A. Y., A. Morris y S. Mohanty, (2009). "Comparison of deterministic ensemble Kalman filters for assimilating hydrogeological data". *Advances in Water Resources*, doi:10.1016/j.advwatres.2008.11.006.

Van Leeuwen, P. J., y G. Evensen, (1996). "Data assimilation and inverse methods in terms of a probabilistic formulation". *Mon. Weather Rev.*, 124 , 2898–2913.

Wong, H. S., y W. W-G. Yeh, (2002). "Uncertainty analysis in contaminated aquifer management". *Journal of Water Resources Planning and Management*, vol. 128, no. 1, enero 1, DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9496(2002)128:1(33).

Wu, J., C. Zheng, y C.C. Chien, (2005). "Cost-effective sampling network design for contaminant plume monitoring under general hydrogeological conditions". *Journal of Contaminant Hydrology* 77, 41-65.

Wu, J., C. Zheng, C.C. Chien y L. Zheng, (2006). "A comparative study of Monte Carlo simple genetic algorithm and noisy genetic algorithm for cost-effective sampling network design under uncertainty". *Adv. Water Resour.*, 29: 899-911.

Wu, Y., (2003). "Optimal design of a groundwater monitoring network in Daqing, China". *Environmental Geology*, 45:527-535.

Wyss, G. D. y K. H. Jorgensen, (1998). "A User's Guide to LHS: Sandia's Latin Hypercube Sampling Software", Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM 87185-0747.

Zhang, D., (2002). "Stochastic methods for flow in porous media". Impresión Académica, San Diego California, E.U.

Zhang, Y., G. F. Pinder y G.S. Herrera, (2005). "Least cost design of groundwater quality monitoring networks". *Water Resources Research*, Vol. 41, W08412, doi:10.1029/2005WR003936, 2005.

Zhang, Y. y G. Pinder, (2003). "Latin hypercube lattice sample selection strategy for correlated random hydraulic conductivity fields". *Water Resources Research*, vol. 39, no. 8, 1226, doi:10.1029/2002WR001822.